VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta chemická

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Brno 2018 Bc. Ondřej Straka

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ
FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV CHEMIE MATERIÁLŮ
DEPARTMENT OF MATERIALS CHEMISTRY

POUŽITÍ KAPALINOVÝCH SCRUBBERŮ PŘI ODSTRAŇOVÁNÍ CO_2 ZE VZDUŠIN
USE OF GAS SRUBBER TO CLEAR CO_2 FROM GAS EMISION

DIPLOMOVÁ PRÁCE
MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE Bc. Ondřej Straka
AUTHOR

ŠKOLITEL prof. Ing. Tomáš Svěrák, CSc.
SUPERVISOR

BRNO 2018

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
FAKULTA CHEMICKÁ

Zadání diplomové práce

Číslo práce:	FCH-DIP1191/2017
Ústav:	Ústav chemie materiálů
Student:	**Bc. Ondřej Straka**
Studijní program:	Chemie, technologie a vlastnosti materiálů
Studijní obor:	Chemie, technologie a vlastnosti materiálů
Vedoucí práce:	**prof. Ing. Tomáš Svěrák, CSc.**
Akademický rok:	2017/18

Název diplomové práce:

Použití kapalinových scrubberů při odstraňování plynných polutantů ze vdušin

Zadání diplomové práce:

Literární rešerše pro separaci plynných polutantů ze vzdušin;
experimentální práce odstraňování zvoleného polutantu ze vzdušin na absoprčním scrubberu poloprovozní velikosti;
vyhodnocení experimentů.

Termín odevzdání diplomové práce: 7.5.2018

Diplomová práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí diplomové práce.

Bc. Ondřej Straka student(ka)	prof. Ing. Tomáš Svěrák, CSc. vedoucí práce	prof. RNDr. Josef Jančář, CSc. vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2018

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Diplomová práce je zaměřena na separaci oxidu uhličitého ze směsi plynů. Odstranění plynu je prováděno absorpcí do kapalné fáze. Teoretická část věnuje pozornost popisu přestupu hmoty přes mezifázové rozhraní kapalné a plynné fáze. Experimentální část se věnuje absorpci oxidu uhličitého do roztoku hydroxidu sodného pomocí kapalinového scrubberu.

KLÍČOVÁ SLOVA

Transport hmoty, reakce v heterogenním systému, absorpce, kapalinový scrubber

ABSTRACT

Diploma thesis concerned with separation of carbon dioxide from gas mixture. Elimination of gas is made by absorption into liquid phase. Theoretical part is based on study of mass transport through gas and liquid interphase. Experimental part deals with absorption of carbon dioxide to caustic soda solution via gass scrubber.

KEYWORDS

Mass transport, reaction in heterogeneous system, absorption, gas scrubber

STRAKA, Ondřej *Použití kapalinových scrubberů při odstraňování CO_2 ze vzdušin*: diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie materiálů, 2018. 85 s. Školitel prof. Ing. Tomáš Svěrák, CSc.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Použití kapalinových scrubberů při odstraňování CO_2 ze vzdušin“ jsem vypracoval samostatně pod vedením školitele diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené diplomové práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této diplomové práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a/nebo majetkových a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů, včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

Brno ....

(podpis autora)

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych poděkoval vedoucímu diplomové práce panu prof. Ing. Tomáši Svěrákovi, CSc. za odborné vedení, konzultace, trpělivost a podnětné návrhy k práci. Dále bych chtěl poděkovat panu Ing. Josefovi Kalivodovi PhD. za spolupráci a cenné rady, bez kterých by nebylo možné tuto práci vypracovat. Poděkování patří také mojí rodině, která mi poskytla zázemí k vypracování práce.

Brno ....

(podpis autora)

Fakulta strojního inženýrství
Vysoké učení technické v Brně
Technická 2896/2
616 69 Brno
Česká republika
http://www.heatlab.cz

PODĚKOVÁNÍ

Výzkum popsaný v této diplomové práci byl realizován v rámci Laboratoří přestupu tepla a proudění a financován Technologickou agenturou České republiky – Program na podporu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje EPSILON; registrační číslo TH01030820.

Brno .....

.....
(podpis autora)

T A
Č R

Program **Epsilon**

OBSAH

Úvod **1**

1 Teoretická část **3**
1.1 Transport hmoty . . . 3
1.1.1 Transport hmoty v nehybném systému . . . 4
1.1.2 Transport hmoty v systému s pohybujícími se fázemi . . . 7
1.1.3 Filmová teorie . . . 8
1.1.4 Turbulentní difuzivita . . . 10
1.1.5 Koeficienty přestupu hmoty . . . 10
1.2 Přestup hmoty přes mezifázové rozhraní . . . 11
1.2.1 Koeficienty prostupu hmoty . . . 13
1.3 Absorpce . . . 13
1.3.1 Rovnováha při absorpci . . . 14
1.3.2 Rychlost absorpce . . . 16
1.3.3 Rozpustnost plynů v kapalinách . . . 17
1.3.4 Rozpustnost plynu v roztocích elektrolytů . . . 17
1.4 Fyzikální absorpce . . . 18
1.4.1 Praní vodou . . . 18
1.4.2 Rectisol a Solexol . . . 19
1.4.3 Vypírání uhlovodíků . . . 19
1.5 Chemisorpce . . . 20
1.5.1 Chemická absorpce CO_2 . . . 23
1.6 Typy absorpčních zařízení . . . 26
1.6.1 Povrchový absorbér . . . 26
1.6.2 Sprchový absorbér – scrubber . . . 27
1.6.3 Náplňový absorbér . . . 28
1.6.4 Probublávající absorbér . . . 30
1.6.5 Ventouriho cyklónový absorbér . . . 30
1.6.6 Absorpce na rotačním čepelovém loži . . . 31

2 Experimentální část **33**
2.1 Popis poloprovozního scrubberu . . . 33
2.1.1 Ovládací panel . . . 34
2.1.2 Okruh kapalné fáze . . . 34
2.1.3 Okruh plynné fáze . . . 34
2.1.4 Regulační prvky . . . 35
2.1.5 Měřící prvky a přístroje . . . 37
2.2 Plán experimentu . . . 37
2.2.1 Postup experimentu . . . 38
2.2.2 Použité chemikálie . . . 39
2.2.3 Sled experimentů . . . 39
2.3 Vyhodnocení experimentálních dat . . . 40
2.3.1 Hydraulické charakteristiky . . . 40
2.3.2 Výpočty charakterizující chemickou absorpci . . . 45
2.4 Diskuze výsledků . . . 52
2.4.1 První část – vliv samostatných prvků . . . 52

2.4.2 Druhá část 54

3 Závěr **59**

Literatura **61**

Seznam použitých zkratek a symbolů **65**

Seznam příloh **75**

A Přílohy **77**
A.1 Tabelované hodnoty 77
A.1.1 Výpočet difuzivity 77
A.1.2 Hodnoty příspěvku plynu k rozpustnostnímu faktoru 77
A.2 Experimentální data 78
A.2.1 První část 78
A.2.2 Teplotní závislost 81
A.2.3 Závislost na obsahu kontaminantu 84

ÚVOD

Lidská existence je velkou měrou závislá na spalování fosilních paliv. Svět spotřebuje přibližně 14 biliónů wattů energie, 33 % pochází z ropy, 25 % z uhlí, 20 % ze zemního plynu, 7 % z jaderného štěpení, 15 % z biomasy a vodních elektráren a pouhých 0,5 % ze slunce a z obnovitelných zdrojů. Spalování fosilních paliv a biomasy s sebou přináší emise CO_2. Emise oxidu uhličitého spolu s ostatními plynnými polutanty způsobují klimatické změny. Oxid uhličitý, methan, ale také ozon nebo oxid dusný jsou antropogenní skleníkové plyny, jejichž podíl v atmosféře je závislý na projevech lidské populace [1].

Skleníkové plyny vytváří v atmosféře vrstvu, která způsobuje odraz infračerveného záření zpět na zemi, díky čemu se atmosféra otepluje. Před průmyslovou revolucí byl obsah CO_2 270 ppm, v roce 2013 byl naměřen obsah 387 ppm, v průběhu vypracování této práce hodnota obsahu CO_2 v atmosféře málokdy klesla pod 500 ppm. V roce 2008 bylo emitováno do ovzduší následkem spalování paliv a odlesňování 9,4 miliard tun CO_2, ale pouhých 5 miliard tun bylo zachyceno pomocí oceánů a vegetace, zbylých 4,4 miliard tun zůstane v atmosféře po desetiletí [1].

Ohledně redukce emisí skleníkových plynů vyšel v platnost v roce 1997 Kjótský protokol, jedná se o mezinárodní úmluvu OSN o změně klimatu. Země Evropské unie se v Kjótském protokolu zavázaly snížit emise skleníkových plynů o 5,2 % ve srovnání se stavem v roce 1990. V roce 2012 byl schválen dodatek o pokračování platnosti protokolu do roku 2020. Tentokrát se však emise skleníkových plynů mají snížit o 20 % [2].

Kalifornská společnost Planktos navrhla pokus o hnojení části Atlantského oceánu železem, kvůli zvýšení obsahu řas, které by pomohly snížit obsah CO_2 v atmosféře. Londýnská konvence omezující ukládání odpadů do moří a oceánů však tento experiment ukončila [1].

Přijatelnější technologií je tzv. sekvestrace uhlíku, kdy oxid uhličitý má být zachycen u zdroje, zkapalněn a uložen pod zem. Tento působ je sice efektivní, ale velmi nákladný, neřeší však problém s CO_2 již obsaženým v atmosféře [1].

J. Craig Venter navrhl využití genetického inženýrství k vytvoření formy života schopné absorbovat velké množství CO_2 a měnit jej např na CH_4. Na zemi žije spousta takových organismů, ale bylo by třeba je modifikovat tak, aby zvýšili svůj výkon a byli ochotni vegetovat např. i v uhelných elektrárnách [1].

1 TEORETICKÁ ČÁST

1.1 Transport hmoty

Probíhá-li transport látky z jádra fáze směrem k mezifázovému rozhraní vlivem hnacích sil, jedná se o přestup hmoty. K popisu transportu hmoty z jádra fáze k mezifázovému rozhraní, přechodu skrz něj a transportu do jádra druhé fáze, používáme termín prostup hmoty. Empirický přístup k popisu umožňují koeficient přestupu a koeficient prostupu hmoty [3].

Přestup hmoty závisí na difuzivitách obou zúčastněných látek a dalších empirických faktorech, jako je např. geometrie výměníku hmoty. Pokud je tok fází rovnoběžný s mezifázovým rozhraním, skrz které probíhá transport hmoty, je koeficient přestupu hmoty empirickou kombinací podmínek děje. Pokud však probíhá transport mezi nehybnými fázemi, kdy dochází pouze k mikroskopickému chaotickému pohybu, závisí děj pouze na vzájemných difuzivitách. Difúze je způsobena nepravidelným tepelným pohybem molekul a probíhá ve směru koncentračního gradientu [4].

Míra velikosti hnací síly difúze je záporně vzatý gradient koncentrace, označený jako koncentrační spád – pokles koncentrace na jednotku délky. Rychlost difúze ovlivňuje také odpor proti přestupu hmoty. Odpor prostředí proti přestupu hmoty je v nehybném systému dán pracovními podmínkami jako teplota a tlak. V pohyblivém systému klesá odpor se vzrůstajícím počtem turbulencí v systému. Jinými slovy; v intenzivně míchaném systému probíhá transport hmoty lépe než v případě, kdy fáze vzájemně proudí klidně. Účinnost přestupu hmoty může být zvýšena také prostřednictvím teplotního či tlakového gradientu, toho se ale v praxi příliš nevyužívá. Koncentrační gradient je definován jako:

$$\nabla C_\mathrm{A} = \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial x}\boldsymbol{i} + \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial y}\boldsymbol{j} + \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial z}\boldsymbol{k}, \tag{1.1}$$

kde vektor ∇C_A je orientovaný do směru nejstrmějšího růstu koncentrace a má jednotku $\mathrm{mol{\cdot}m^{-4}}$, kde symbol ∇ (nabla) značí diferenciální operátor, jehož výsledkem je vektorové pole určující velikost a směr změny skalárního pole, $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$ jsou jednotkové vektory v kartézském souřadnicovém systému, x, y a z jsou prostorové souřadnice [4, 5].

Koncentrační gradient je v rovnici (1.1) funkcí času i polohy. V případě, kdy je hmota kontinuálně přiváděna do místa s vyšší koncentrací a kontinuálně odváděna z místa s nižší koncentrací, lze gradient považovat za časově nezávislý. Oddělování žádané složky se uskutečňuje prostřednictvím prostupu hmoty. Na základě skupenství zúčastněných složek lze rozdělit difúzní procesy takto:

- g–ℓ: absorpce, destilace
- g–s: adsorpce, sušení
- ℓ–ℓ: extrakce
- ℓ–s: krystalizace, rozpouštění, louhování

Dále lze přidat také membránové procesy, kdy dvě různé fáze jsou v místě kontaktu odděleny polopropustnou membránou [5].

Při řešení problematiky transportu látky se uplatňují dvě metody. První vychází z rychlosti difúze, je vhodná při souvislém kontaktu fází (náplňová kolona). Druhý způsob vycházející z rovnovážného stupně se uplatňuje v případech se stupňovitým kontaktem fází (etážová kolona) [5].

1.1.1 Transport hmoty v nehybném systému

Difúzní toky v systému lze popsat zobecněným prvním Fickovým zákonem, který vychází z konstitutivní rovnice, představující matematický model chování materiálu [6]:

$$\boldsymbol{J}\left(\Lambda\right) = J\left(\Lambda^{\circ}\right) + \frac{\partial J\left(\Lambda^{\circ}\right)}{\partial \nabla T}\nabla T + \frac{\partial J\left(\Lambda^{\circ}\right)}{\nabla v_{\mathrm{b}}}\nabla v_{\mathrm{b}} + \sum_{j=1}^{n-1}\frac{J\left(\Lambda^{\circ}\right)}{\nabla w_i}\nabla w_i \tag{1.2}$$

$$\left(\Lambda\right) = \left(T, v_{\mathrm{b}}, w_i, \nabla T, \nabla v_{\mathrm{b}}, \nabla w_i\right), \tag{1.3}$$

kde J je hustota toku hmoty, symbol Λ označuje soubor nezávisle proměnných veličin, které závisí pouze na čase a polohovém vektoru (teplota, měrný objem, složení a jejich gradienty). Pokud se systém blíží homogennímu stavu, lze gradienty nezávisle proměnných veličin považovat za nulové, platí tedy [6]:

$$\Lambda^{\circ} = \left(T, v_{\mathrm{b}}, w_i, \vec{0}, \vec{0}, \vec{0}\right). \tag{1.4}$$

Při protisměrné výměně hmoty v nehybné soustavě, tedy obě složky soustavy difundují proti sobě, za předpokladu, že probíhá pouze difúze vlivem koncentrace,lze zobecněný tvar prvního Fickova zákona (1.2) zjednodušit na:

$$J_{\mathrm{A}x} = -D_{\mathrm{AB}}\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial x}, \tag{1.5}$$

kde $J_{\mathrm{A}x}$ je ustálená rychlost molárního toku látky A ve směru osy x (mol m^{-2}s^{-1}), D_{AB} je vzájemná difuzivita složky A a B (m^{2}s^{-1}) a x je vzdálenost (m).

Množství látky A přenesené přestupem hmoty ve směru difuze x definuje pojem konvence (z anglického conveyance). Její vliv na celkový transport hmoty nebývá vyšší něž 10 % proto bývá často zanedbána [4].

Fickův zákon říká, že rychlost přestupu hmoty v jednom směru odpovídá rozdílu koncentrace v tomto směru, konstantou úměry je difuzivita složky A v prostředí indiferentní (netečné) složky B.

Zlomek v rovnici (1.5) vyjadřuje koncentrační gradient, avšak pouze ve směru osy x, obecně platný zákon má tvar:

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}} = D_{\mathrm{AB}}\left(-\nabla C_{\mathrm{A}}\right), \tag{1.6}$$

dále dosazením rovnice (1.1) do rovnice (1.6) dostaneme vektor hustoty difúzního toku látkového množství složky A při protisměrné difúzi složek A a B v nehybné soustavě fází:

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}} = -D_{\mathrm{AB}}\left(\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial x}\boldsymbol{i} + \frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial y}\boldsymbol{j} + \frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial z}\boldsymbol{k}\right), \tag{1.7}$$

kde $\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}}$ je vektor intenzity difúzního toku látkového množství látky A (mol m^{-2}s^{-1}). Pravá strana rovnice (1.7) vyjadřuje součet příspěvků intenzity difúzního toku ve třech směrech.

Skalárním součinem vektorů získáme vztah pro místní ustálený diferenciální tok látkového množství složky A:

$$\mathrm{d}\dot{n}_{\mathrm{A}} = \boldsymbol{J}_{\mathrm{A}} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{A} = J_{\mathrm{A}}\mathrm{d}A\cos\alpha, \tag{1.8}$$

kde $\mathrm{d}\boldsymbol{A}$ je elementární plocha (m^2), $\dot{n}_{\mathrm{A}}$ je tok látkového množství látky A (mol s^{-1}) a α (°) je úhel který, svírá směr toku látky a elementární plocha A. Pokud probíhá difúze kolmo na elemntární plochu $\boldsymbol{A}$, tedy v jednom směru, tak $\cos\alpha = 1$ a platí:

$$J_{\mathrm{A}} = \frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A}, \tag{1.9}$$

kde J_A již není vektor, vzhledem k tomu, že se uvažuje pouze jednosměrná difúze.

Porovnáním vztahů (1.5) a (1.9) získáme:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = -D_\mathrm{AB}\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial x}, \tag{1.10}$$

a následnou integrací získáme integrální rovnici ustálené rychlosti jednosměrné difúze složky A při protisměrné výměně látky v nehybné soustavě:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = \frac{D_\mathrm{AB}}{x}\left(C_\mathrm{A1} - C_\mathrm{A2}\right), \tag{1.11}$$

kde x $(x_2 - x_1)$ vyjadřuje vzdálenost míst mezi kterými se uskutečňuje výměna. Z místa x_1 kterému odpovídá vyšší koncentrace C_A1 probíhá difúze do místa x_2 s nižší koncentrací C_A2. Levá strana rovnice představuje rychlost přestupu hmoty, tedy tok látkového množství jednotkovou plochou [5].

Difúze v plynné fázi

Na základě kinetické teorie plynů lze předpokládat, že všechny směry a rychlosti pohybu libovolné entity plynu jsou stejně pravděpodobné, to platí i pro plynné směsi, lze tedy očekávat, že entity každé složky plynné směsi budou rovnoměrně rozložené v celém objemu. Plynné směsi tak tvoří prostorově homogenní koncentrační pole. Nehomogenita koncentrace některé složky vyvolává difúzní tok tím směrem, který nejrychleji vede k rovnováze. Difúze v plynné fázi probíhá relativně pomalu, protože vzájemné srážky děj zpomalují. K rychlejší difúzi dochází při vyšších teplotách (zvýšení translační rychlosti entit) a tlaku (větší počet vzájemných srážek) [5].

Diferenciální tvar rovnice ustálené rychlosti jednosměrné difúze při protisměrné výměně (1.10) v dvousložkové plynné fázi po modifikaci stavovou rovnicí ideálního plynu má tvar:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = -\frac{D_\mathrm{AB}}{\mathrm{R}T}\frac{\mathrm{d}P_\mathrm{A}}{\mathrm{d}x}, \tag{1.12}$$

kde P_A je parciální tlak složky A, R je univerzální plynová konstanta a T je absolutní teplota (K). Integrální tvar je:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = -\frac{D_\mathrm{AB}}{\mathrm{R}Tx}\left(P_\mathrm{A1} - P_\mathrm{A2}\right). \tag{1.13}$$

Rychlosti difúze obou složek jsou stejné, výměna je tedy ekvimolární platí tedy:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = -\frac{\dot{n}_\mathrm{B}}{A}, \quad \frac{\mathrm{d}P_\mathrm{A}}{\mathrm{d}x} = -\frac{\mathrm{d}P_\mathrm{B}}{\mathrm{d}x}, \tag{1.14}$$

kde $\dot{n}_\mathrm{A}$, $\dot{n}_\mathrm{B}$ je tok látkového množství složky A a B, P_A, P_B je parciální tlak složky A a B.

Při jednosměrném transportu látky v nehybné fázi difunduje jedna složka v prostředí druhé (indiferentní). Pokud probíhá transport hmoty přes mezifázové rozhraní, tak v plynné fázi dochází v této oblasti ke vzniku tlakového gradientu vlivem úbytku složky A (přestup indiferentní látky B se neuvažuje). Vlivem snížení tlaku u mezifázového rozhraní dojde k pohybu celé fáze. Celkový ustálený lákový tok $\dot{n}_\mathrm{A}$ se skládá ze dvou složek:

- difúzní tok látkového množství složky A; $\dot{n}_\mathrm{Ad}$ účinkem gradientu parciálního tlaku
- konvektivní tok látkového množství látky A; $\dot{n}_\mathrm{Ak}$ účinkem gradientu celkového tlaku

Difúzní koeficient D_{AB}, který je vhodnější pro plynnou fázi značit D_{g} je nutné pro každou konkrétní směs experimentálně stanovit. To je možné provést pomocí dvou nádob o stejném objemu. Každá nádoba je naplněná příslušným čistým plynem, v čase $\tau = 0$ jsou nádoby spojeny a po určitém čase τ se plyn v nádobách podrobí analýze, D_{g} lze stanovit následujícím způsobem:

$$D_{\mathrm{g}} = \frac{V_1 V_2}{\frac{S}{x}\left(V_1 + V_2\right)\tau} \ln \frac{C^0_{\mathrm{A1}} - C^0_{\mathrm{A2}}}{C_{\mathrm{A1}} - C_{\mathrm{A2}}} \tag{1.15}$$

kde V_1 a V_2 jsou objemy jednotlivých nádob, S je difúzní plocha (průřez spojovacího potrubí), x je difúzní vzdálenost (délka spojovacího potrubí), τ je čas látkové výměny, C^0_{A1} a C^0_{A2} jsou molární koncentrace složky A v čase $\tau = 0$, C_{A1} a C_{A2} jsou experimentálně stanovené koncentrace v čase τ [5].

Difúzní koeficient je závislý jak na teplotě (se stoupající teplotou vzrůstá), tak i tlaku (se stoupajícím tlakem klesá) a vlastnostech obou plynů. Přibližnou hodnotu D_{g} při jiném tlaku a teplotě lze vypočítat ze vztahu:

$$D_{\mathrm{g}} = D_{\mathrm{g1}} \frac{p_1}{p} \left(\frac{T}{T_1}\right)^{1{,}75}. \tag{1.16}$$

Pohyb plynu vlivem rozdílné teploty se nazývá efúze, při dosažení rovnováhy platí:

$$\frac{p_1}{p_2} = \sqrt{\frac{T_1}{T_2}}. \tag{1.17}$$

V kapalinách je počet molekul ve stejném objemu mnohem vyšší než u plynů, volná dráha translačního pohybu je tedy malá, proto difúze probíhá mnohem hůře než u plynů. Přitažlivé síly mezi molekulami mají zásadní vliv na difúzi. Přesto se používají analogické rychlostní rovnice jako v plynné fázi. Diferenciální rovnice intenzity difúzního toku protisměrné výměny látky v jednom směru má tvar podobný jako rovnice (1.10):

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = -D_\ell \frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}x}, \tag{1.18}$$

její integrální tvar je:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = \frac{D_\ell}{x}\left(C_{\mathrm{A1}} - C_{\mathrm{A2}}\right), \tag{1.19}$$

kde D_ℓ je difúzní koeficient látky A v roztoku s látkou B, kde látka B může být kapalina nebo plyn.

Stanovení D_ℓ probíhá podobně jako stanovení D_{g}. Dvě nádoby s roztoky složky A se složkou B o různé koncentraci jsou odděleny pórovitou membránou. Obě strany membrány jsou intenzivně míchány z důvodu dosažení homogenního koncentračního pole. Po ukončení experimentu se obsah obou nádob podrobí analýze a stanoví se D_ℓ podle rovnice (1.15) [5].

Hodnota difúzního koeficientu kapaliny je při stejných podmínkách přibližně o čtyři řády nižší. Difúzní koeficient kapaliny je závislý na koncentraci difundující složky. Hodnotu D_ℓ lze vypočítat ze semiempirického vztahu:

$$D_\ell = 5{,}879 \cdot 10^{-17}\, T \frac{\left(\psi_{\mathrm{B}}\, M_{\mathrm{B}}\right)^{0{,}5}}{\eta_{\mathrm{B}}\, V_{\mathrm{mA}}^{0{,}6}}, \tag{1.20}$$

kde T je absolutní teplota roztoku, ψ_{B} je bezrozměrný asociační parametr rozpouštědla (2,6 voda, 1,9 metanol, 1,5 etanol, 1,0 benzen,...), M_{B} je molární hmotnost rozpouštědla, η_{B} dynamická viskozita rozpouštědla (Pa s) při teplotě roztoku, V_{mA} molární objem rozpuštěné složky A při normální teplotě varu ($\mathrm{m^3mol^{-1}}$). V kapalné fázi platí, že difúzní koeficient složky A v prostředí složky B má jinou hodnotu než difúzní koeficient složky B v prostředí složky A. Na rozdíl od plynné fáze platí nerovnost, tedy platí nerovnost; $D_{\mathrm{AB}} \neq D_{\mathrm{BA}}$. Je zcela evidentní, že difuzivita CO_2 bude odlišná než difuzivita vody v CO_2 [5, 7].

Průměrná chyba vztahu (1.20) je asi 10 % a nelze jej použít, vzniká-li mezi látkou a rozpouštědlem komplex. Nysing a kol. (1959) zjistili, že difuzivita CO_2 se v roztocích elektrolytů mění ve vztahu (1.20) spíše s $\eta_B^{-0,85}$ než s η_B^{-1} [7].

1.1.2 Transport hmoty v systému s pohybujícími se fázemi

Rychlost transportu hmoty v proudící fázi určuje nejen difúzní příspěvek, ale i důležitý konvektivní příspěvek vlivem rychlosti promíchávání objemu proudící fáze. Elementárnímu objemu dV přísluší vektor lokální rychlosti proudění $\boldsymbol{v}$. Rychlost přestupu lze v tomto případě vyjádřit pomocí změny koncentrace v čase, jejíž fyzikální význam je okamžitá rychlost akumulace objemového látkového množství:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial \tau} = -\mathrm{div}\bar{\boldsymbol{\phi}}_{\mathrm{A}} + \dot{R}_{\mathrm{A}}, \tag{1.21}$$

kde $\bar{\boldsymbol{\phi}}_{\mathrm{A}}$ je vektor celkové okamžité intenzity toku látkového množství látky A, který se skládá z difúzního a konvektivního příspěvku – viz (1.22), $\dot{R}_{\mathrm{A}}$ je potom okamžitá rychlost tvorby objemového látkového množství složky A v lokálním elementárním objemu chemickou reakcí ($\mathrm{mol\,m^{-3}s^{-1}}$). $\dot{R}_{\mathrm{A}}$ je v případě fyzikální absorpce je nulový. Záporné znaménko určuje směr divergence vektoru, rychlost úbytku složky A se mění na rychlost přírůstku látkového množství v elementárním objemu [5].

$$\bar{\boldsymbol{\phi}}_{\mathrm{A}} = (C_{\mathrm{A}}\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{J}_{\mathrm{A}} \tag{1.22}$$

Při fyzikální absorpci lze vyjádřit úbytek látky A v čase jako:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial \tau} = -\mathrm{div} \cdot \Big[(C_{\mathrm{A}}\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{J}_{\mathrm{A}}\Big], \tag{1.23}$$

po úpravě dostaneme:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial \tau} = -\boldsymbol{v} \cdot \mathrm{div}\, C_{\mathrm{A}} - C_{\mathrm{A}}\,(\mathrm{div}\boldsymbol{v}) - \mathrm{div}\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}}. \tag{1.24}$$

Pro nestlačitelné proudící tekutiny, proudící do rychlosti $100\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ při stálé teplotě, je jejich hustota konstantní a platí tedy $\mathrm{div}\boldsymbol{v} = 0$, po dosazení prvního Fickova zákona (1.6) za $\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}}$ dostaneme:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial \tau} = -\boldsymbol{v} \cdot \mathrm{div}\, C_{\mathrm{A}} - \mathrm{div}\left(-D_{\mathrm{AB}}\nabla C_{\mathrm{A}}\right). \tag{1.25}$$

Vykonáním divergence v druhém členu na pravé straně dostaneme:

$$-\,\mathrm{div}\left(-D_{\mathrm{AB}}\nabla C_{\mathrm{A}}\right) = D_{\mathrm{AB}}\left(\mathrm{div}\nabla C_{\mathrm{A}}\right), \tag{1.26}$$

kde divergenci gradientu lze nahradit Laplaceovým operátorem Δ ($\mathrm{div}\nabla x = \Delta x$), po dosazení (1.26) do (1.25) dostaneme:

$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla C_\mathrm{A} = D_\mathrm{AB} \Delta C_\mathrm{A}. \tag{1.27}$$

Jde o skalární parciální diferenciální rovnici, jenž vyjadřuje celkovou rychlost přírůstku látkového množství látky A v objemu dV, tedy součet lokální rychlosti $\partial C_\mathrm{A}/\partial \tau$ konvektivní rychlosti $\boldsymbol{v} \cdot \nabla C_\mathrm{A}$. Při rozepsání jednotlivých členů bude mít rovnice (1.27) tvar:

$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} + \left(v_x \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial z} \right) = D_\mathrm{AB} \left(\frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial z^2} \right). \tag{1.28}$$

Jedná se o skalární parciální diferenciální rovnici druhého řádu, obsahující čtyři nezávisle proměnné veličiny (τ, x, y, z). Reprezentuje funkci, na jejíž zobrazení by byl nutný prostor o pěti rozměrech, proto se v praxi používají zjednodušení [5].

Vezmeme-li v potaz nehybnou fázi za neustáleného stavu, bude vektor lokální rychlosti nulový ($\boldsymbol{v} = 0$), dostaneme tak:

$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} = D_\mathrm{AB} \Delta C_\mathrm{A}, \tag{1.29}$$

a v rozepsaném tvaru:

$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} = D_\mathrm{AB} \left(\frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial z^2} \right). \tag{1.30}$$

Za předpokladu jednosměrné difúze se (1.30) zjednoduší na tvar:

$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} = D_\mathrm{AB} \frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial x^2}. \tag{1.31}$$

Rovnice (1.31) je formální zápis druhého Fickova zákona. První Fickův zákon (1.10) vyjadřuje rychlost ustálené difúze složky při jednorozměrové protisměrné výměně v nehybném systému, koncentrace je pouze funkcí jedné prostorové souřadnice $C_\mathrm{A} = f(x)$. Druhý Fickův zákon vyjadřuje okamžitou rychlost neustálené difúze při jednorozměrové protisměrné výměně, koncentrace je funkcí prostorové souřadnice a času $C_\mathrm{A} = f(\tau, x)$ za předpokladu, že difúze neovlivňuje teplotu kapaliny [5, 7].

V rozloženém tvaru lze rovnici (1.31) zapsat jako:

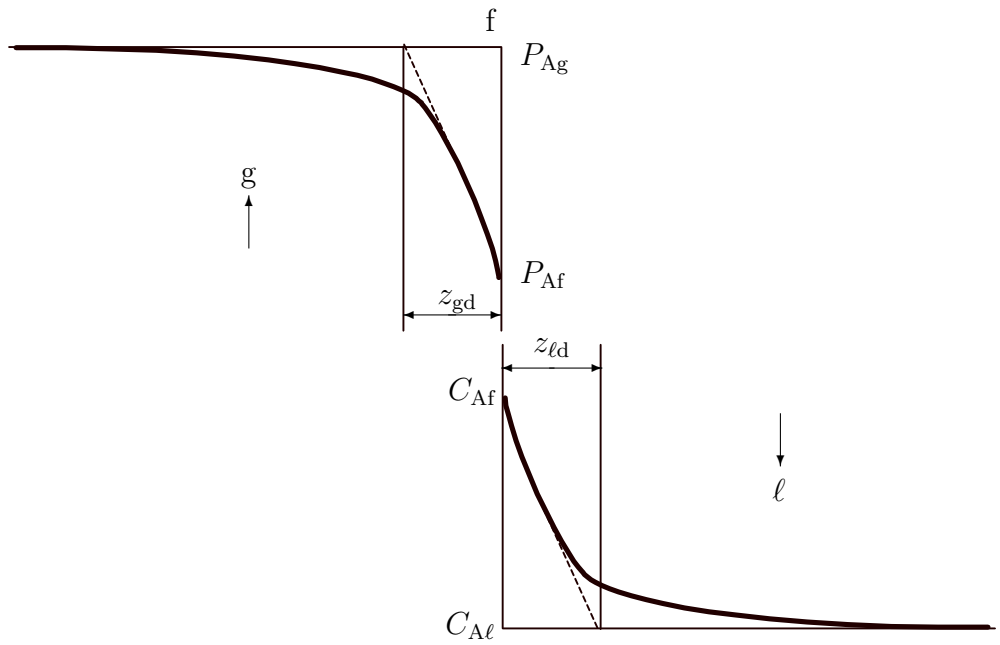
$$\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} = D_\mathrm{AB} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial x} \right). \tag{1.32}$$

1.1.3 Filmová teorie

Vzhledem k tomu, že řešení rovnice (1.28) je matematicky náročné, byla navržena difúzní filmová teorie. Při laminárním proudění proudí kapalina rovnoběžně s mezifázovým rozhraním a přestup hmoty probíhá kolmo na tento směr, lze tedy uvažovat, že mezi rychlostí přestupu hmoty v laminárně proudící a nehybné fázi není rozdíl. Při turbulentním proudění probíhá přestup hmoty oproti nehybnému systému mnohem rychleji v důsledku mnohem většího příspěvku konvektivního proudění, vlivem intenzivního promíchávání elementárních objemů. O charakteristice proudění vypovídá Reynoldsovo kritérium zjistitelné dle vztahu (1.33).

$$Re = \frac{\rho \cdot w \cdot d}{\eta}, \tag{1.33}$$

kde ρ je hustota ($\mathrm{kg\,m^{-3}}$), w je rychlost proudění ($\mathrm{m\,s^{-1}}$), d je průměr potrubí nebo jiný charakteristický rozměr (m) a η je dynamická viskozita tekutiny (Pa s). Pokud platí $Re < 1100$ jedná se o laminární proudění, pokud platí $Re > 2000$ jedná se o proudění turbulentní. Oblast, kdy $Re \in \langle 1100; 2000 \rangle$, odpovídá přechodné oblasti. Laminární proudění lze definovat rovnoběžnými proudnicemi, v turbulentní oblasti dochází ke vzniku makroskopických vírů (nejmenší vír se odhaduje v rozmezí 10 až 100 µm a obsahuje přibližně 10^{12} entit) [5].



Obr. 1.1: Závislost P_{A} a C_{A} na vzdálenosti od mezifázového rozhraní při přestupu látky A z plynné do kapalné fáze

Dle filmové teorie se v libovolně proudící tekutině vytvoří v těsné blízkosti mezifázového rozhraní tenký laminární film, jehož tloušťka závisí na míře turbulence proudění. Dále předpokládejme, že mezifázové rozhraní je oblast rovnovážného stavu, což nelze experimentálně dokázat, ale tímto způsobem odvozené rychlostní rovnice poskytují souhlasné výsledky s naměřenými hodnotami. Odpor proti přestupu hmoty se rozděluje na odpor proti přestupu hmoty v laminárním filmu a odpor proti přestupu v jádru fáze. Rychlost přestupu hmoty v laminárním filmu lze vyjádřit podobně jako u nehybné fáze (1.13) pro plynnou fázi:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = \frac{D_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R}Tz_{\mathrm{gd}}} \left(P_{\mathrm{Ag}} - P_{\mathrm{Af}} \right), \tag{1.34}$$

kde z_{gd} je tloušťka difúzního filmu v plynné fázi, D_{g} je difúzní koeficient plynné fáze, P_{Ag} je parciální tlak složky A v jádru plynné fáze a P_{Af} je parciální tlak složky A na mezifázovém rozhraní. Zvýšením intenzity turbulencí se sníží tloušťka filmu, je tedy zřejmé, že přestup hmoty záleží na způsobu proudění obou fází. Jinými slovy; rychlost přestupu bude vyšší při vyšší míře turbulence [5].

Pro kapalnou fázi je možné vyjádřit rychlostní rovnici obdobným způsobem:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = \frac{D_{\ell}}{z_{\ell\mathrm{d}}} \left(C_{\mathrm{Af}} - C_{\mathrm{A}\ell} \right), \tag{1.35}$$

kde $z_{\ell\mathrm{d}}$ je tloušťka difúzního filmu v kapalné fázi, C_{Af} je koncentrace složky A na mezifázovém rozhraní (tato koncentrace odpovídá rozpustnosti plynu při daném parciálním tlaku a považuje se za konstantní) a $C_{\mathrm{A}\ell}$ je koncentrace složky A v jádru kapaliny. Na obr. 1.1 je patrné schéma závislosti parciálního tlaku P_{A} v proudící plynné fázi (g) a koncentrace složky v kapalné fázi (ℓ) na vzdálenosti od mezifázového rozhraní (f) [5, 7].

1.1.4 Turbulentní difuzivita

Starší způsob jak se vyhnout složitým početním operacím oproti filmové teorii je modifikace rychlostní rovnice (první Fickův zákon) (1.5) o turbulentní difuzivitu:

$$J_{\mathrm{A}x} = -\left(D_{\mathrm{AB}} + \varepsilon_D\right), \tag{1.36}$$

kde ε_D je turbulentní difuzivita [5].

Problematika se tedy zabývá určováním hodnoty ε_D, která je závislá na fyzikálních vlastnostech fáze a vzdálenosti od mezifázového rozhraní. Předpokládáme, že při laminárním toku probíhá výměna hmoty jako u nehybné fáze. V turbulentně proudící kapalině je hodnota ε_D na mezifázovém rozhraní nulová a směrem do jádra kapaliny stoupá. Hodnotu ε_D nelze při určité vzdálenosti od mezifázového rozhraní jasně určit, proto se používá integrální střední turbulentní difuzivita $\bar{\varepsilon}_D$, integrální tvar rovnice (1.36) má tvar [5]:

$$J_{\mathrm{A}x} = \frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = \frac{D_{\mathrm{AB}} + \bar{\varepsilon}_D}{x_2 - x_1}\left(C_{\mathrm{A1}} - C_{\mathrm{A2}}\right). \tag{1.37}$$

1.1.5 Koeficienty přestupu hmoty

Rychlostí rovnice je funkce, vyjadřující rychlost přestupu látky jako veličinu přímo úměrnou velikosti hnací síly, součinitel této úměrnosti je koeficient přestupu látky ve fázi. Obecně se definuje jako látkové množství látky, které prošlo jednotkovou plochou za jednotku času při jednotkové hnací síle. Pro plynnou fázi se hnací síla vyjadřuje rozdílem parciálních tlaků, platí tedy:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = k_{\mathrm{g}P}\left(P_{\mathrm{Ag}} - P_{\mathrm{Af}}\right), \tag{1.38}$$

kde $k_{\mathrm{g}P}$ je koeficient přestupu látky v plynné fázi (mol m^{-2}s^{-1}Pa^{-1}), příslušející rychlostní rovnici, ve které je hnací síla vyjádřena rozdílem parciálních tlaků. Pro $k_{\mathrm{g}P}$ při výměně látky v nehybné plynné fázi platí:

$$k_{\mathrm{g}P} = \frac{D_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R}Tz_{\mathrm{g}}}. \tag{1.39}$$

V případě turbulentně proudícího plynu se vzdálenost překonaná difúzí z_{g} v souladu s filmovou teorií nahradí tloušťkou laminárního filmu z_{gd} [5].

V kapalné fázi se hnací síla vyjadřuje rozdílem koncentrací složky, platí tedy:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = k_{\ell C}\left(C_{\mathrm{Af}} - C_{\mathrm{A}\ell}\right), \tag{1.40}$$

kde $k_{\ell C}$ je koeficient přestupu látky v kapalné fázi, index C poukazuje na to, že hnací síla je vyjádřena rozdílem koncentrací, jednotka je m s^{-1}. V nehybné kapalné fázi, případně v laminárně proudící fázi, lze koeficient přestupu vyjádřit takto [5]:

$$k_{\ell C} = \frac{D_{\ell}}{z_{\mathrm{gd}}}, \tag{1.41}$$

kde $z_{\ell\mathrm{d}}$ je tloušťka difúzního filmu. Pro turbulentně proudící kapalinu platí dle filmové teorie:

$$k_{\ell C} = \frac{D_\ell}{z_\ell}, \tag{1.42}$$

kde z_ℓ je vzdálenost překonaná difúzí v kapalné fázi. Případně pomocí střední turbulentní difuzivity [5]:

$$k_{\ell C} = \frac{D_\ell + \bar{\varepsilon}_D}{z_\ell}. \tag{1.43}$$

Koeficienty přestupu jsou empirické hodnoty a jejich určování probíhá experimentálně. Pro určení je třeba měření veličin C_{Af} a P_{Af} v oblasti mezifázového rozhraní, což není reálné. V praxi se $k_{\mathrm{g}P}$ a $k_{\ell C}$ zjišťují v náplňové, nebo jiné koloně, kdy se plocha mezifázového rozhraní mění se změnou pracovních podmínek. Z rovnice (1.38) nebo (1.40) vypočítá např. hodnota objemového koeficientu přestupu v podobě součinu $k_{\mathrm{g}P}{\cdot}a$, kde a je specifický mezifázový povrch ($a{=}A/V$). Odpor proti přestupu jedné látky do druhé se udržuje na zanedbatelně nízké hodnotě, $k_{\mathrm{g}P}$ plynné fáze lze určit odpařováním čisté složky do plynné fáze. Odpor proti přestupu bude v kapalné fázi nulový, protože $C_{\mathrm{Af}} = C_{\mathrm{A}\ell}$, tedy koncentrace látky A na mezifázovém rozhraní je stejná jako koncentrace v jádru kapaliny. Podobně lze absorpcí čisté složky do rozpouštědla určit $k_{\ell C}$, bude platit $P_{\mathrm{Ag}} = P_{\mathrm{Af}}$ [5].

Dalším způsobem určení koeficientů přestupu hmoty slouží rozměrová analýza, tedy bezrozměrné kritéria určené z fyzikálních vlastností kapaliny a příslušné aparatury. První kritérium je Scherwoodovo, vyjadřuje poměr celkového množství transportované složky konvekcí i difúzí ku množství složky transportované jen difúzí:

$$Sh = 0{,}023 Re^{0{,}8} Sc^{1/3} \left(\frac{\eta}{\eta_{\mathrm{s}}}\right)^{0{,}14}, \tag{1.44}$$

kde Re je Reynoldsovo kriterium (1.33), Sc je Schmidtovo kritérium, η je dynamická viskozita tekutiny a η_{s} je dynamická viskozita při teplotě stěny [8].

Schmidtovo kritérium je poměr mezi kinematickou viskozitou tekutiny a difúzním koeficientem složky v tekutině:

$$Sc = \frac{\eta}{\rho D_{\mathrm{AB}}}, \tag{1.45}$$

kde ρ je hustota tekutiny ($\mathrm{kg\,m^{-3}}$).

Koeficient přestupu hmoty $k_{\ell C}$ lze potom vypočítat ze vztahu:

$$k_{\ell C} = \frac{Sh \cdot D_{\mathrm{AB}}}{\theta} \tag{1.46}$$

kde θ je charakteristický rozměr náplně kolony, definující vliv gravitace při stékání po náplni definovaný:

$$\theta = \left(\frac{\eta^2}{\rho^2 \cdot \mathrm{g}}\right)^{\frac{1}{3}}, \tag{1.47}$$

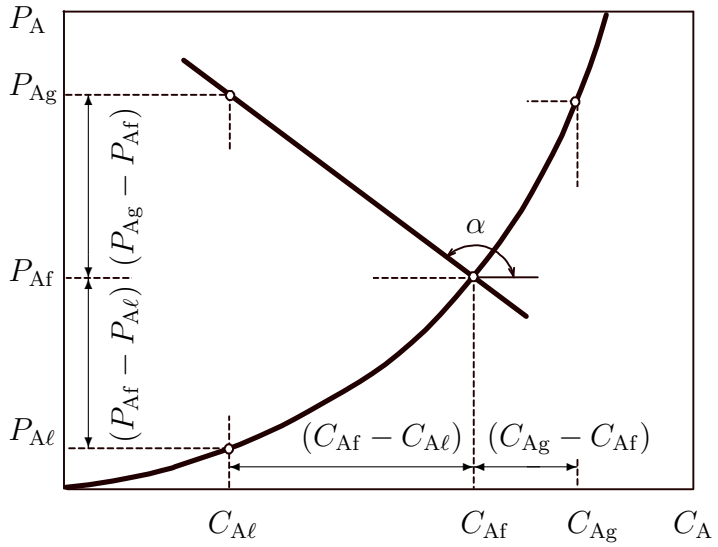
kde g je gravitační zrychlení [8].

1.2 Přestup hmoty přes mezifázové rozhraní

Selektivní separace látky ze směsi je uskutečnitelná díky tomu, že látka je transportována z jádra směrem k mezifázovému rozhraní, poté projde přes mezifázové rozhraní a dále

je transportována do jádra druhé fáze. Zmíněný proces se nazývá prostup hmoty, zatím co přestup hmoty popisuje transport látky z jádra fáze na mezifázové rozhraní. Za předpokladu, že prostupuje pouze látka A v prostředí indiferentní složky B jedním směrem z proudící plynné fáze do proudící kapalné fáze, lze vyjádřit rychlost prostupu spojením rovnic (1.38) a (1.40), dostaneme tak integrální rychlostní rovnici ustáleného přestupu složky A přes mezifázové rozhraní:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} \equiv k_{\mathrm{g}P}\left(P_{\mathrm{Ag}} - P_{\mathrm{Af}}\right) = k_{\ell C}\left(C_{\mathrm{Af}} - C_{\mathrm{A}\ell}\right). \tag{1.48}$$



Obr. 1.2: Grafické znázornění hnacích sil přestupu látky v izotermicko-izobarickém diagramu

Z rovnice (1.48) vyplývá, že za ustáleného stavu rychlost přístupu látky A v plynné fázi k mezifázovému rozhraní je stejná jako rychlost odstupu látky od mezifázového rozhraní v kapalné fázi. Pro koeficienty přestupu látky platí:

$$k_{\mathrm{g}P} = \frac{D_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R}Tz_{\mathrm{gd}}}\left(\frac{p}{P_{\mathrm{Bls}}}\right), \quad k_{\ell C} = \frac{D_{\ell}}{z_{\ell \mathrm{d}}}\left(\frac{\sum_{(i)} C_i}{C_{\mathrm{Bls}}}\right), \tag{1.49}$$

kde P_{Bls} je logaritmická střední hodnota parciálního tlaku indiferentní složky B určená z hodnot P_{Bg} a P_{Bf}, tedy hodnot parciálního tlaku složky B v jádru fáze a na mezifázovém rozhraní. C_{Bls} je obdobně logaritmická střední koncentrace složky B určená z C_{Bf} a $C_{\mathrm{B}\ell}$, tedy molárních koncentrací složky B na mezifázovém rozhraní a v jádru fáze. $\sum_{(i)} C_i$ je součet molárních koncentrací složek A a B v kapalné fázi.

Použití rovnice (1.48) vyžaduje znalost veličin na mezifázovém rozhraní (P_{Af} a C_{Af}). Podle filmové teorie je mezifázové rozhraní v rovnováze, problematiku lze tedy řešit izotermicko-izobarickou rovnovážnou funkcí (1.50).

$$P_{\mathrm{Af}} = f\left(C_{\mathrm{Af}}\right)_{T,p} \tag{1.50}$$

Úpravou rychlostní rovnice (1.48) dostaneme:

$$P_{\mathrm{Ag}} - P_{\mathrm{Af}} = -\frac{k_{\ell C}}{k_{\mathrm{g}P}}\left(C_{\mathrm{A}\ell} - C_{\mathrm{Af}}\right). \tag{1.51}$$

Při znalosti koeficientů přestupu k_{gP} a $k_{\ell C}$ a znalosti obsahu složky v jádru obou fází P_{Ag}, $C_{\mathrm{A}\ell}$ bude funkce (1.51) zobrazovat v izobaricko-izotermickém diagramu na obr. 1.2 přímku danou směrnicí $-(k_{\ell C}/k_{gP})$. Izotermicko-izobarická rovnovážná funkce (1.50) se projeví jako monotónně rostoucí funkce. Průsečík těchto funkcí určí hodnoty tlaku a koncentrace složky na mezifázovém rozhraní P_{Af} a C_{Af}, to umožní bezproblémové užití rovnice (1.48) [5].

Izoteremicko-izobarická rovnovážná funkce (1.50) zobrazená na obr. 1.2 jako křivka představuje koncentraci složky A v kapalné fázi při určitém parciálním tlaku složky A v plynné fázi po dosažení rovnovážného stavu. Čím větší bude rozdíl mezi koncentrací látky v jádru fáze a na mezifázovém rozhraní, tedy čím více bude systém vzdálen od rovnovážného systému, tím rychlejší bude transport hmoty. Rovnováha je však pouze hypotetická hodnota, k rovnováze dojde pouze po nekonečně dlouhém čase kontaktu, nebo na nekonečně velké kontaktní ploše [8].

1.2.1 Koeficienty prostupu hmoty

Stejně tak jako koeficienty přestupu charakterizují přestup hmoty, tak i pro charakterizaci prostupu hmoty existují patřičné koeficienty. Koeficienty přestupu se obtížně experimentálně stanovují, v praxi se mnohem častěji používají integrální rychlostní rovnice prostupu látky s koeficienty prostupu látky K_P a K_C:

$$\frac{\dot{n}_{\mathrm{A}}}{A} = K_P\left(P_{\mathrm{Ag}} - P_{\mathrm{A}\ell}\right) = K_C\left(C_{\mathrm{Ag}} - C_{\mathrm{A}\ell}\right), \tag{1.52}$$

kde K_P je koeficient prostupu látky s hnací sílou vyjádřenou rozdílem parciálních tlaků, v SI má jednotku mol $\mathrm{m^{-2}s^{-1}Pa^{-1}}$. K_C je koeficient prostupu látky s hnací silou vyjádřenou jako rozdíl koncentrací, jednotka je m $\mathrm{s^{-1}}$. Hodnoty K_P a K_C lze stanovit podle (1.52) přímo v provozním zařízení, změřením ustálené rychlosti odpovídající hodnotě hnací síly za daných pracovních podmínek. Výhodou integrálních rovnic s koeficienty prostupu je, že odpadá nutnost znalosti hodnot koncentrace a parciálního tlaku na mezifázovém rozhraní, tedy P_{Af} a C_{Af}. Stačí naměřit hodnoty P_{Ag} a $C_{\mathrm{A}\ell}$, hodnoty $P_{\mathrm{A}\ell}$ a C_{Ag} jdou jednoduše odečíst z izotermicko-izobarického diagramu na obr. 1.2 [5].

1.3 Absorpce

Absorpce je proces, kdy dochází k ustálenému sdruženému přestupu hmoty přes mezifázové rozhraní plynné a kapalné fáze. Plyn přestupuje do kapaliny, kde je poté vázán díky vzájemným interakcím. Absorpčního procesu se zpravidla využívá k těmto procesům [5]:

- Zisk plynného produktu absorpcí do kapaliny, jehož regenerací se zpravidla získává čistý plynný produkt.
- Výroba hotového výrobku jímáním plynu do kapaliny např. výroba šumivých nápojů, nebo výroba minerálních kyselin.
- Záchyt plynného polutantu kvůli snížení emisí, nebo během technologického procesu, např. při odstranění H_2S z hydrogenační směsi při odsíření ropných paliv.

Absorbovaný plyn se může v kapalině rozpouštět, nebo s ní i reagovat. Průběh absorpce záleží nejen na pracovních podmínkách jako je teplota, tlak, ale také na volbě absorpčního činidla. V případě fyzikálního rozpouštění musí být plyn v použité kapalině co nejlépe rozpustný a to pokud možno selektivně. Ideální absorpční činidlo je málo těkavé, nehořlavé, nekorozivní, málo viskózní a cenově dostupné. Opačným procesem je

desorpce, ta se využívá pro regeneraci absorpčního media a zisk zachycovaného plynu. Desorpční proces se nazývá také stripování. Za předpokladu fyzikálně vázaného plynu v kapalině probíhá desropce zahříváním nebo snížením tlaku nad kapalinou. Proces probíhá v tzv. desorbéru, který bývá součástí technologického zařízení. Desorpcí se často získává nejen plynný produkt, ale také se snižuje koncentrace plynu v absorpčním mediu v průběhu procesu, čímž je zaručena větší hnací síla a dokonalejší absorpce [5].

Absorpce plynu může probíhat také do objemu pevné látky vlivem koncentračního gradientu. Molekuly plynu zaujímají místa atomů v krystalické mřížce, pak se jedná o substituční dislokaci, nebo mohou zaujmout místo mezi atomy mřížky a jedná se o intersticiální dislokaci. Plyn může v pevné látce i disociovat, jde tedy o rozpouštění plynu v pevné látce. Proces bývá pozorován při depozici z plynné fáze jako nežádoucí jev [9].

1.3.1 Rovnováha při absorpci

Absorbér lze pro jednoduchost považovat za dvoufázovou soustavu se třemi složkami. Plynná fáze obsahuje absorbovanou složku a inertní složku. Druhá, kapalná fáze obsahuje rozpuštěný plyn. Obě fáze jsou tedy dvousložkové. Podle Gibbsova fázového zákona (1.53) má taková soustava tři stupně volnosti podle:

$$f + \upsilon = s + 2, \tag{1.53}$$

kde f je počet fází, υ je počet stupňů volnosti a s je počet složek soustavy.

Rovnovážná izotermicko-izobarická funkce definovaná výše (1.50) se v případě absorpce z plynné fáze do kapalné vyjadřuje pomocí molárních zlomků složky:

$$y_{\mathrm{A}} = f\left(x_{\mathrm{A}}\right)_{T,p}, \tag{1.54}$$

kde y_{A} je molární zlomek absorbované složky A v plynné fázi a x_{A} je molární zlomek absorbované složky A v kapalné fázi. Rovnovážnou funkci také vyjadřujeme pomocí relativních molárních zlomků jako poměr počtu molů složky A k počtu molů inertní složky B:

$$Y_{\mathrm{A}} = f\left(X_{\mathrm{A}}\right)_{T,p}, \tag{1.55}$$

kde Y_{A} a X_{A} jsou relativní molární zlomky složky A. Mezi molárním zlomkem a relativním molárním zlomkem platí vztah:

$$X = \frac{x}{x-1}, \quad x = \frac{X}{1+X}. \tag{1.56}$$

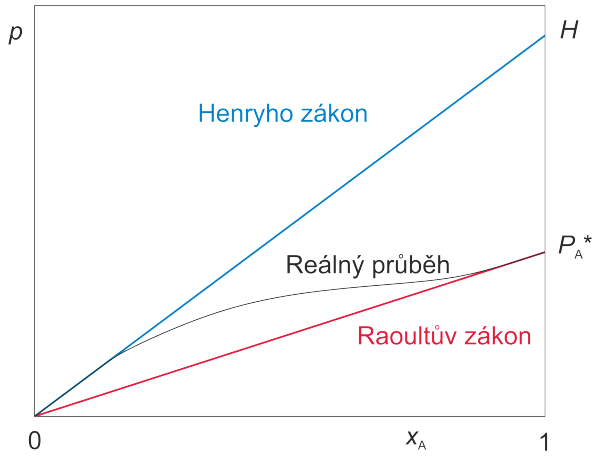
Lze tedy očekávat, že při znalosti složení jedné fáze je za izotermicko-izobarických podmínek známé i složení druhé fáze. Závislost tlaku látky nad roztokem na složení kapalné fáze popisuje Raoultův zákon (1.57); tenze páry nad roztokem je úměrná molárnímu zlomku této složky v roztoku, kde konstantou úměry je tenze páry čisté složky.

$$P_{\mathrm{A}} = P_{\mathrm{A}}^{*} \cdot x_{\mathrm{A}}, \tag{1.57}$$

kde P_{A} je parciální tlak absorbované složky v plynné fázi, P_{A}^{*} je tlak čisté složky a x_{A} je molární zlomek absorbované složky v kapalné fázi [10].

Raoultův zákon platí při limitně vysokých koncentracích, což při absorpci plynů není častý případ. Při nízkých koncentracích platí Henryho zákon (1.58); parciální tlak rozpuštěné látky nad roztokem je úměrný molárnímu zlomku rozpuštěné látky v roztoku, konstantou úměry je empirická Henryho konstanta.

$$P_{\mathrm{A}} = H \cdot x_{\mathrm{A}} \tag{1.58}$$



Obr. 1.3: Grafické znázornění Henryho a Raoultova zákona

kde P_A je parciální tlak absorbované složky v plynné fázi, H je Henryho konstanta (Pa) – každý plyn má charakteristickou H, pro některé plyny jsou uvedeny v tab. 1.1 a x_A je molární zlomek absorbované složky v kapalné fázi.

Henryho zákon se často uvádí v modifikované podobě:

$$P_A = H_C \cdot C_A \tag{1.59}$$

kde H_C je Henryho konstanta s jednotkou Pa m^{3}mol^{-1}. Obrácenou hodnotu Henryho konstanty $1/H_C$ lze brát jako rozpustnost plynu v kapalině. Rozpustnost se často vyjadřuje také pomocí Ostwaldova absorpčního koeficientu, udávajícího poměr objemu rozpuštěného plynu ve stavu nasycení a objemu kapaliny, ve které je plyn rozpuštěný (pro některé plyny rovněž uveden v tab. 1.1) [5, 7].

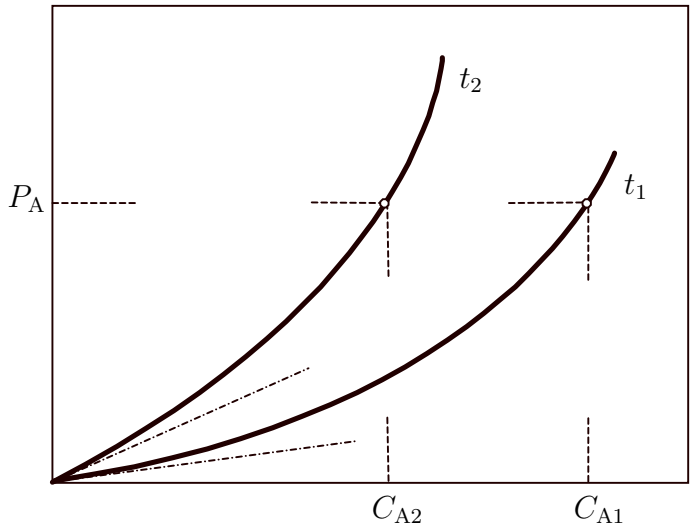
Tab. 1.1: Ostwaldův absorpční součinitel a Henryho konstanta vybraných plynů

plyn	H_2	N_2	O_2	CO_2	SO_2	NH_3
α' (−)	0,021 5	0,023 9	0,048 9	1,713	79,8	1 305,0
H (MPa)	5 870	5 360	2 570	73,7	1,67	0,208

Bezrozměrný absorpční Ostwaldův součinitel α' je závislý na teplotě. S výjimkou vzácných plynů při snižování teploty součinitel α' rychle roste. Stejně tak Henryho konstanta je na teplotě značně závislá (1.60), na tlaku závisí méně a na koncentraci vůbec. Pro Henryho konstantu platí:

$$\left(\frac{\partial \ln H}{\partial T}\right)_p = -\frac{\Delta_{\text{rozp}} h}{\mathrm{R} T^2}, \tag{1.60}$$

kde $\Delta_{\text{rozp}} h$ je změna entalpie při přestupu ideálního plynu do nekonečně zředěného roztoku (J mol^{-1}Pa^{-1}). Ve většině případů je rozpouštění plynu v kapalině exotermický proces, platí tedy $\Delta_{\text{rozp}} h < 0$, hodnota konstanty H se dle (1.60) zvyšuje a rozpustnost podle (1.58) klesá. Při vyšší teplotě se rovnovážná funkce stává strmější, neboť má vyšší hodnotu směrnice H, to vše je patrné z obr. 1.4. Při zvyšování teploty (po dosažení kritické teploty rozpouštědla) začne rozpustnost opět stoupat [5].



Obr. 1.4: Zobrazení vlivu změny teploty na rovnovážnou křivku za předpokladu $t_2 > t_1$

1.3.2 Rychlost absorpce

Předpokládejme, že látka A, která je v proudící plynné směsi s inertní látkou B, podléhá nepřetržitému sdruženému, jednosměrnému přestupu do proudící kapalné fáze ℓ přes mezifázové rozhraní v soustavě se souvislým kontaktem fází. Rychlost absorpce lze potom určit rychlostní rovnicí (1.48). Po transformaci proměnných podle (1.56) lze napsat rychlostní rovnici v tomto tvaru:

$$\frac{\dot{n}_\mathrm{A}}{A} = k_{\mathrm{g}Y}\left(Y_\mathrm{A1} - Y_\mathrm{A2}\right) = k_{\ell X}\left(X_\mathrm{A1} - X_\mathrm{A2}\right), \tag{1.61}$$

$$\frac{\dot{m}_\mathrm{A}}{A} = k_{\mathrm{g}Y'}\left(Y'_\mathrm{A1} - Y'_\mathrm{A2}\right) = k_{\ell X'}\left(X'_\mathrm{A1} - X'_\mathrm{A2}\right), \tag{1.62}$$

kde Y_A1 a Y_A2 jsou relativní molární zlomky absorbované složky v plynné fázi na začátku a na konci absorpčního děje, X_{A1} a X_{A2} jsou relativní molární zlomky absorbované složky v kapalné fázi na začátku a na konci děje, Y'_A a X'_A jsou relativní hmotnostní zlomky složky A v plynné a kapalné fázi. $\dot{m}_\mathrm{A}$ je hmotnostní tok absorbované složky (kg s^{-1}), $k_{\mathrm{g}Y}$ a $k_{\ell X}$ jsou koeficienty přestupu hmoty v plynné a kapalné fázi, kdy velikost hnací síly je vyjádřena rozdílem relativních molárních zlomků, zatímco $k_{\mathrm{g}Y'}$ a $k_{\ell X'}$ jsou koeficienty přestupu hmoty v plynné a kapalné fázi, kdy velikost hnací síly je vyjádřena rozdílem relativních hmotnostních zlomků [8].

V případě znalosti koeficientů prostupu hmoty lze použít tvar:

$$\frac{\dot{m}_\mathrm{A}}{A} = K_P\left(P_\mathrm{Ag} - P_{\mathrm{A}\ell}\right) = K_C\left(C_\mathrm{Ag} - C_{\mathrm{A}\ell}\right), \tag{1.63}$$

význam rovnice je ekvivalentní jako u (1.61), jen popisuje prostup hmoty; transport hmoty z jádra jedné fáze k mezifázovému rozhraní, transport přes něj a transport látky od mezifázového rozhraní do jádra druhé fáze. Porovnáním rovnic (1.61) a (1.63) s ohledem na modifikovaný tvar Henryho zákona (1.59) lze odvodit vztah mezi koeficienty K_P a K_C:

$$K_P = H_C K_C. \tag{1.64}$$

Vztahy mezi koeficienty přestupu vzhledem k druhu vyjádření hnací síly absorpce uvádí tab. 1.2.

Tab. 1.2: Vztahy mezi jednotlivými koeficienty přestupu k (vztahy platí i pro koeficienty prostupu K)

Hnací síla přestupu hmoty	**Součinitel přestupu hmoty**	**Vztah k $k_{\ell C}$ a k_{gP}**
Δx_A	$k_{\ell x}$	$k_{\ell x} = k_{\ell C} \cdot C_A$
Δy_A	k_{gy}	$k_{gy} = k_{gP} \cdot P_A$
ΔX_A	$k_{\ell X}$	$k_{\ell X} = k_{\ell C} \cdot C_B$
ΔY_A	k_{gY}	$k_{gY} = k_{gP} \cdot (p - P_A)$
$\Delta X'_A$	$k_{\ell X'}$	$k_{\ell X'} = k_{\ell C} \cdot \rho_B$
$\Delta Y'_A$	$k_{gY'}$	$k_{gY'} = k_{gP} \cdot M_B \cdot (p - P_A)$

Na základě všech uvedených rychlostních rovnic lze vzhledem k možnosti různého vyjádření hnací síly, sestrojit různé ekvivalenty rychlostních rovnic. V praxi volba rovnice závisí na dostupnosti patřičného koeficientu přestupu.

1.3.3 Rozpustnost plynů v kapalinách

Jak už bylo zmíněno výše, pokud je koncentrace plynu malá, platí Henryho zákon (1.58). Reaguje-li však plyn v roztoku, Henryho zákon neplatí pro celou koncentraci, ale pouze pro koncentraci nezreagovaného plynu. Například CO_2 je ve vodě částečně disociován podle rovnice:

$$CO_2 + H_2O \overset{K_1}{\longleftrightarrow} HCO_3^- + H^+ \overset{K_2}{\longleftrightarrow} CO_3^{2-} + 2H^+ \tag{1.65}$$

Rozpouštěním CO_2 ve vodě vzniká hypotetická kyselina uhličitá (1.66), jejíž disociační konstanty K_{A1} a K_{A2}, lze použít pro výpočet funkce distribuce jednotlivých disociovaných forem CO_2 ve vodě.

$$H_2CO_3 \overset{K_{A1}}{\longleftrightarrow} HCO_3^- + H^+ \overset{K_{A2}}{\longleftrightarrow} CO_3^{2-} + 2H^+ \tag{1.66}$$

Pro disociační konstanty platí:

$$K_{A1} = \frac{[HCO_3^-][H^+]}{[H_2CO_3]} \quad K_{A2} = \frac{[CO_3^{2-}][H^+]}{[HCO_3^-]} \tag{1.67}$$

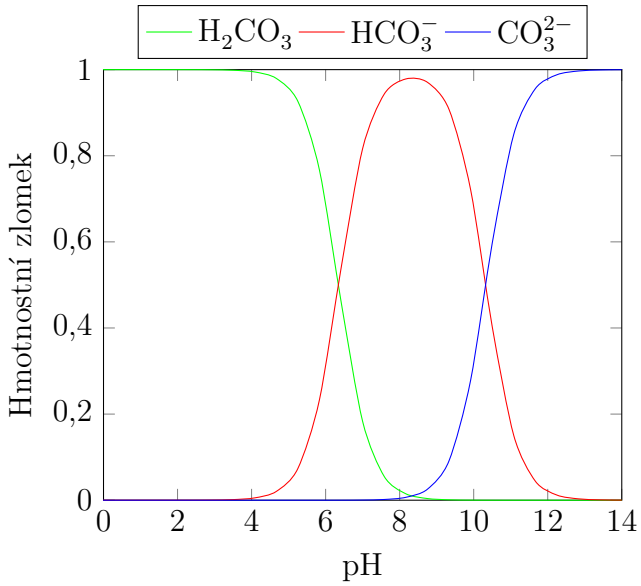
Pomocí definice pH, tedy pH$= -\log[H^+]$, lze vyjádřit zastoupení jednotlivých forem disociovaného CO_2 jako funkci pH, průběh funkcí je zobrazen na obr. 1.5.

1.3.4 Rozpustnost plynu v roztocích elektrolytů

V případě že plyn s roztokem reaguje, není možné rozpustnost měřit, je třeba ji odhadnout. K tomu se hodí vztah mezi Henryho konstantou v roztoku a ve vodě:

$$\log \frac{H_C}{H_{C0}} = h_f I \tag{1.68}$$

kde H_C je Henryho konstanta v roztoku, H_{C0} je Henryho konstanta ve vodě, h_f ($m^3 mol^{-1}$) je součet příspěvků kladných a záporných iontů a plynu podle (1.69). I je iontová síla roztoku ($mol\, m^{-3}$), definovaná vztahem (1.70) [7].



Obr. 1.5: Rovnováha oxidu uhličitého ve vodě

$$h_\mathrm{f} = h^+ + h^- + h_\mathrm{g} \tag{1.69}$$

$$I = \frac{1}{2} \sum C_i Z_i^2 \tag{1.70}$$

kde C_i je koncentrace příslušného iontu v roztoku a Z_i je jeho mocenství.

Standardní chyba při použití výrazu (1.68) je $\pm(2I)\%$. Hodnoty některých rozpouštěcích faktorů jsou uvedeny v tab. 1.3 [7].

Tab. 1.3: Rozpustnostní faktory (h^+, h^- a h_g) některých chemických ekvivalentů

Substance	H^+	Na^+	OH^-	CO_3^{2-}	CO_2(0 °C)	CO_2(15 °C)	CO_2(25 °C)[1]
$h_i \cdot 10^{-5}$	0,0	9,1	6,6	2,1	−0,7	−1,0	−1,9

1.4 Fyzikální absorpce

Fyzikální absorpce je proces kdy dochází k pohlcení plynu kapalinou, kdy plyn je v kapalině zadržován fyzikálními interakcemi. Absorpci rozumíme jako difúzi látky A v prostředí indiferentní látky B plynnou fází směrem k mezifázovému rozhraní, transport přes mezifázové rozhraní a difúze kapalnou fází směrem od fázového rozhraní. Jedná se tedy o prostup hmoty. Fyzikální absorpci charakterizuje to, že plynná látka je v kapalině zadržována chemicky nevazebnými interakcemi.

1.4.1 Praní vodou

Základní typ fyzikální absorpce je vypírání studenou vodou, která má uplatnění v potravinářském průmyslu při výrobě šumivých nápojů. Při sycení nápojů oxidem uhličitým dochází k fyzikální absorpci, tím vznikne roztok kyseliny uhličité, jejíž existence v bezvodé formě je pouze hypotetická, a nápoj získává kyselou chuť. Absorpční nádoba je naplněná

[1] Hodnoty h_g pro různé teploty jsou uvedeny v tab. A.2

plynným CO_2 o tlaku 0,5 MPa, ve které se tryskou rozstřikuje předem odvzdušněná vychlazená voda v podobě jemných částic, jedná se o tryskový způsob. Druhým postupem sycení nápojů je sprchový systém, kdy je voda o teplotě 6–10 °C rozstřikována na Raschigovy kroužky a sycena oxidem uhličitým o tlaku 0,6 MPa, tento způsob je výkonnější. V technologickém postupu je třeba zohlednit, že CO_2 se v limonádě, tedy roztoku jiných potravinářských přísad, rozpouští hůře než v čisté vodě [11].

1.4.2 Rectisol a Solexol

Proces jménem Rectisol je rozpouštění CO_2, H_2S, COS a jiných kyselých plynů v metanolu vychlazeném na nízké teploty, za účelem zlepšení vlastností topných plynů vyráběných při karbonizaci, nebo jako část procesu odsíření ropných produktů. Účinnost absorpce metanolu s klesající teplotou roste. Při −60 °C je rozpustnost CO_2 75 krát vyšší než při 25 °C [12].

Solexol je označení roztoku dimetyleteru a polyetylenglykolu, používaného rovněž k odstranění kyselých plynů. Kyselé plyny lze odstraňovat také chemisorpcí pomocí aminů (viz Chemisorpce) [12].

1.4.3 Vypírání uhlovodíků

Absorpční proces lze využít také k záchytu organických těkavých látek v plynném stavu.

Vypírání VOC

Těkavé organické sloučeniny označované jako VOC (Volatile organic compounds) jsou primární prekurzory vzniku smogu, který např. ve východní Číně způsobuje zdravotní problémy až 800 mil. lidí. Existují dva typy odstranění VOC z emisí; destrukční, jako chemická, či biologická oxidace, nebo regenerační; adsorpce či absorpce. Jako kapalná fáze se při absorpci VOC používá vodní emulze rostlinného nebo silikonového oleje. Lze použít i vysoce vroucí organické kapaliny jako [13, 14]:

- di(2-etylhexyl)adipát
- diisobutyl ftalát
- polyetylen glykol 400[2]

Vhodným absorpčním činidlem jsou také iontové kapaliny; netěkavé organické nebo anorganické iontové sloučeniny. Iontová organická kapalina, používaná jako absorpční činidlo je např. 1-butyl-3-metylimidazolium bis-(trifluorometylsulfonyl)imid [Bmim][NTf_2] jehož struktura je zobrazena na obr. 1.6, je vhodný pro záchyt par toluenu. Má nízkou viskozitu a teplotní odolnost až 400 °C [14].

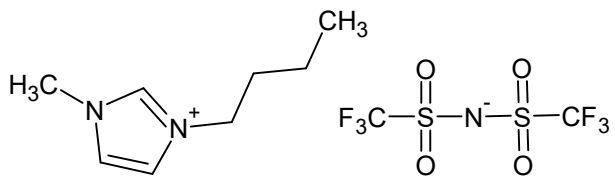
Regenerace iontových kapalin probíhá tepelným vypuzením, procesem zvaným hybridní předvaporizace.

Vypírání benzolu a naftalenu

V praxi se jedná o vypírání benzolu a naftalenu z koksárenského plynu. Benzol (směs uhlovodíků, kde benzen je majoritní složkou) je vypírán jako produkt, naftalen je nečistota způsobující vznik usazenin při spalování. Jako vypírací kapalina se využívá minerální[3]

[2] jedná se o polyetylen glykol o průměrné molekulové hmotnosti 380–420 $g \cdot mol^{-1}$

[3] minerální olej je ropná frakce C_{15} až C_{40}



Obr. 1.6: Struktura 1-butyl-3-metylimidazolium bis-(trifluorometylsulfonyl)imidu

nebo dehtový olej. Uhlovodíky se v oleji rozpouštějí, jde tedy o fyzikální absorpci, optimální teplota oleje při praní je 25 °C [12].

Při záchytu benzolu je z hlediska koeficientu přestupu hmoty výhodnější minerální olej, má nižší viskozitu a je odolnější vůči stárnutí. Dehtové oleje časem mění viskozitu a to snižuje rychlost absorpce. Ropný olej má nižší hustotu než voda, proto je vzhledem k dehtovému oleji ochotnější k tvorbě emulzí. Regenerace probíhá zahřátím oleje vodní párou v kloboučkové nebo náplňové koloně. Kondenzát se v rozdělovači dělí na vodu a benzol. Účinnost odstranění benzolu činí přibližně 95 %, zvýšením tlaku lze snížit potřebný objem cirkulovaného oleje.

1.5 Chemisorpce

Pro efektivní průběh absorpce je vhodné, aby se parciální tlak plynu v kapalině blížil nule. Toho nelze při fyzikálním rozpouštění dosáhnout. Této podmínce vyhovuje případ, kdy plyn s kapalinou přímo reaguje, jedná se potom o chemickou absorpci, neboli chemisorpci.

Reaguje-li plyn s kapalinou nevratně, je účinnost absorpce vyšší, než když jde o reakci vratnou. Plyn ihned po přestupu přes mezifázové rozhraní zreaguje, takže koncentrační gradient je vysoký i v pokročilé fázi absorpce. Reakce plynu s kapalinou v některých případech vede ke vzniku sraženiny, která může ovlivnit funkčnost složitějších technologických zařízení. V jiných případech zase může kapalina reakcí s plynem tvořit iontové sloučeniny, které bývají korozivní [7].

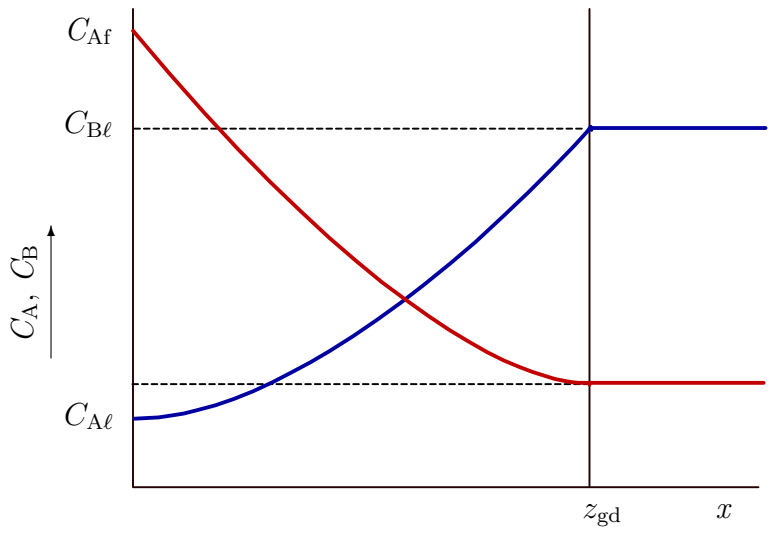
V případě, že rozpouštěný plyn s kapalinou reaguje, je nutné formální vyjádření druhého Fickova zákona (1.31) modifikovat zahrnutím vlivu chemické rekce na průběh procesu:

$$D_{\mathrm{AB}} \frac{\partial^2 C_{\mathrm{A}}}{\partial x^2} = \frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial \tau} + r_{\mathrm{A}}\left(x, \tau\right), \tag{1.71}$$

kde $r_{\mathrm{A}}(x, \tau)$ je rychlost reakce látky A v jednotce objemu ($\mathrm{mol\,m^{-3}s^{-1}}$), kterou reakce spotřebovává rozpuštěný plyn ve vzdálenosti od mezifázového rozhraní x v čase τ. Rychlost reakce závisí na koncentraci rozpuštěného plynu a na všech ostatních rozpuštěných látkách s kterými plyn reaguje. Předpokládá se, že teplota, rozpustnost, difuzivita a rychlostní konstanta reakce je konstantní [7].

Koncentrační profil v systému s chemickou reakcí je zobrazen na obr. 1.7. Průběh závislosti koncentrace plynu rozpuštěného v kapalině C_{A} a koncentrace reaktantu C_{B} na vzdálenosti vychází z filmové teorie uvedené výše (*kapitola 1.1.3*) [7].

Míra, jakou chemická reakce ovlivňuje průběh absorpce se vyjadřuje pomocí reakčního faktoru E_{r}, definujícího poměr množství absorbovaného plynu v kapalině, k množství



Obr. 1.7: Koncentrační profily při reakci druhého řádu

plynu, které by se absorbovalo bez chemické reakce, což lze určit z rovnice [7]:

$$E_{\mathrm{r}} = 2\,(C_{\mathrm{Af}} - C_{\mathrm{Ag}}) \cdot \sqrt{\frac{D_{\mathrm{g}} \cdot \tau}{\pi}}, \tag{1.72}$$

kde C_{Af} je koncentrace látky A na mezifázovém rozhraní, C_{Ag} je její koncentrace v plynné fázi, D_{g} je difuzivita reagujícího plynu v absorpční kapalině, τ je čas kontaktu fází a π je řád reakce vzhledem k produktu.

Matematické popisy jednotlivých typů absorpcí se v závislosti na řádu chemické reakce značně liší. Vzhledem k tomu, že práce se zabývá ustálenou absorpcí s chemickou reakcí druhého řádu v promíchávaném systému, bude se popis věnovat této problematice.

Chemickou reakci druhého řádu lze obecně popsat jako:

$$\mathrm{A} + \Gamma\,\mathrm{B} \xrightarrow{k_2} y\mathrm{P} \tag{1.73}$$

$$\tag{1.74}$$

kde Γ je stechiometrický koeficient reaktantu, y zde značí stechiometrický koeficient produktu a k_2 je rychlostní konstanta reakce druhého řádu.

Pro rychlostní konstantu k_2 potom platí:

$$r_\mathrm{A} = k_2\, C_\mathrm{A}\, C_\mathrm{B}, \tag{1.75}$$

dosazením rychlostní konstanty do rovnice (1.71) dostaneme:

$$\begin{aligned} D_\mathrm{A}\frac{\partial^2 C_\mathrm{A}}{\partial x^2} &= \frac{\partial C_\mathrm{A}}{\partial \tau} + k_2\, C_\mathrm{A}\, C_\mathrm{B}, \\ D_\mathrm{B}\frac{\partial^2 C_\mathrm{B}}{\partial x^2} &= \frac{\partial C_\mathrm{B}}{\partial \tau} + z k_2\, C_\mathrm{A}\, C_\mathrm{B}. \end{aligned} \tag{1.76}$$

Pokud koncentrace látky A v jádru kapaliny je nulová, tedy $C_{\mathrm{A}\ell}$=0, tak má soustava diferenciálních rovnic (1.76) za okrajových podmínek:

$$\left.\begin{array}{lll} C_\mathrm{B} = C_{\mathrm{B}\ell}, & x \succ 0, & \tau = 0 \\ C_\mathrm{B} = C_{\mathrm{B}\ell}, & x = \infty, & \tau \succ 0 \\ \frac{\partial C_\mathrm{B}}{\partial x}, & x = 0, & \tau \succ 0 \end{array}\right\} \tag{1.77}$$

toto řešení:

$$E_\mathrm{r} = \frac{\sqrt{\frac{M'(E_\mathrm{ri}-E_\mathrm{r})}{E_\mathrm{ri}-1}}}{\tanh\sqrt{\frac{M'(E_\mathrm{ri}-E_\mathrm{r})}{E_\mathrm{ri}-1}}}, \tag{1.78}$$

kde platí:

$$M' = \frac{D_\mathrm{A} k_2 C_{\mathrm{B}\ell}}{k_{\ell C}{}^2}, \quad E_\mathrm{ri} = 1 + \frac{D_\mathrm{B} C_{\mathrm{B}\ell}}{\Gamma D_\mathrm{A}\, C_\mathrm{Af}}, \quad E_\mathrm{r} = \frac{\bar{\phi}_\mathrm{A}}{k_1\, C_\mathrm{Af}}, \tag{1.79}$$

E_r je reakční faktor, který definuje vzrůst rychlosti absorpce vlivem chemické reakce oproti absorpci bez chemické reakce, E_ri je limitní reakční faktor odpovídající okamžité reakci, M' je bezrozměrné číslo, jehož zavedním byl snížen počet proměnných v řešení soustavy diferenciálních rovnic (1.76), $k_{\ell C}$ je koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem koncentrací. Odmocnina z bezrozměrného čísla M' se nazývá Hattovo kriterium označované jako Ha [4, 7].

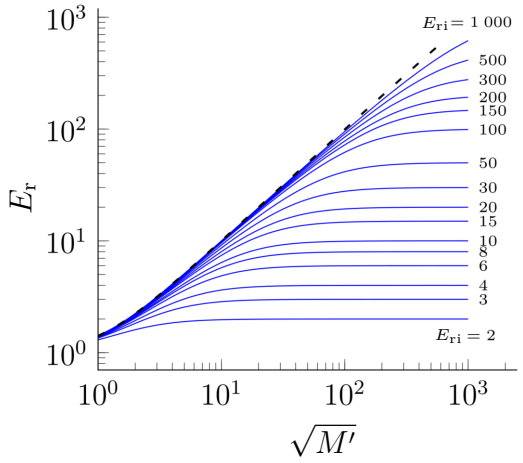
Reakční faktor okamžité reakce lze vypočítat ze vztahu:

$$E_\mathrm{ri} = \sqrt{\frac{D_\mathrm{B}}{D_\mathrm{A}}} + \frac{C_{\mathrm{B}\ell}}{\Gamma C_\mathrm{Af}} \cdot \sqrt{\frac{D_\mathrm{B}}{D_\mathrm{A}}}, \tag{1.80}$$

jedná se o lineární funkci s parametrem $D_\mathrm{B}/D_\mathrm{A}$ [7].

Řešení rovnice (1.78) bylo navrženo pro případ, kdy D_A=D_B, ale lze je použít i pro případ, kdy platí $D_\mathrm{A}\neq D_\mathrm{B}$. Závislost E_r na $\sqrt{M'}$ zjištěná z (1.78) je vynesena na obr. 1.8, jednotlivé křivky odpovídají několika případů s různým limitním reakčním faktorem [4,7].

V systému s chemickou reakcí může nastat několik mezních situací. První z nich je když $\sqrt{M'} \ll 1$, zároveň $E_\mathrm{r} \approx 1$. V tomto případě je vliv chemické reakce zanedbatelný a probíhá téměř jen fyzikální absorpce. Pokud $\sqrt{M'} \gg E_\mathrm{ri}$, potom E_r leží na krajní



Obr. 1.8: Závislost reakčního faktoru na $\sqrt{M'}$ pro reakci druhého řádu [15]

křivce značené čárkovaně a v systému probíhá reakce pseudoprvního řádu, to znamená, že reagující látka difunduje k povrchu tak rychle, že nedojde k jejímu vyčerpání vlivem reakce. Pokud $\sqrt{M'} < \frac{1}{2}E_{ri}$, je rychlost absorpce řízena rychlostní rovnicí reakce prvního řádu a platí:

$$r_A = k_1 C_A, \tag{1.81}$$

kde k_1 je rychlostní konstanta reakce prvního řádu [7].

1.5.1 Chemická absorpce CO_2

Absorpce do roztoku louhu

Nejjednodušší případ chemické absorpce CO_2 je jímání do roztoku NaOH podle rovnice (1.82) a (1.83). Rychlost reakce řídí nejpomalejší děj, tedy vznik $NaHCO_3$ podle (1.82), ten prakticky ihned reaguje na Na_2CO_3 dle (1.83).

$$CO_2 + NaOH \longrightarrow NaHCO_3 \tag{1.82}$$

$$CO_2 + 2NaOH \longrightarrow Na_2CO_3 + 2H_2O \tag{1.83}$$

Produktem chemisorpce je tedy CO_3^{2-}, případně hydráty Na_2CO_3 v pevné fázi. Je tedy nutné počítat se zanášením systému uhličitanovými usazeninami.

Pro jednoduchou realizaci a nízké náklady chemisorpce oxidu uhličitého do roztoku hydroxidu sodného, byla tato reakce použita v experimentální části. Vzhledem k tomu, že absorpční roztok je obtížné regenerovat, příliš se tato reakce v praxi nepoužívá.

Absorpce do horké potaše

Dalším hojně používaným způsobem chemisorpce CO_2 je absorpce ho horkého roztoku uhličitanu draselného (potaše) a to hlavně kvůli jeho nízké regenerační energii, nízké rychlosti degradace a nízkému korozivnímu účinku [16].

$$K_2CO_3 + CO_2 + H_2O \longrightarrow KHCO_3 \tag{1.84}$$

Nedostatkem metody je relativně nízká rychlost reakce (1.84), je tedy nutné použití velkých absorpčních zařízení. Tento nedostatek lze ošetřit přidáním promotoru. Do roztoku potaše se přidávají anorganické promotory, t. j. kyselina arseničná, kyselina boritá nebo sloučeniny vanadu. Anorganické promotory často zvyšují korozivní účinky roztoku, proto jsou výhodnější organické sloučeniny, jako je monoetanolamin, dietanolamin, piperazin nebo soli aminokyselin. Zvláštním způsobem zvyšování rychlosti reakce jsou enzymatické promotory jako je Karbonátdehydratáza. Složení roztoku bývá 30 hm. % K_2CO_3 a přibližně 300 mg·dm^{-3} Karbonátdehydratáza [16].

Absorpce do ethanolaminu

Další možností chemisorpce je záchyt CO_2 do vodného roztoku monoetanolaminu (MEA), případně dietanolaminu (DEA). Absorpce běží podle (1.85) zleva doprava, desorpce potom zprava doleva. Dobře probíhá i záchyt sulfanu do aminového systému podle (1.86), tato reakce však při nižších teplotách ochotně probíhá i do druhého stupně (1.87), což nachází uplatnění při odsíření ropných produktů. Z hlediska regenerace je výhodné, aby reakce probíhala pouze do prvního stupně kvůli stabilitě činidla. Některé plyny způsobují degradaci absorpčního činidla, a tím i korozi zařízení. Přítomnost iontové formy rovněž zvyšuje korozivitu absorpčního media [5, 17].

$$CO_2 + H_2O + 2(HO - CH_2CH_2)NH_2 \longleftrightarrow [(HO - CH_2CH_2)NH_3]_2CO_3 \quad (1.85)$$
$$H_2S + 2(HO - CH_2CH_2)NH_2 \longleftrightarrow [(HO - CH_2CH_2)NH_3]_2S \quad (1.86)$$
$$H_2S + [(HO - CH_2CH_2)NH_3]_2S \longleftrightarrow (HO - CH_2CH_2)NH_4^+ + HS^- \quad (1.87)$$

Regenerace roztoku obohaceného o CO_2 probíhá zahříváním topnou parou při teplotě 100–200 °C. Směs se dále chladí na 40–65 °C a vrací se zpět do absorpční kolony. Výhodou procesu je, že reakce běží i při vyšších teplotách, proces tedy nevyžaduje náročné chlazení. Získaný CO_2 má až 99% čistotu s účinností recyklace až 98 %. Absorpční kapacita MEA je relativně nízká, proto technologie vyžaduje velký objem média. Nízkou kapacitu roztoku a jeho degradaci vlivem SO_x a NO_x lze vyřešit modifikací roztoku dietanolaminem (DEA) nebo metyldietanolaminem (MDEA) [7, 17, 18].

Absorpce do roztoku amoniaku

Absorpce do amoniakálního roztoku (1.88) je velmi podobná absorpci do etanolaminu, má však určité výhody. Do roztoku amoniaku lze pohlcovat i NO_x, SO_x podle (1.89) a (1.90), O_3 HCl a HF, tedy plyny, které jsou běžně obsaženy ve spalinách technologických procesů [17].

$$2NH_3 + CO_2(l) + H_2O \longleftrightarrow NH_4HCO_3(s) \quad (1.88)$$
$$NO_x + SO_x + H_2O \longrightarrow HNO_3 + H_2SO_4 \quad (1.89)$$
$$HNO_3 + H_2SO_4 + H_2O \longrightarrow NH_4NO_3(s) + (NH_4)_2SO_4 \quad (1.90)$$

Oproti MEA systému má amoniak vyšší kapacitu absorpce, nezpůsobuje korozi zařízení a vyžaduje méně tepelné energie k regeneraci. Kapacita 1,20 g CO_2/1 g NH_3 oproti 0,409 g CO_2/1 g MEA při stejných podmínkách procesu umožňuje snížit recirkulační poměr média a tedy snížit procesní náklady [17].

Další případy chemické absorpce CO_2

Chemické absorpce CO_2 se využívá při organické či anorganické syntéze. Příklady průmyslově významných procesů:

- Absorpce CO_2 do vodného roztoku sulfidu barnatého za účelem výroby $BaCO_3$
- Absorpce CO_2 ve vodných suspenzích vápna při výrobě sráženého $CaCO_3$

Fyzikální absorpce nachází velké uplatnění také v potravinářském průmyslu a to nejenom při sycení alkoholických, či nealkoholických nápojů, ale také při pěstování řas jako je Chlorella nebo Spirulina.

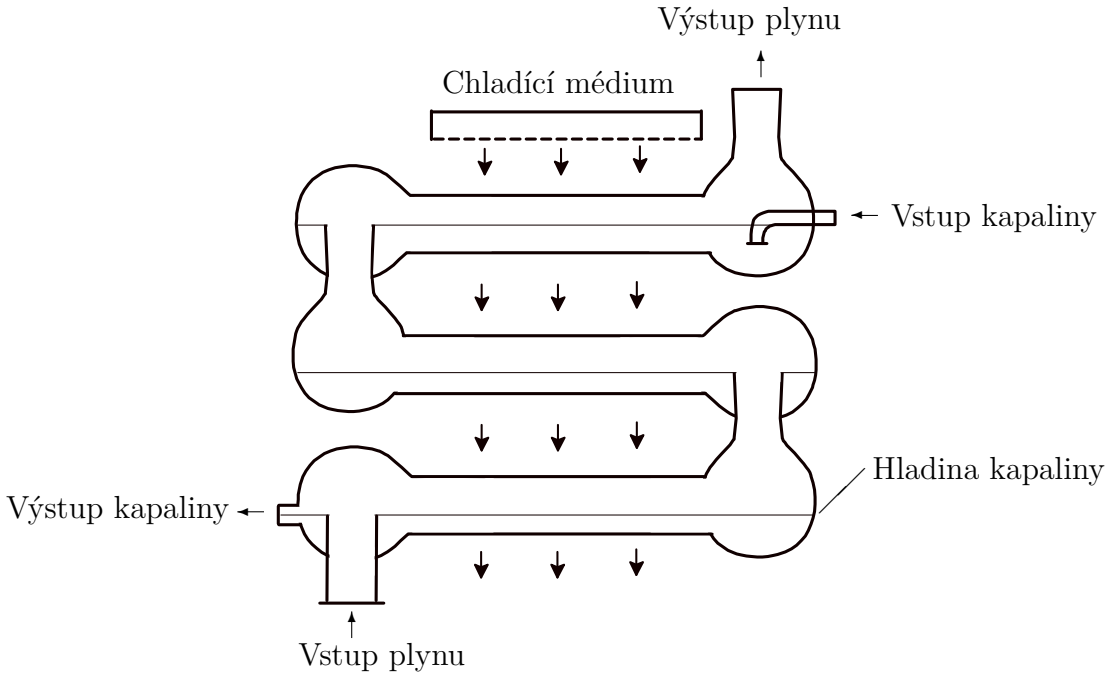
1.6 Typy absorpčních zařízení

V praxi se používají hmotové výměníky se souvislým kontaktem fází a stupňovitým kontaktem fází. Souvislý kontakt se uplatňuje u probublávajících absorbérů, při absorpci na volné hladině atd. Stupňovitý kontakt fází se vyskytuje u vícenásobné absorpce nebo rektifikace. V praxi je nutné volit typ absorbéru dle rozpustnosti plynu v kapalině, nebo dle rychlosti chemické reakce v případě absorpce s chemickou reakcí.

1.6.1 Povrchový absorbér

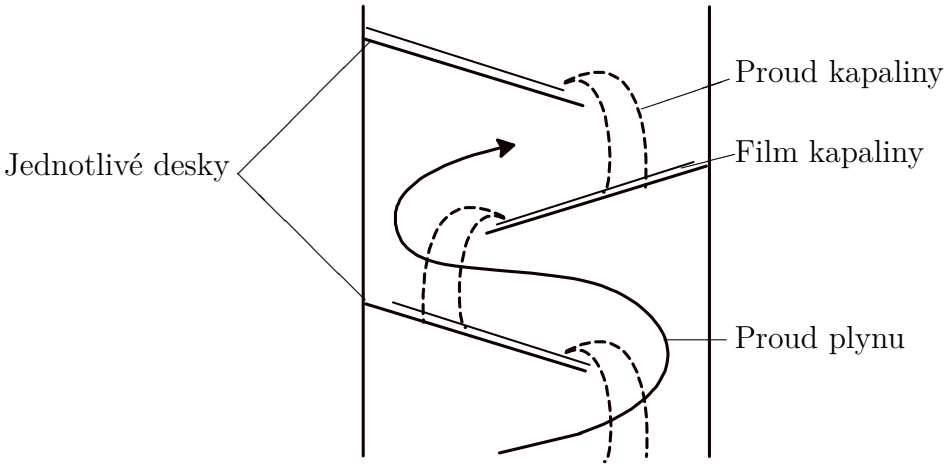
Jedná se o nejjednodušší případ absorpce, za povrchovou absorpci lze považovat například absorpci kyslíku na vodní hladině. V praxi bývá povrchová absorpce zefektivněna zvětšením plochy mezifázového rozhraní tím, že kapalina stéká po sérii desek (Kaskádový absorbér), mezi kterými proudí plyn. Pochopitelně čím větší je plocha absorbéru, tím efektivnější transport hmoty probíhá.

Typický případ je systém vodorovně orientovaného potrubí (obr. 1.9), kterým protéká kapalina a nad hladinou proudí plyn. Je zřejmé, že tento typ absorpce se hodí pro absorpční systémy, kdy plyn je velmi dobře rozpustný v kapalině, nebo pro chemisorpce, kdy probíhá rychlá chemická reakce. Rovněž je vhodný pro případ, kdy se uvolňuje velké množství reakčního, nebo rozpouštěcího tepla, neboť soustavu zalomených trubek lze dobře chladit [5].



Obr. 1.9: Nákres povrchového absorbéru s chladící kapalinou

Kaskádový absorbér je případ, kdy kapalina stéká po sérii šikmých ploch ve formě tenkého filmu. Když kapalina stéká z jedné desky na druhou tvoří proud překážku pro plyn, který proudí v protiproudu. Plochu mezifázového rozhraní potom tvoří součet všech ploch v kontaktu s kapalinou navýšený o vznikající kapky a pramínky kapaliny mezi deskami. Velkou výhodou tohoto uspořádání oproti sprchovým absorbérům je malá tlaková ztráta plynné fáze a velká tolerance ke znečištění, nebo vzniku pevné fáze jako reakčního produktu [5].



Obr. 1.10: Schema proudění plynu a kapaliny v deskovém (kaskádovém) výměníku hmoty

Dalším typem může být trubkový absorbér, absorpční kapalina stéká po povrchu trubek ve formě tenkého filmu a plyn proudí v protisměru. Zařízení potom připomíná trubkový výměník tepla. Tento typ je vhodný pro plyny s velkou rozpustností, nebo rychlou reakcí v kapalině. Reakční či rozpouštěcí teplo lze snadno odvádět chladícím médiem v trubkách [5].

1.6.2 Sprchový absorbér – scrubber

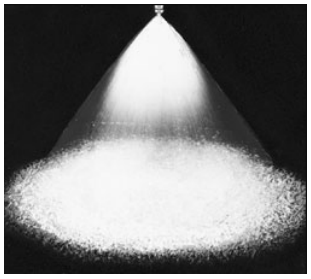
Jedná se o jednoduchý válec kde plyn vstupuje vespod a je zkrápěn kapalinou. V horní části absorpční kolony je umístěn rozdělovač kapaliny (děrované potrubí, série trysek,...) a vystupuje tudy ze systému čištěný plyn. Kapky z rozdělovače padají proudem vzdušiny vlivem gravitační síly. Dokonalejší rozdělení kapaliny vede ke zvýšení plochy mezifázového rozhraní a zvýšení efektivity absorpčního procesu. Snížením průměru kapky na polovinu dojde ke vzrůstu plochy mezifázového rozhraní dvojnásobně. Rychlost absorpce do dispergované kapaliny je pomalejší, protože na straně kapalné fáze dochází jen k velmi malému promíchávání, plyn tedy proniká do vnitra kapky prakticky jen vlivem difúze [5].

Čím menší jsou kapky dispergované kapaliny, tím vyšší jsou nároky na separaci kapek media z proudícího plynu. Pro oddělení kapek bývá použit lamelový separátor kapek. Kapky naráží do šikmo umístěných lamel, čímž ztrácejí kinetickou energii a poté volně stékají zpět do kolony [8].

Název scrubber vychází z anglického slova scrubbing – kartáčování, nebo čištění. Tedy výraz *gas scrubber* je míněn jako pračka plynu. Pro dispergaci kapaliny lze výhodně použít spirálovou trysku (obr. 1.11a), která vytváří souvislou clonu (obr. 1.11b). Úhel a tvar clony je dán typem trysky. Výrobce rozlišuje dvě základní provedení; tzv. *Full cone spiral nozzle* a *Hollow cone spiral nozzle*. První typ vytváří souvislý kužel rozprášené kapaliny, tento kužel je celý vyplněn kapkami kapaliny. Trysky většinou tvoří nehomogenní kužel, tedy pod určitými uhly je proud dispergované kapaliny intenzivnější. Vytvořená clona uzavírá shora absorpční komoru, plyn je tedy nucen projít proudem kapek kapaliny [8, 19].

Výhodou scrubberu je především vysoká účinnost přestupu hmoty, velký rozsah průtoků obou fází, snadný odvod tepla při exotermických reakcích a snadná kontrola při chemisorpci. Nevýhodou jsou vysoké nároky na čerpadlo; spirálová tryska vyžaduje vysoký

a: Tryska [19]



b: Vodní clona [20]

Obr. 1.11: Schema spirálové trysky a clony tryskou tvořené

tlak. Na rozdíl od náplňového absorbéru má scrubber nulovou kapacitu v případě poruchy nebo odstávky zkrápěcího systému [8].

Podrobnějším popisem poloprovozního scrubberu a samotným přestupem hmoty v něm se zabývá experimentální část.

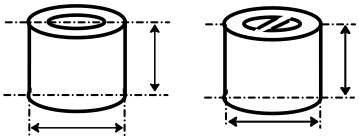
Sprchové absorbéry jsou nejjednodušší typy zařízení, jsou tedy také nejlacinější. Hodí se však pro snadno zachytitelné plyny, doba kontaktu fází je oproti ostatním zařízení podstatně kratší. Tento nedostatek lze však vcelku efektivně vyřešit zařazení svou scrubberů v sérii.

1.6.3 Náplňový absorbér

Nejběžnějším výměníkem hmoty je náplňový absorbér. Jde o kolonu vyplněnou částicovou náplní, přirozenou nebo uměle vytvořenou. Jako přirozená náplň jsou používány např. křemenné valouny, písek nebo koks. Pro různé chemické procesy byly vyvinuty výhodnější umělé náplně s definovanými rozměry a mezerovitostí. Nejčastější jsou Raschigovy kroužky (obr. 1.12a), jedná se o duté válce, jejichž vnější průměr a výška jsou shodné z toho důvodu, aby při nasypání tělísek do kolony byly všechny způsoby orientace těles stejně pravděpodobné a nevytvářely se tak v koloně kanály, kudy by protékala kapalina intenzivněji. Modifikací zvyšující povrch náplně jsou Lessigovy kroužky nebo Pallovy kroužky (obr. 1.12b). Další druh náplně jsou Berlova sedla (obr. 1.12c), sedla Intalox (obr. 1.12d), nebo jiné různě tvarované tělíska [5, 8].

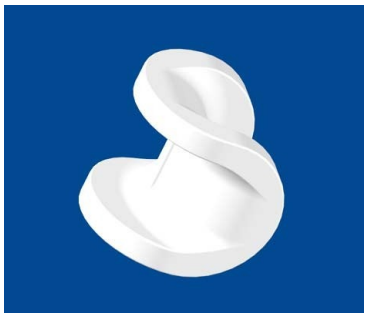
Náplň je uložena na nosných roštech, kde velikost ok je menší než částice náplně. Průměr průtoku nosného roštu musí být menší než volný průřez náplně, aby nedocházelo k zahlcování kolony už na nosném roštu. Vetšinou se jedná o kameninové, nebo kovové pásy postavené na hranu. Perforované desky (děrované dna) nejsou příliš vhodné, přispívají totiž zahlcování kolony. Náplň kolony má často vysokou hmotnost, proto jsou na nosné rošty kladeny vysoké nároky. Rošt je dimenzován na nosnost hmotnosti výplně zatížené kapalinou, tento parametr rovněž ovlivňuje maximální možnou výšku náplně, která bývá 3 až 4 m. Ve velkých kolonách, kde je potřeba větší výška náplně se používá více pater nad sebou. Na každém patře může probíhat jiný proces, tz. lze například stavět kolony s gradientem mezerovitosti náplně, což nachází velké uplatnění při zvyšování účinnosti absorpčního procesu [5].

Na dně náplňové kolony je udržována určitá výška kapaliny, která plní funkci jednak hydraulického uzávěru a také jako zásoba kapaliny pro cirkulační čerpadlo kapaliny.



a: Raschigův a Lessigův kroužek

b: Pallův kroužek



c: Berlovo sedlo

d: Tělísko Intalox

Obr. 1.12: Druhy náplně kolon

Při navrhování rozměrů spodní komory kolony je třeba počítat s nárůstem hladiny kapaliny v případě poruchy nebo odstávky, potrubí přívodu plynu musí být tedy dostatečně vysoko aby i v tomto krajním případě nedošlo k zaplavení potrubí plynné fáze kapalinou [5].

Kapalina musí být v horní části kolony čerpána na náplň rovnoměrně, aby byl zkrápěn rovnoměrně celý průměr náplně. Ideálním způsobem toku je filmový tok v celém objemu náplně, z toho důvodu se používají rozdělovače kapaliny. Při velkém průtoku je vhodné použití sprchy (děrovaná hubice na konci potrubí). V kolonách do průměru 2 m stačí použití jedné sprchy. Dalšími způsoby rozdělení kapaliny je síto na dně plechové pánve nebo rozstřikovací talíř, kdy kapalina dopadá z výšky na talíř, který ji rozstřikuje po průměru kolony [5, 8].

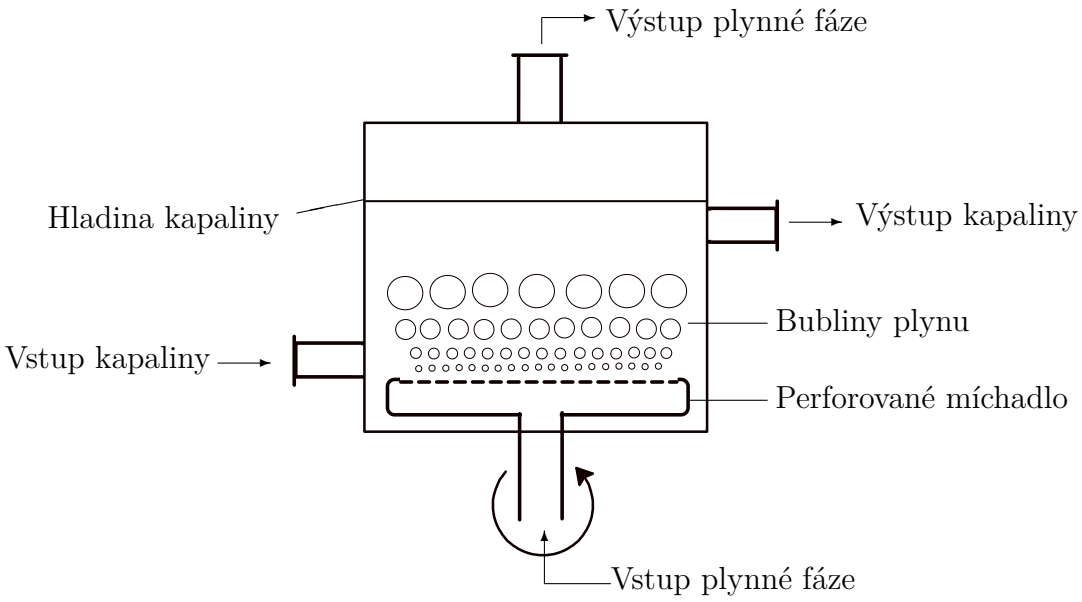
Vlivem proudění plynné fáze skrze smáčenou náplň dochází k únosu kapek proudem plynu, z toho důvodu je nutné na výstupu plynu z kolony umístit separátor kapek, jehož princip je vysvětlen výše (*kapitola 1.6.2*).

Nevýhodou náplňové kolony je náchylnost k zahlcení kolony. Při navrhování je nutné zohlednit mezerovitost náplně, průtok plynu a kapaliny. Kolona musí být navržena tak, aby pracovní podmínky byly pod mezí zahlcení a zároveň nad hranicí účinnosti náplně. Vzhledem k tomu, že experimentální část pojednává o scrubberu, navrhováním rozměrů náplňové kolony se tato práce nezabývá [8].

1.6.4 Probublávající absorbér

Plyn je přiváděn pod hladinu absorpční kapaliny, plyn tvoří bubliny, které stoupají vrstvou kapaliny vzhůru a plyn poté opouští zařízení. Doba kontaktu je závislá na výšce vrstvy kapaliny a velikosti bublin. Transport hmoty probíhá z povrchu bublin do vnitra kapalné fáze, ta se probubláním intenzivně promíchává. V malých bublinách dochází k transportu hmoty směrem k mezifázovému rozhraní čistě difúzí, u větších bublin pak dochází k nepatrnému proudění v plynné fázi, které přestup ovlivňuje [5].

Prodloužení doby kontaktu zvýšením hladiny kapaliny se obvykle míra transportu hmoty nezvýší, protože difúze plynu v bublinách není příliš rychlá. Výhodnější zintenzivnění přestupu hmoty na straně kapaliny je vlivem promíchávání, nebo zmenšení velikosti bublin pomocí rozdělovače (děrované potrubí, pórovité keramické vložky, síta,...). Intenzivnější míchání kapalné fáze lze dosáhnout přídavkem míchadla. Plyn může být přiváděn i přímo míchadlem v podobě perforované trubky (obr. 1.13) [5].



Obr. 1.13: Nákres probublávajícího absorbéru s mícháním kapalné fáze

1.6.5 Ventouriho cyklónový absorbér

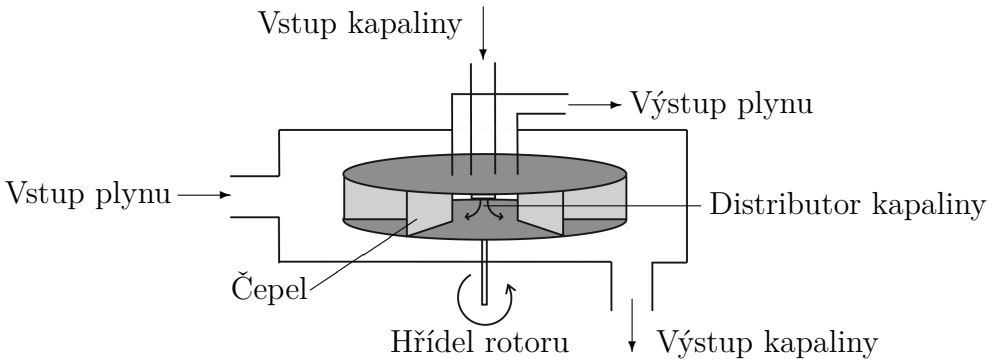
Kontaminovaný plyn společně s absorpční kapalinu vstupuje shora do nálevkovitého hrdla. Kapalina stéká po stěně hrdla a společně s plynem jsou hnány tryskou v podobě modifikované Ventouriho trubice, která rozprašuje kapalinu na malé kapky. Tryska je umístěna vertikálně, pod tryskou je zaplavené koleno, vrstva kapaliny v koleni zabraňuje opotřebení zařízení vlivem pevných částic. Plyn je absorbován do rozprášené kapaliny, směs je dále hnána cyklonovým odlučovačem, kde se fáze separují. Kapky vlivem odstředivé síly tangenciálního proudění naráží na stěny odlučovače a poté stékají na dno zařízení. Plyn proudí vzhůru a přes odlučovač kapek opouští aparaturu. [21].

Ventouriho odlučovač se používá např. k záchytu úletu z horkých plynů při těžbě mědi, kde pracují při vysokých tlacích [21].

Výhodou tohoto zařízení je snadná separace submikronových částic a dobrá atomizace kapaliny. Nevýhodou je vysoký požadavek na tlak plynné fáze a tedy vysoká spotřeba energie.

1.6.6 Absorpce na rotačním čepelovém loži

Jedná se o probublávající typ absorbéru, kde zvýšení plochy mezifázového rozhraní a současně dostatečné promíchávání je uskutečněno pomocí rotačního čepelového lože – uspořádání je znázorněné na obr. 1.14. Otáčky rotoru se pohybují v intervalu 600–1800 min^{-1}, tím dochází ke vzniku silového pole velikosti mnohonásobně vyšší než je gravitační síla. Při použití 1 $\mathrm{mol{\cdot}dm^{-3}}$ vodného roztoku NaOH lze dosáhnout touto metodou až 90% účinnosti odstranění CO_2. Kapalina vtékající do rotačního lože je výrazně urychlena, míru udává rychlost rotace. Čím vyšší je odstředivé zrychlení, tím menší je tvořen film mezifázového rozhraní a drobnější kapky. Přestup hmoty je díky tomu 10–100 násobně vyšší než na běžném absorpčním loži a absorpční zařízení může mít výrazně menší rozměry. Absorbér s rotační loží se běžně využívá k různým procesům zahrnující destilaci, absorpci VOC (těkavé organické sloučeniny), CO_2, O_3, stripování nebo reakční precipitaci [22].



Obr. 1.14: Absorbér s rotační čepelovou loží

Nevýhodou tohoto uspořádání je nízká smyková rychlost mezi kapalinou a plynem, způsobená vzájemným skluzem ve dvoufázovém systému. Pro zlepšení je možné instalovat do systému statické norné stěny, tzv. baffle. Tímto způsobem modifikovaný systém umožňuje zvýšení koeficientu prostupu hmoty K_g až o 17 %. Takové uspořádání dobře nahrazuje rozměrově náročné, náplňové absorbéry při absorpci VOC [23].

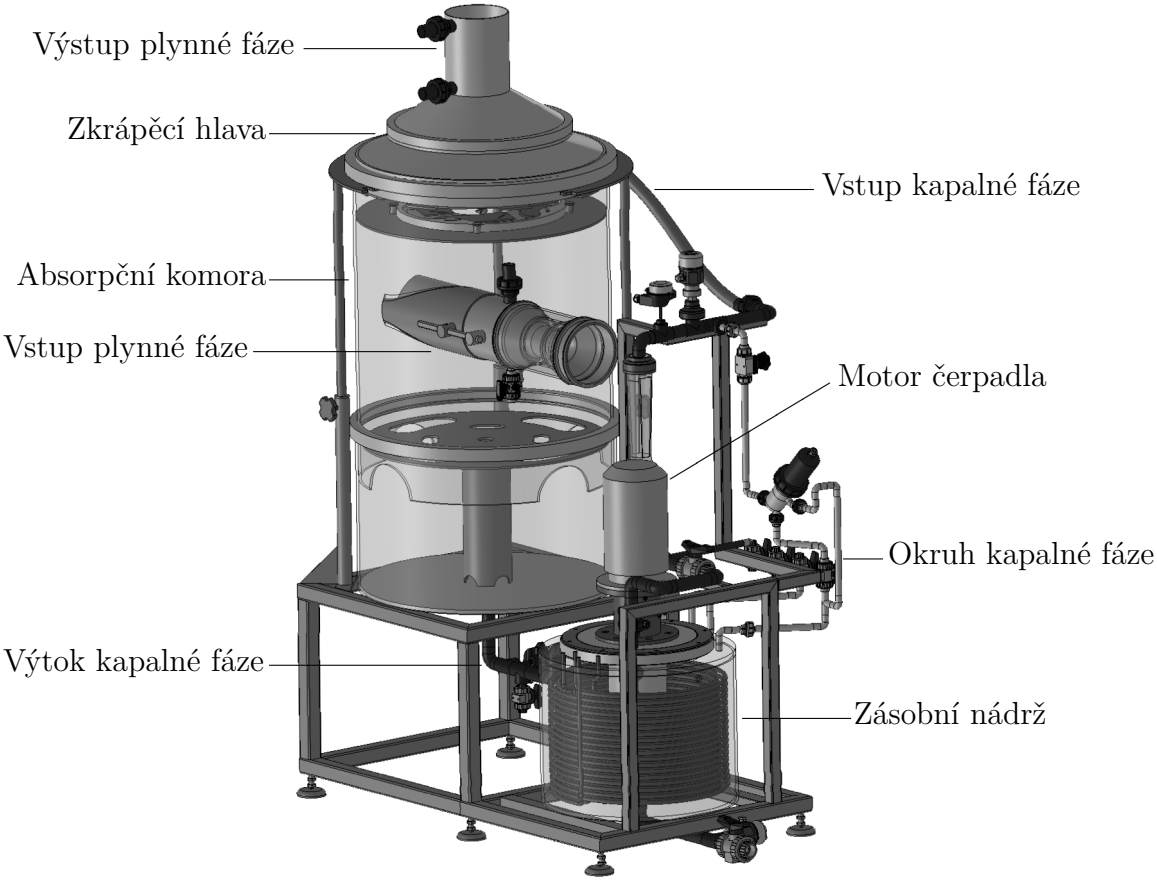
2 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Experimentální část se zabývá popisem poloprovozního scrubberu a zjištěním vlivu regulačních prvků na přestup hmoty. Experimenty navazují na disertační práci Ing. Josefa Kalivody PhD. Plán experimentu tedy vychází z předchozích měření.

2.1 Popis poloprovozního scrubberu

Hlavní část zařízení je tvořena absorpční komorou, do které ústí spirálová tryska, tou vstupuje kapalná fáze do systému prostřednictvím clony ve tvaru kužele. Kapalina poté dopadá na dno absorpční komory a volně odtéká potrubím do zásobní nádrže. Čištěný plyn vstupuje do absorpční komory tangenciálně prostřednictvím deflegtoru, kde je v protiproudém kontaktu s kapalinou a poté odchází přes soustavu regulačních clon do separátoru kapek. Plyn je v systému čerpán podtlakovým ventilátorem z důvodu snížení úniku kontaminované vzdušiny do laboratoře. Kapalina je ze zásobní nádrže čerpána odstředivým čerpadlem, temperaci kapaliny umožňuje spirálový trubkový výměník v zásobní nádrži, jehož chladící medium je přiváděno z externího termostatu.

Na obr. 2.1 je patrné nosné patro uprostřed absorpční komory umožňující modifikaci systému o sypanou náplň za účelem zvětšení mezifázového rozhraní.



Obr. 2.1: Zjednodušený nákres zařízení

Chod přístroje je řízen pomocí ovládacího panelu, umístěného na skříni s elektronikou na zdi laboratoře. Výstup téměř všech měřících prvků je elektronicky zaznamenáván

na zobrazovači, ten umožňuje také export naměřených dat. Prostřednictvím ovládacího panelu se zapíná a vypíná čerpadlo a ventilátor. Frekvenční měnič čerpadla a ventilátoru reguluje otáčky tak, aby byl dosažen požadovaný tlak, nastavený na ovládacím panelu.

2.1.1 Ovládací panel

Elektronika celé aparatury je uložena ve skříni na zdi laboratoře. Na víku skříně je připevněn ovládací panel SIEMENS Logo pro nastavení požadovaného tlaku v okruhu plynné a kapalné fáze. Zapnutí a vypnutí čerpadla a ventilátoru probíhá také pomocí ovládacího panelu. Systém je vybaven zaznamenávačem dat, který jednak ukazuje aktuální naměřené hodnoty čidel v aparatuře, vykresluje závislost hodnot na čase, ale umožňuje také export naměřených dat do osobního počítače prostřednictvím SD karty.

2.1.2 Okruh kapalné fáze

Kapalná fáze je uložena v zásobní nádrži o objemu 100 dm^3, potrubím je rozháněna odstředivým čerpadlem, které je umístěno na horní části nádrže. Potrubí vedoucí z čerpadla je rozděleno do dvou větví, jedna větev vede zpět do nádrže „bypass“ a umožňuje míchání obsahu nádrže, druhá větev vede přes regulační tlakovou sondu na spirálovou trysku. Mezi jednotlivými větvemi je možné přepínat příslušnými membránovými ventily.

Kapalina je rozptylována spirálovou tryskou jejíž princip je popsán již v teoretické části (*kapitola 1.6.2*). Mezi spirálovou tryskou a regulačním tlakovým čidlem je zařazeno několik potrubních tvarovek (obr. 2.2), je tedy zřejmé že tlak na čidle neodpovídá tlaku na trysce, proto je třeba počítat s tlakovou ztrátou potrubí. Dispergovaná kapalina padá absorpční kolonou na dno kde volně odtéká potrubím zpět do zásobní nádrže.

Obr. 2.2: Potrubí spirálové trysky

2.1.3 Okruh plynné fáze

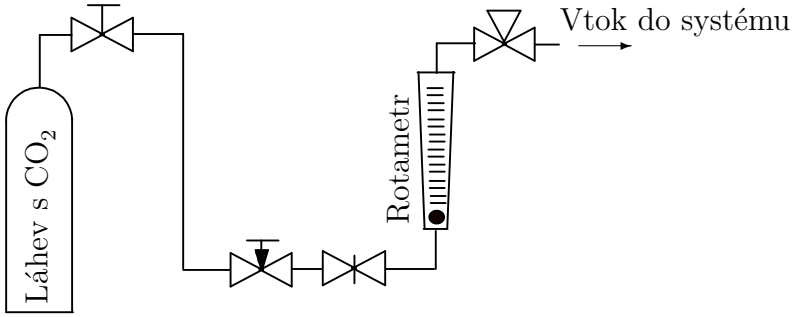
Plynná fáze je čerpána aparaturou podtlakovým ventilátorem, který je umístěn na konci potrubí, z toho důvodu jsou hodnoty tlaku měřeny v záporných číslech (relativní podtlak). Čerstvý vzduch je čerpán z laboratoře, na ústí potrubí je umístěn anemometr kvůli měření rychlosti proudění. Bezprostředně za ústím potrubí je přívod kontaminujícího plynu z tlakové lahve. Na trase mezi ústím potrubí a vstupem do absorpční kolny je vložena Ventouriho trubice, která zdokonaluje promísení čerstvého vzduchu s kontaminantem.

Tangenciální vstup plynu do kolony je zprostředkován pomocí tzv. „deflegtoru“, jehož funkce je popsána v kapitole Regulační prvky (*kapitola 2.1.4*).

Plynná fáze je zkrápěna absorpčním roztokem, poté opouští zkrápěcí hlavu skrze tři regulační přepážky, jejichž funkce je popsána níže (*kapitola 2.1.4*). Unesené kapky kapalné fáze se oddělí v separátoru kapek, který funguje na principu prudké změny směru vzdušiny; kapky naráží do stěn a poté stékají na dno absorpční kolny. Aparaturu opouští vzdušina skrze již zmíněný ventilátor a je vedena do laboratorní digestoře centrálního odtahu. Složení plynné fáze je analyzováno dvěma IR sondami, první z nich je umístěna bezprostředně na vstupu do kolony a druhá na výstupu, za separátorem kapek.

Dávkování kontaminujícího plynu

Do okruhu plynné fáze byl v průběhu experimentu dávkován kontaminující plyn. Za tímto účelem byl použit oxid uhličitý potravinářské kvality z tlakové lahve. Pro přesnější nastavení byla použita řada armatur (obr. 2.3), spojených s okruhem plynné fáze měděným potrubím. Okruh CO_2 je vybaven redukčním ventilem pro tlakové lahve, regulačním ventilem pro přesnější nastavení tlaku z důvodu postupného poklesu tlaku v lahvi, jehlovým ventilem pro nastavení požadovaného průtoku plynu a kuličkovým rotametrem pro orientační indikaci průtoku plynu.



Obr. 2.3: Schema potrubí kontaminujícího plynu

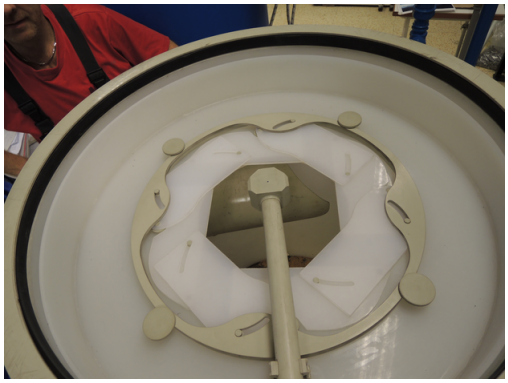
2.1.4 Regulační prvky

Aparatura je zkonstruována jako poloprovozní zařízení, které má sloužit jako předloha ke konstrukci absorbéru 2. generace, obsahuje tedy několik regulačních prvků, které umožňují prověřit vliv konstrukčních změn na účinnost prostupu hmoty.

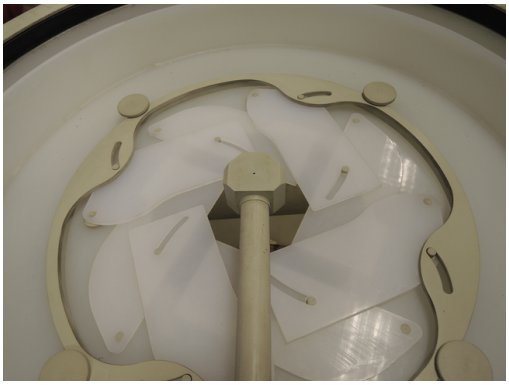
Regulační přepážky

Plynná fáze prostupuje kolonou a v horní části je zdržována sadou nastavitelných přepážek. První z nich (obr. 2.4) je umístěna na úrovni trysky, hypoteticky tedy upravuje tvar kužele dispergované kapaliny. Jedná se o kruhovou clonu, jejíž průměr je nastavitelný. Průměr ze nastavit pomocí obvodové obruče po povolení fixních šroubů.

Další přepážka je složena ze dvou překrytých identických desek (obr. 2.5), které mají po obvodu kolony výřezy, vzájemným pootočením desek lze měnit velikost průduchů na obvodu zkrápěcí hlavy. Poloha desek vůči sobě je fixována středovým šroubem, před manipulací je třeba šroub povolit.

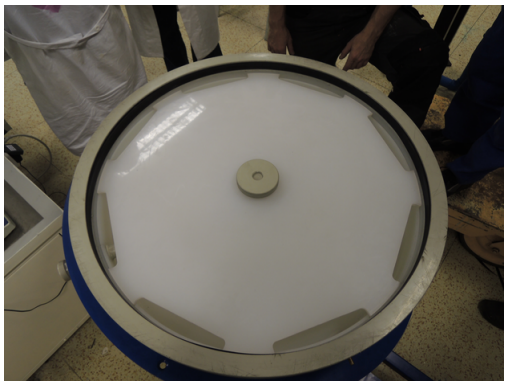


a: Otevřená poloha

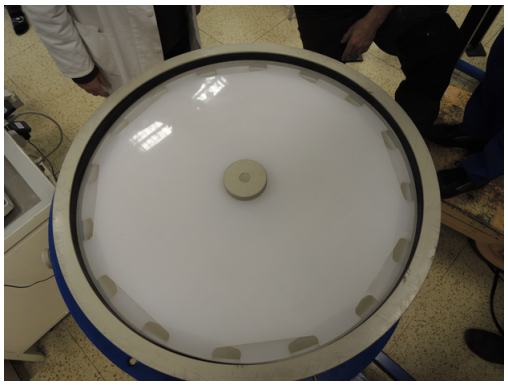


b: Uzavřená poloha

Obr. 2.4: Snímky clony pod tryskou



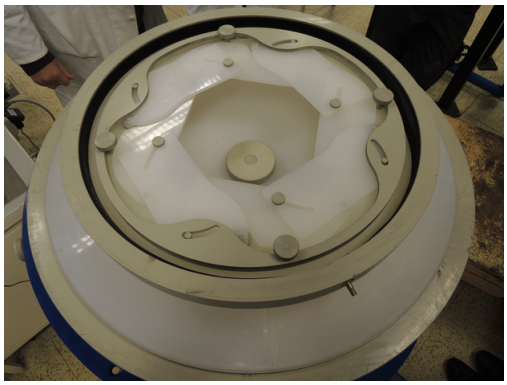
a: Otevřená poloha



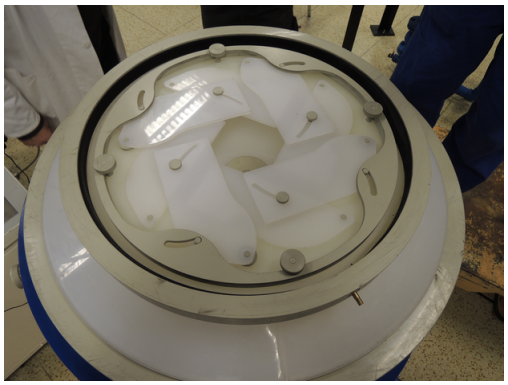
b: Uzavřená poloha

Obr. 2.5: Snímky obvodové clony

Poslední clona je založena na stejném principu jako clona pod tryskou, avšak je umístěna na výstupu z kolony, pod separátorem kapek. Pro nastavení přepážek je nutné rozebrání zkrápěcí hlavy. O těsnost rozebíratelných částí hlavy se starají těsnící obvodové kroužky, které jsou napojeny na centrální potrubí se stlačeným vzduchem. Po nastavení přepážek je tedy nutná kontrola správné těsnosti.



a: Otevřená poloha



b: Uzavřená poloha

Obr. 2.6: Snímky vrchní clony

Výška zkrápěcí hlavy

Aparatura umožňuje změnu výšky skrápěcí hlavy posunem horní části kolony, která je držena nastavitelnou ocelovou konstrukcí. Při zvýšení zkrápěcí hlavy dojde ke zvýšení objemu absorpční kolony. Nevýhodou je, že ústí plynu do kolny je fixováno k pohyblivé části, jinými slovy; při změně výšky zkrápěcí hlavy zůstane vzdálenost ústí plynu a trysky nezměněna.

Posun deflegtoru

Plynná fáze vstupuje do kolony prostřednictvím tzv. deflegtoru, jedná se o zásuvnou trubici, jejíž poloha určuje způsob proudění plynné fáze v koloně. Ústí deflegtoru má takový tvar, aby rozstřik zkrápěcího media neovlivnil měření IR sondy na vstupu do kolony. V zasunuté poloze je proudění v koloně hypoteticky více tangenciální než při vysunuté poloze. Deflegtor je připojen pomocí flexibilní hadice, která umožňuje změnu jeho polohy.

Obr. 2.7: Snímek deflegtoru ve vysunuté poloze

2.1.5 Měřící prvky a přístroje

Pro měření a regulaci systému jsou použity měřící prvky uvedené v tab. 2.1

Tab. 2.1: Použité měřicí čidla v aparatuře

Měřicí zařízení	Výrobce	Označení	Jednotka	Přesnost
Čidlo tlaku plynu	Endress+Hauser	PCM51	bar	0,001 mbar
Čidlo tlaku kapaliny	Endress+Hauser	PCM51	mbar	0,01 bar
Anemometr	Airflow	LCA 6000 VT	$m \cdot s^{-1}$	0,01 $m \cdot s^{-1}$
IR sonda	Testo	535 CO_2	ppm/obj. %	1 ppm

2.2 Plán experimentu

Cílem experimentální části je proměřit vliv regulačních prvků uvedených výše (*kapitola 2.1.4*). Vzhledem k tomu, že Ing. Josef Kalivoda PhD. dospěl k názoru, že k nejúčinějšímu přestupu hmoty dochází v základním nastavení regulačních prvků při nastavených hodnotách tlaku kapalné fáze 2,8 bar a tlaku plynné fáze −0,2 mbar. Cílem práce je tedy

navázat na tuto práci a s konstantním nastavením tlaku plynné a kapalné fáze najít takové nastavení regulačních prvků, při kterém bude přestup hmoty při chemisorpci nejvyšší.

Pro experiment byla zvolena absorpce oxidu uhličitého do 1% roztoku hydroxidu sodného dle rovnice (1.82) a (1.83). Produktem reakce je tedy uhličitan sodný případně hydrogenuhličitan sodný. Předešlá měření na přístroji probíhaly při 5 °C, předpoklad byl, že rychlost přestupu hmoty řídí rozpustnost plynu v absorpčním mediu. Cílem této práce je prověřit přestup hmoty při laboratorní teplotě, tedy 20 °C, za předpokladu, že při vyšší teplotě media bude reakce probíhat rychleji.

V první řadě byl experimentálně zjištěn vliv jednotlivých regulačních prvků na účinnost systému. Celkem bylo proměřeno 5 regulačních prvků samostatně. Na základě zjištěných vlivů, byly proměřeny vhodné kombinace prvků. V poslední části byla zjištěna teplotní závislost účinnosti aparatury při vhodném nastavení prvků a také závislost účinnosti na koncentraci kontaminantu ve vzdušině. Každé měření při určitém nastavení bylo třikrát zopakováno.

2.2.1 Postup experimentu

- Nejprve bylo do nádrže načerpáno přibližně 84 dm^3 vody z vodovodního řádu, tento krok byl proveden vždy jako první kvůli časové náročnosti temperace media v nádrži na požadovanou teplotu.
- Na termostatu byla nastavena požadovaná teplota a byl spuštěn míchací by-pass okruh nádrže.
- V mezičase byly umístěny externí měřicí zařízení a aktivovány těsnící kroužky aparatury.
- Po dosažení požadované teploty v nádrži bylo do nádrže přilito vždy 1,3 dm^3 50% roztoku hydoxidu sodného. Díky uvolnění tepla při zředění vždy vzrostla teplota o několik °C, bylo tedy nutné po určitý čas temperovat nádrž ještě po přidání NaOH.
- Po dosažení patřičné teploty byl na ovládacím panelu přístroje nastaven požadovaný tlak plynné a kapalné fáze, dále byla aktualizována a smazána SD karta pro export dat, poté byly spuštěny současně ventilátor a čerpadlo.
- V prvních 5 minutách byly zaznamenávány hodnoty obsahu CO_2 na vstupu a výstupu bez přídavku kontaminujícího plynu, tento časový interval byl určený k ustálení toků.
- Na konci 4. minuty byl otevřen ventil tlakové lahve s CO_2, jehož průtok byl nastaven jemným jehlovým ventilem na vstupu do systému, pro rychlou orientaci a indikaci proudu plynu sloužil kuličkový rotametr.
- Po uplynutí minuty od otevření ventilu s CO_2 byla zaznamenána první hodnota obsahu CO_2 na vstupu a výstupu ze skrápěcí hlavy. Celkem bylo zaznamenáno 5 hodnot v minutových intervalech.
- Po zapsání poslední hodnoty obsahu CO_2 byl nejprve uzavřen ventil tlakové lahve a až poté bylo vypnuto čerpadlo a ventilátor.
- Průměrná rychlost proudění vzdušiny byla odečtena z anemometru po ukončení experimentu.
- Naměřená data z měřících přístrojů v aparatuře byly vyexportovány na SD kartu.
- Pomocí membránového čerpadla byl vyčerpán roztok do odpadní výlevky a z vodovodního řádu byla načerpána čistá voda.
- Kvůli náchylnosti IR sond na vlhkost byly odmontovány analytické koncovky z aparatury a poté bylo spuštěno čerpadlo i ventilátor. Aparatura byla po dobu 5 minut

proplachována čistou vodou.
- Průplach byl vždy zopakován a poté byl započat nový experiment.
- Aparatura byla v pravidelných intervalech (přibližně 20 experimentů) proplachována roztokem kyseliny citronové z důvodu zanášení potrubí uhličitanem sodným.

2.2.2 Použité chemikálie

Pro experimentální práci byly použity následující chemikálie:
- *Voda*, jako zdroj vody byl použit vodovodní řád města Brna.
- *Hydroxid sodný* byl použit roztok o koncentraci 50 obj. %.
- *Kyselina citronová* ve formě prášku k přípravě roztoku pro čištění aparatury.
- *Oxid uhličitý* potravinářské kvality v zásobní tlakové lahvi.

2.2.3 Sled experimentů

První část – vliv samostatných prvků

1. Vzhledem k tomu, že předešlá měření na přístroji probíhala výhradně při nízkých teplotách, proběhlo nejdříve měření se základním nastavením regulačních prvků, aby bylo možné porovnat vliv všech regulačních prvků s výchozí polohou. Tlak kapalné fáze byl nastaven na 2,83 bar (byla zjištěna diference – při nastavení 2,83 bar, byl reálný tlak 2,80 bar), tlak plynné fáze na 0,21 mbar. Teplota roztoku v nádrži byla přibližně 20 °C. Průtok kontaminantu z tlakové lahve byl nastaven tak, aby koncentrace CO_2 ve vzdušině byla 0,5 obj %, tedy 5 000 ppm
2. Pro další experiment byly uzavřeny všechny tři překážky ve zkrápěcí hlavě. Toto nastavení přepážek bylo proměřeno mezi prvními z důvodu současné práce na simulaci dvoufázového toku ve scrubberu Ing. Ondřeje Krištofa.
3. Dále byl proměřen vliv horní přepážky, která hypoteticky účinnost přestupu hmoty zvyšovat nebude. Horní přepážka tedy byla nastavena na nejmenší průměr, zatímco ostatní byly nastaveny na největší průměr.
4. Stejným způsobem jako výše byl prověřen vliv střední obvodové clony.
5. Konečně byla prověřena spodní clona na úrovni trysky, která bude zřejmě zásadně ovlivňovat hydraulické vlastnosti zkrápěcí hlavy.
6. Dalším postupem bylo nastavení všech přepážek zpět do výchozí polohy a prověření změny výšky zkrápěcí hlavy. Pomocí nosné konstrukce byla vysunuta zkrápěcí hlava do maximální polohy.
7. Po navrácení zkrápěcí hlavy do výchozí polohy byl vysunut deflegtor a prověřen jeho vliv.

Druhá část – kombinace prvků a teplotní závislost

1. Na základě naměřených dat z první části, bylo zvoleno vhodné nastavení regulačních prvků tak, aby účinnost vypírky byla co nejvyšší.
2. IR sondy pro měření obsahu CO_2 ve vzdušině jsou citlivé na vlhkost. Absorpční pás infračerveného záření vody z části překrývá absorpční pás oxidu uhličitého, měření je tedy náchylné na zvýšenou vlhkost. Protože měření byla prováděna při laboratorní teplotě cca 20 °C a kapalina byla rozprášena na malé kapky, byla za separátorem

kapek v místě uložení IR sondy na výstupu často během měření pozorována vlhkost. Proto byl zopakován experiment při uzavřených přepážkách pro několik teplot v nádrži a to 5 °C, 10 °C, 15 °C a 20 °C.

3. Na závěr byl ověřen vliv koncentrace kontaminantu ve vzdušině na prostup hmoty. V případě, kdy by byly použity dva absorbéry sériově za sebou, je vhodné posoudit, jaká bude účinnost při nižším obsahu kontaminantu ve druhém zařízení. Proto byly proměřeny experimenty v rámci rozsahu měření použitých IR sond při obsahu 0,3; 0,5; 0,7 a 0,9 obj. %.

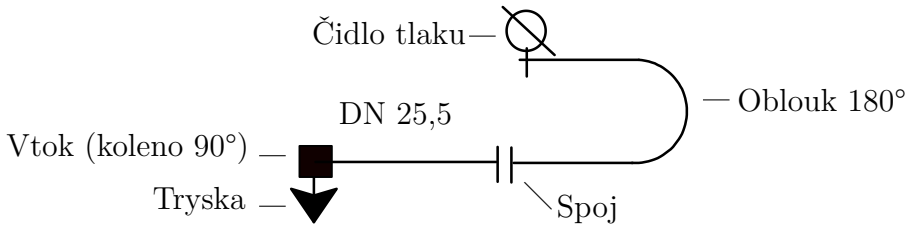
2.3 Vyhodnocení experimentálních dat

V práci jsou uvedeny ukázkové výpočty pro experiment, kdy jsou uzavřeny všechny přepážky ve zkrápěcí hlavě, deflegtor ve výchozí (zasunuté) poloze a výška zkrápěcí hlavy je nastavená minimální. Identický postup byl však aplikován i na ostatní experimenty.

2.3.1 Hydraulické charakteristiky

Výpočet tlakové ztráty potrubí trysky

Tlakové čidlo kapalné fáze, podle kterého řídí frekvenční měnič otáčky čerpadla je umístěno v určité vzdálenosti od trysky a navíc mezi tryskou a čidlem je umístěno několik potrubních tvarovek, které ovlivňují měření tlaku. Uspořádání tlakového potrubí kapalné fáze je patrné již z obr. 2.2, podrobné, zjednodušené schema potrubí je zakresleno na obr. 2.8.



Obr. 2.8: Schema tlakového potrubí

Hodnotu tlakové ztráty lze vypočítat pomocí ekvivalentních délek použitých armatur ze vztahu:

$$\Delta p_{\text{ztr.}} = \lambda_{\text{t}} \cdot \frac{l + \sum l_{\text{ekv.}}}{d} \cdot \frac{w^2}{2} \cdot \rho, \tag{2.1}$$

kde $\Delta p_{\text{ztr.}}$ je ztráta tlaku třením, λ_{t} je součinitel tření potrubí, l je délka potrubí, $l_{\text{ekv.}}$ je ekvivalentní délka potrubí (hodnoty ekvivalentní délky některých potrubních tvarovek jsou uvedeny v tab. 2.2), d je průměr potrubí, w je rychlost proudění. Hodnotu součinitele tření λ_{t} lze vypočítat ze vztahu:

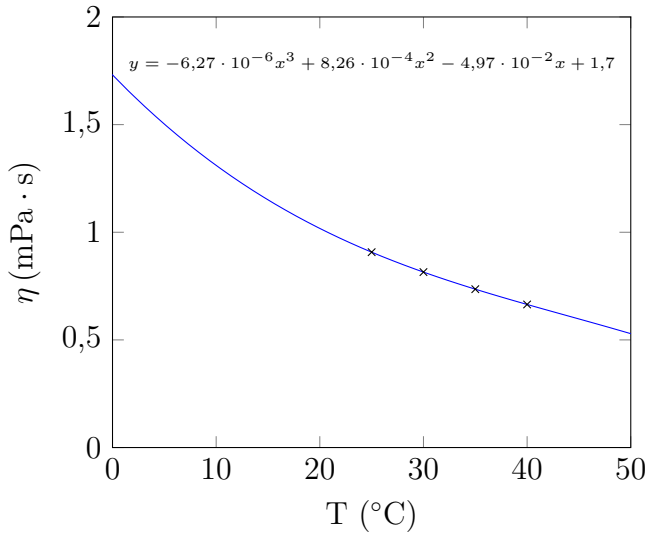
$$\lambda_{\text{t}} = \left[\frac{1}{-2 \cdot \log\left(\left[\frac{6{,}81}{Re}\right]^{0{,}9} + \frac{\varepsilon}{3{,}7 \cdot d} \right)} \right]^2, \tag{2.2}$$

kde Re je Reynoldsovo kriterium, které lze vypočítat ze vztahu (1.33), ε je absolutní drsnost potrubí a d je průměr potrubí. Tabulkové hodnoty potřebné pro výpočet tlakové ztráty potrubí jsou uvedeny v tab. 2.2.

Tab. 2.2: Tabelované hodnoty potřebné pro výpočet tlakové ztráty [8, 24]

Drsnost potrubí (PP, PE, PVC)	0,01	mm
$l_{\text{ekv.}}$ Oblouk 180° ($l_{\text{ekv.}}/d$)	75	
$l_{\text{ekv.}}$ Šoupátko otevřené ($l_{\text{ekv.}}/d$)	7	
$l_{\text{ekv.}}$ Koleno 90° ($l_{\text{ekv.}}/d$)	40	

V první řadě je nutné vypočítat Reynoldsovo kriterium, proto je potřeba zjistit viskozitu a hustotu absorpčního roztoku. Velká většina publikací se zaobírá viskozitou 1% roztoku NaOH při vysokých teplotách, pro možnost výpočtu viskozity při nízkých teplotách aplikovaných v experimentu, byl sestaven z tabelovaných hodnot matematický model (obr. 2.9), umožňující odhad viskozity pro libovolnou teplotu.



Obr. 2.9: Závislost viskozity 1% roztoku NaOH na teplotě [25]

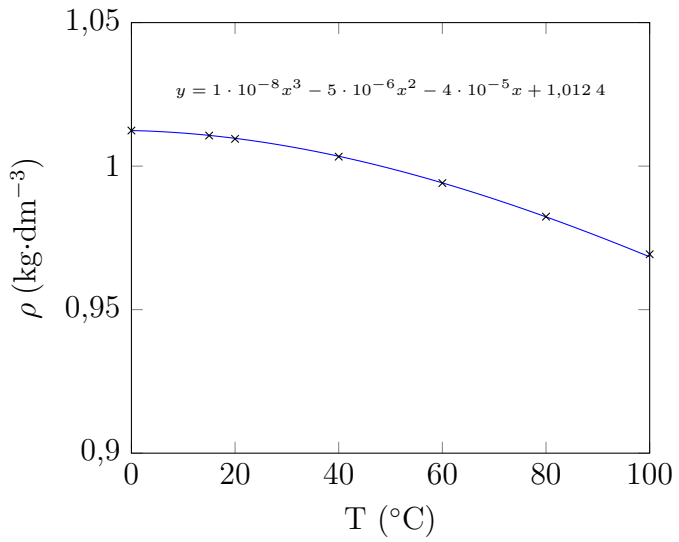
Viskozita byla pro teplotu média 19,64 °C vypočítána dle:

$$\begin{aligned}
\eta &= -6{,}267 \cdot 10^{-6}x^3 + 8{,}260 \cdot 10^{-4}x^2 - 4{,}967 \cdot 10^{-2}x + 1{,}731 \\
\eta &= -6{,}267 \cdot 10^{-6} \cdot 19{,}64^3 + 8{,}260 \cdot 10^{-4} \cdot 19{,}64^2 - 4{,}967 \cdot 10^{-2} \cdot 19{,}64 + 1{,}731 \\
\eta &= 1{,}027 \cdot 10^{-3}\ \text{Pa} \cdot \text{m}
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Stejným způsobem byl sestaven polynom pro výpočet hustoty 1% roztoku NaOH při libovolné teplotě (viz obr. 2.10). Hustota roztoku při teplotě 19,64 °C byla vypočítána dle:

$$\begin{aligned}
\rho &= 1 \cdot 10^{-8}x^3 - 5 \cdot 10^{-6}x^2 - 4 \cdot 10^{-5}x + 1{,}012\,4 \\
\rho &= 1 \cdot 10^{-8} \cdot 19{,}64^3 - 5 \cdot 10^{-6} \cdot 19{,}64^2 - 4 \cdot 10^{-5} \cdot 19{,}64 + 1{,}012\,4 \\
\rho &= 1{,}010\,51\ \text{kg} \cdot \text{dm}^{-3} = 1010{,}51\ \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Reynoldsovo kritérium definuje míru turbulentního proudění v kapalině. Průtok kapalné fáze je měřen v podobě objemového průtoku v jednotce $\text{m}^3\text{hod}^{-1}$, k výpočtu rychlosti proudění nutné pro výpočet Reynoldsova kriteria je tedy nutná znalost průměru



Obr. 2.10: Závislost hustoty 1% roztoku NaOH na teplotě [25]

tlakového potrubí, což je 25,5 mm. Reynoldsovo kriterium při průtoku 113,15 m^{3}hod^{-1} bylo vypočítáno následujícím způsobem.

$$w = \frac{\dot{V}(\mathrm{m^3hod^{-1}})}{S(\mathrm{m^2}) \cdot 60 \cdot 10^3} = \frac{113{,}15}{0{,}0255^2 \cdot 60 \cdot 10^3} = 2{,}900\ \mathrm{m\ s^{-1}}$$
$$Re = \frac{\rho \cdot w \cdot d}{\eta} = \frac{1\,010{,}51 \cdot 2{,}900 \cdot 0{,}025\,5}{1{,}027 \cdot 10^{-3}} = 72\,763 \tag{2.5}$$

Vzhledem k tomu že Reynoldsovo kriterium je výrazně vyšší než 2 000, lze usoudit, že proudění je při těchto podmínkách silně turbulentní. Nyní je možné vypočítat součinitel tření v potrubí:

$$\lambda_\mathrm{t} = \left[\frac{1}{-2 \cdot \log\left(\left[\frac{6{,}81}{Re}\right]^{0{,}9} + \frac{\varepsilon}{3{,}7 \cdot d}\right)}\right]^2 = \left[\frac{1}{-2 \cdot \log\left(\left[\frac{6{,}81}{72\,763}\right]^{0{,}9} + \frac{0{,}01 \cdot 10^{-3}}{3{,}7 \cdot 0{,}0255}\right)}\right]^2$$
$$\lambda_\mathrm{t} = 2{,}999 \cdot 10^{-2} \tag{2.6}$$

Na základě takto zjisštěných hodnot lze vypočítat tlakovou ztrátu potrubí kapalné fáze. Vzhledem k tomu, že použité armatury nejsou přesně charakterizované, byl jejich lokální odpor vůči toku přirovnán k tabelovaným hodnotám, např. na obr. 2.8 je naznačen spoj potrubí, v němž se průměr potrubí snižuje přibližně o 2 mm, tato tvarovka byla přirovnána k otevřenému šoupátku.

$$\begin{aligned}
\Delta p_\mathrm{ztr.} =& \lambda_\mathrm{t} \cdot \frac{l + \sum l_\mathrm{ekv.}}{d} \cdot \frac{w^2}{2} \cdot \rho \\
\Delta p_\mathrm{ztr.} =& 0{,}029\,9 \cdot \frac{1{,}255 + 75 \cdot 0{,}025\,5 + 7 \cdot 0{,}025\,5 + 40 \cdot 0{,}025\,5}{0{,}025\,5} \cdot \\
& \cdot \frac{2{,}900^2}{2} \cdot 1\,010{,}51 \\
\Delta p_\mathrm{ztr.} =& 18\,633\ \mathrm{Pa} = 0{,}186\,3\ \mathrm{bar}
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Celkem tedy byly uvažovány čtyři potrubní tvarovky v tomto pořadí; oblouk 180°, šoupátko uzavřené (spoj) a koleno 90°. Hodnoty ekvivalentních délek tvarovek jsou seřazeny v tab. 2.2. Z výpočtu tlakové ztráty plyne, že pokud je na tlakovém čidle naměřen tlak 2,83 bar, tak na trysce je tlak přibližně o 0,186 bar nižší, tedy 2,64 bar.

Výpočet normovaného průtoku plynné fáze

V aparatuře scrubberu je pro měření průtoku plynné fáze použit indukční průtokoměr, ten je však náchylný na turbulence v proudu plynu a stejně tak vlhkost. Vlhkost i turbulence jsou v místě průtokoměru velké a naměřené data neodpovídaly hodnotám naměřeným externím anemometrem. Z toho důvodu byl průtok plynné fáze měřen externím anemometrem uvedeným výše – *kapitola 2.1.5*. Důležitým parametrem pro výpočet objemového průtoku je průměr rotoru anemometru, což je 10,5 cm. Anemometr byl umístěn bezprostředně na vstupu do potrubí, vstup kontaminantu byl zařazen až za anemometrem, ale vzhledem k tomu, že koncentrace CO_2 ve vzdušině byla 0,3 až 0,9 obj. %, tak byl vliv přidávaného CO_2 zanedbán.

Výpočet objemového průtoku:

$$\dot{V} = w \cdot S = w \cdot \pi \left(\frac{d}{2}\right)^2 = 5{,}50 \cdot \pi \left(0{,}5 \cdot 0{,}105\right)^2 \cdot 3\,600 = 171{,}4\ \mathrm{m^3 hod^{-1}} \tag{2.8}$$

Výpočet hustoty vzduchu při pracovních podmínkách na vstupu do systému:

$$\rho_{\mathrm{vzd.,in}} = \frac{M_{\mathrm{vzd.}} p}{\mathrm{R}T} = \frac{28{,}96 \cdot 10^{-3} \cdot 100\,779}{8{,}314 \cdot (23{,}34 + 273{,}15)} = 1{,}184\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \tag{2.9}$$

Výpočet hustoty kontaminujícího CO_2 při podmínkách na vstupu do systému:

$$\rho_{\mathrm{CO_2,in}} = \frac{M_{\mathrm{CO_2}} p}{\mathrm{R}T} = \frac{44{,}01 \cdot 10^{-3} \cdot 100\,779}{8{,}314 \cdot (23{,}34 + 273{,}15)} = 1{,}799\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \tag{2.10}$$

Průměrná koncentrace CO_2 na vstupu byla 5 409 ppm. Výpočet hustoty směsi vstupující do kolony má tento tvar:

$$\begin{aligned} \rho_{\mathrm{sm.,in}} =& \varphi \cdot \rho_{\mathrm{CO_2}} + (1 - \varphi)\, \rho_{\mathrm{vzd.}} = 5\,409 \cdot 10^{-6} \cdot 1{,}799 + \left(1 - 5\,409 \cdot 10^{-6}\right) \cdot 1{,}184 \\ \rho_{\mathrm{sm.,in}} =& 1{,}187\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \end{aligned} \tag{2.11}$$

Hustota vzdušiny na výstupu byla vypočítána obdobným způsobem, ale při podmínkách na výstupu, tedy 100 603 Pa, 21,32 °C a při složení vzdušiny 3 065 ppm. Na základě zjištěné hustoty vzdušiny, bylo možné vypočítat hmotnostní průtok vzdušiny:

$$\dot{m} = \dot{V}_{\mathrm{in}} \cdot \rho_{\mathrm{sm.,in}} = 171{,}4 \cdot 1{,}187 = 203{,}5\ \mathrm{kg^3 hod^{-1}} \tag{2.12}$$

z toho pak byl vypočítán molární tok CO_2 na začátku experimentu po ustálení toku:

$$\dot{n}_{\mathrm{CO_2}} = \frac{\dot{V} \cdot \Delta\varphi_0 \cdot \rho_{\mathrm{sm.,in}}}{M_{\mathrm{CO_2}}} = \frac{171{,}4 \cdot 2{,}477 \cdot 10^{-4} \cdot 1{,}187}{44{,}01} = 1{,}145 \cdot 10^{-3}\ \mathrm{kmol\ hod^{-1}} \tag{2.13}$$

kde $\Delta\varphi_0$ rozdíl objemových zlomků CO_2 naměřených na vstupu a výstupu ve fázi ustalování toku, tedy množství absorbovaného CO_2 před přívodem kontaminantu.

IR sonda na měření obsahu CO_2 měří v jednotce ppm, která udává objemový zlomek plynu. Aby bylo možné vyhodnotit účinnost systému, je tedy třeba přepočítat průtok kontaminujícího plynu na vstupu a výstupu na normované podmínky.

Objemový průtok CO_2 na vstupu byl vypočítán z objemového průtoku vzdušiny vypočítaného dle výpočtu (2.8):

$$\dot{V}_{\mathrm{CO_2,in}} = \dot{V} \cdot \varphi_{\mathrm{in}} = 171{,}4 \cdot 5\,409 \cdot 10^{-6} = 0{,}927\,2\ \mathrm{m^3hod^{-1}}, \tag{2.14}$$

který je poté možné přepočítat na normovaný objemový průtok:

$$\dot{V}_{N\mathrm{CO_2,in}} = \dot{V}_{\mathrm{CO_2,in}} \frac{p}{T} \cdot \frac{273{,}15}{101\,325} = 0{,}927\,2 \cdot \frac{100\,779}{23{,}34 + 273{,}15} \cdot \frac{273{,}15}{101\,325} = 0{,}849\,6\ N\mathrm{m^3hod^{-1}}, \tag{2.15}$$

kde jednotka $N\mathrm{m^3hod^{-1}}$ znamená normované $\mathrm{m^3hod^{-1}}$, tedy takový objem, jaký by zaujímal plyn při normálních podmínkách, tj. 273,15 K a 101 325 Pa.

Protože hmotnostní průtok zůstává přibližně konstantní byl objemový průtok vzdušiny na výstupu $\dot{V}_{\mathrm{out}}$ vypočítán z hmotnostního průtoku a hustoty vzdušiny při pracovních podmínkách na výstupu.

$$\rho_{\mathrm{vzd.,out}} = \frac{M_{\mathrm{vzd.}} p}{\mathrm{R}T} = \frac{28{,}96 \cdot 10^{-3} \cdot 100\,603}{8{,}314 \cdot (21{,}32 + 273{,}15)} = 1{,}190\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \tag{2.16}$$

$$\rho_{\mathrm{CO_2,out}} = \frac{44{,}01 \cdot 10^{-3} \cdot 100\,603}{8{,}314 \cdot (21{,}32 + 273{,}15)} = 1{,}808\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \tag{2.17}$$

$$\rho_{\mathrm{sm.,out}} = \varphi \cdot \rho_{\mathrm{CO_2}} + (1 - \varphi)\, \rho_{\mathrm{vzd.}} = 3\,066 \cdot 10^{-6} \cdot 1{,}808 + \left(1 - 3\,066 \cdot 10^{-6}\right) \cdot 1{,}190$$

$$\rho_{\mathrm{sm.,out}} = 1{,}192\ \mathrm{kg\ m^{-3}} \tag{2.18}$$

$$\dot{V}_{\mathrm{out}} = \frac{\dot{m}}{\rho} = \frac{203{,}5}{1{,}192} = 170{,}73\ \mathrm{m^3hod^{-1}} \tag{2.19}$$

Objemový průtok CO_2 na výstupu je potom:

$$\dot{V}_{\mathrm{CO_2,out}} = \dot{V}_{\mathrm{out}} \cdot \varphi = 170{,}73 \cdot 3\,066 \cdot 10^{-6} = 0{,}523\,5\ \mathrm{m^3hod^{-1}} \tag{2.20}$$

Přepočet na normovaný průtok má potom tvar:

$$\dot{V}_{N\mathrm{CO_2,out}} = \dot{V}_{\mathrm{CO_2,in}} \frac{p}{T} \cdot \frac{273{,}15}{101\,325} = 0{,}523\,5 \cdot \frac{100\,603}{21{,}32 + 273{,}15} \cdot \frac{273{,}15}{101\,325} = 0{,}482\,1\ N\mathrm{m^3hod^{-1}} \tag{2.21}$$

Z vypočítaných normovaných průtoků lze potom vypočítat účinnost vypírky CO_2 do roztoku NaOH:

$$\xi = 1 - \frac{\dot{V}_{N\mathrm{CO_2,out}}}{\dot{V}_{N\mathrm{CO_2,in}}} = \left(1 - \frac{0{,}482\,1}{0{,}849\,6}\right) \cdot 100 = 43{,}3\ \% \tag{2.22}$$

2.3.2 Výpočty charakterizující chemickou absorpci

Výpočet koncentrace zkrápěcího roztoku

Zkrápěcí medium bylo připraveno vždy smícháním 84 m^3 pitné vody a 1,3 m^3 50 hm. % roztoku NaOH. Molekulová hmotnost hydroxidu sodného je 39,997 g mol^{-1}, hustota je 1,525 kg dm^{-3} [26].

$$\begin{aligned} w_i =& \frac{m_1 \cdot w_{i1}}{m_1 + m_2} = \frac{\rho \cdot V_1 \cdot w_{i1}}{\rho \cdot V_1 + m_2} \\ w_i =& \frac{1{,}3 \cdot 1{,}525 \cdot 0{,}5}{1{,}3 \cdot 1{,}525 + 84} = 0{,}0115 = 1{,}15\ \% \\ C_{\mathrm{A}\ell} =& \frac{w_i \cdot \rho_{\mathrm{NaOH}}}{M_{\mathrm{NaOH}} \cdot 100} = \frac{1{,}15 \cdot 1010{,}51}{39{,}997 \cdot 100} = 0{,}2905\ \mathrm{kmol\ m^{-3}} \end{aligned} \tag{2.23}$$

Výpočet iontové síly roztoku

Roztok NaOH o koncentraci 0,290 5 mol dm^{-3} byl nejdříve po dobu 5 minut čerpán systémem bez přídavku kontaminujícího plynu kvůli ustálení toku. Během této fáze experimentu byl měřen obsah CO_2 na vstupu i výstupu, lze tedy zjistit jaké množství OH^- zreagovalo na CO_3^{2-} před přídavkem kontaminantu. Koncentrace CO_3^{2-} byla vypočítána na základě molárního toku CO_2 zjištěného v rovnici (2.13). Za 5 minut se absorbovalo toto množství CO_2:

$$n = \frac{5\dot{n}}{60} = \frac{5 \cdot 1{,}145 \cdot 10^{-3}}{60} = 9{,}542 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{kmol} = 9{,}542 \cdot 10^{-2}\ \mathrm{mol}, \tag{2.24}$$

reakce je ekvimolární, a tak koncentrace CO_3^{2-} na počátku experimentu bude:

$$C_{\mathrm{CO_3^{2-}}} = \frac{n}{V} = \frac{9{,}542 \cdot 10^{-2}}{85} = 1{,}123 \cdot 10^{-3}\ \mathrm{mol\ m^{-3}}. \tag{2.25}$$

Při pH$\gg$8, což bylo dodrženo při každém experimentu, jsou veškeré ionty HCO_3^- přeměněny ihned na CO_3^{2-}, což je patrné i ze závislosti na obr. 1.5. Iontová síla se potom vypočítá tímto způsobem:

$$\begin{aligned} I =& \frac{1}{2}\left(C_{\mathrm{Na^+}} Z_{\mathrm{Na^+}}^2 + C_{\mathrm{OH^-}} Z_{\mathrm{OH^-}}^2 + C_{\mathrm{CO_3^{2-}}} Z_{\mathrm{CO_3^{2-}}}^2\right) \\ I =& \frac{1}{2}\left(0{,}2905 \cdot 1^2 + \left(0{,}290\,5 - 1{,}123 \cdot 10^{-3}\right) \cdot 1^2 + 1{,}123 \cdot 10^{-3} \cdot 2^2\right) \\ I =& 0{,}292\,2\ \mathrm{mol\ m^{-3}} \end{aligned} \tag{2.26}$$

Výpočet rychlostní konstanty reakce

Rychlostní konstantu lze vypočítat ze semiempirického vztahu (Pohorecki a Moniuk). Nejdříve byla vypočítána rychlostní konstanta při nekonečném zředění [27]:

$$k_2^\infty = 10^{\left(-\frac{2\,382}{T} + 11{,}90\right)} = 10^{\left(-\frac{2\,382}{19{,}64 + 273{,}15} + 11{,}90\right)} = 5\,814\ \mathrm{m^3 kmol^{-1} s^{-1}}, \tag{2.27}$$

z toho lze dále vypočítat rychlostní konstantu dopředné reakce:

$$k_2 = k_2^\infty \cdot 10^{\left(0{,}221 I - 0{,}016 I^2\right)} = 5\,814 \cdot 10^{\left(0{,}221 \cdot 0{,}292\,2 - 0{,}016 \cdot 0{,}292\,2^2\right)} = 6\,724{,}9\ \mathrm{m^3 kmol^{-1} s^{-1}}. \tag{2.28}$$

Odhad difuzivity kontaminujícího plynu v absorpčním roztoku

Difuzitu je vhodné vypočítat ze poloempirického vztahu (1.20). Pro výpočet difuzivity je v první řadě nutná znalost viskozity vody při teplotě absorpčního roztoku:

$$\begin{aligned}\eta =& 3{,}297 \cdot 10^{-11} t^4 - 9{,}194 \cdot 10^{-9} t^3 + 9{,}965 \cdot 10^{-7} t^2 - 5{,}566 \cdot 10^{-5} t + 1{,}787 \cdot 10^{-3} \\ \eta =& 3{,}297 \cdot 10^{-11} 19{,}64^4 - 9{,}194 \cdot 10^{-9} 19{,}64^3 + 9{,}965 \cdot 10^{-7} 19{,}64^2 - 5{,}566 \cdot 10^{-5} 19{,}64 + \\ &+ 1{,}787 \cdot 10^{-3} \\ \eta =& 1{,}013 \cdot 10^{-3} \text{ Pa s} \end{aligned} \tag{2.29}$$

kde polynom pro výpočet viskozity vody v závislosti na teplotě v rovnici (2.29) byl sestaven z tabelovaných hodnot [8].

Pro výpočet difuzivity je nutné znát molární objem rozpuštěného plynu ($V_{\mathrm{mCO_2}} = 34{,}0 \text{ m}^3\text{mol}^{-1}$), molekulovou hmotnost vody ($M_{\mathrm{H_2O}}$=18,02 g mol^{-1}) a asociační parametr rozpouštědla, který je pro vodu dle Danckwertse ψ_{B}=2,6 [7, 28].

Na základě výše zjištěných hodnot je možné vypočítat difuzivitu CO_2 ve vodě:

$$\begin{aligned} D^W_{\mathrm{CO_2}} =& 5{,}879 \cdot 10^{-17}\, T \frac{(\psi_{\mathrm{B}}\, M_{\mathrm{B}})^{0,5}}{\eta_{\mathrm{B}}\, V_{\mathrm{mA}}^{0,6}} \\ D^W_{\mathrm{CO_2}} =& 5{,}879 \cdot 10^{-17}\ (19{,}64 + 273{,}15)\, \frac{(2{,}6 \cdot 18{,}02)^{0,5}}{1{,}013 \cdot 10^{-3} \cdot 34{,}0^{0,6}} \\ D^W_{\mathrm{CO_2}} =& 2{,}261 \cdot 10^{-11} \end{aligned} \tag{2.30}$$

Difuzivitu oxidu uhličitého v roztoku elektrolytu lze odvodit metodou Ratcliff a Holdcroft na základě empirického vztahu:

$$D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} = D^W_{\mathrm{CO_2}} \left(1 + 0{,}624 \sum b_I C_{\mathrm{A}\ell}\right), \tag{2.31}$$

kde b_I je konstanta pro jednotlivý iont v roztoku (hodnoty vybraných iontů jsou uvedeny v tab. A.1), $D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}$ je difuzivita CO_2 v roztoku elektrolytu a $D^W_{\mathrm{CO_2}}$ je difuzivita CO_2 ve vodě. Vzhledem k tomu, že konstanty b_I jsou v jednotce m^{3}kmol^{-1}, je nutné dosadit koncentraci difundující složky v kapalině $C_{\mathrm{A}\ell}$ ve stejné jednotce [29].

Výpočet $D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}$ má tedy tvar:

$$\begin{aligned} D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} =& D^W_{\mathrm{CO_2}} \left(1 + 0{,}624 \sum b_I C_{\mathrm{A}\ell}\right) \\ D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} =& 2{,}261 \cdot 10^{-11} \left[1 + 0{,}624 \left(-0{,}085\,7 \cdot 0{,}290\,5 - 0{,}108\,8 \cdot 0{,}290\,5 - 0{,}115\,0 \cdot 0{,}290\,5 - \right.\right. \\ &\left.\left. -0{,}245\,0 \cdot 0{,}290\,5\right)\right] \end{aligned} \tag{2.32}$$

$$D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} = 2{,}034 \cdot 10^{-11} \tag{2.33}$$

Výpočet velikosti kapek rozstřikované kapaliny

Pro výpočet času kontaktu fází je evidentně třeba zjistit nejprve velikost kapek atomizované kapaliny. V průběhu této práce nebylo možné změřit distribuci velikostí kapek kapaliny v proudu vzdušiny, proto byla tato hodnota vypočítána na základě parametrů uvedených výrobcem spirálové trysky.

Výrobce trysky definuje rozměr kapek jako poměr jejich objemu a povrchu pomocí Sauterova poloměru d_{32}, který je definován vztahem:

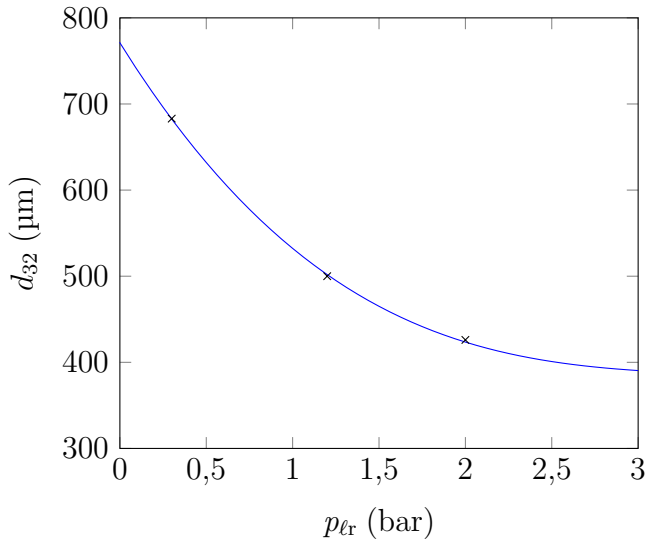
$$d_{32} = \frac{{d_v}^3}{{d_s}^2}, \tag{2.34}$$

kde d_v je objemový průměr a d_s je povrchový průměr, tyto lze vypočítat dle vztahu:

$$d_s = \sqrt{\frac{A}{\pi}}, \quad d_v = \sqrt[3]{\frac{6V}{\pi}}, \tag{2.35}$$

kde A je povrch kapky a V je objem kapky z definice objemu a povrchu koule, z toho vyplývá, že pro kulovité kapky je Sauterův poloměr roven poloměru koule.

$$\begin{gathered} V = \frac{1}{6}\pi d^3, \quad A = \pi d^2 \\ d_s = \sqrt{\frac{\pi d^2}{\pi}}, \quad d_v = \sqrt[3]{\frac{\pi d^3}{\pi}} \\ d_{32} = \frac{d^3}{d^2} \end{gathered} \tag{2.36}$$



Obr. 2.11: Znázornění polynomu pro výpočet Sauterova poloměru (2.37)

Na základě závislosti Sauterova poloměru na tlaku udávané výrobcem spirálové trysky byl sestaven polynom závislosti (graficky znázorněný na obr. 2.11), ze kterého lze odhadnout velikost kapek rozstřikované kapaliny pro libovolný tlak [15]:

$$d_{32} = -9{,}050\,8 \cdot {p_{\ell r}}^3 + 92{,}147 \cdot {p_{\ell r}}^2 - 321{,}87 \cdot p_{\ell r} + 771{,}07 \tag{2.37}$$

kde $p_{\ell r}$ je reálný tlak na trysce, tedy tlak v kapalině korigovaný o tlakovou ztrátu potrubí $\Delta p_{\text{ztr.}}$. Velikost kapek rozstřikované kapaliny při tlaku 2,83 bar je:

$$d_{32} = -9{,}050\,8 \cdot 2{,}83^3 + 92{,}147 \cdot 2{,}83^2 - 321{,}87 \cdot 2{,}83 + 771{,}07 = 393{,}05\ \mu\text{m} \tag{2.38}$$

Výpočet času kontaktu fází

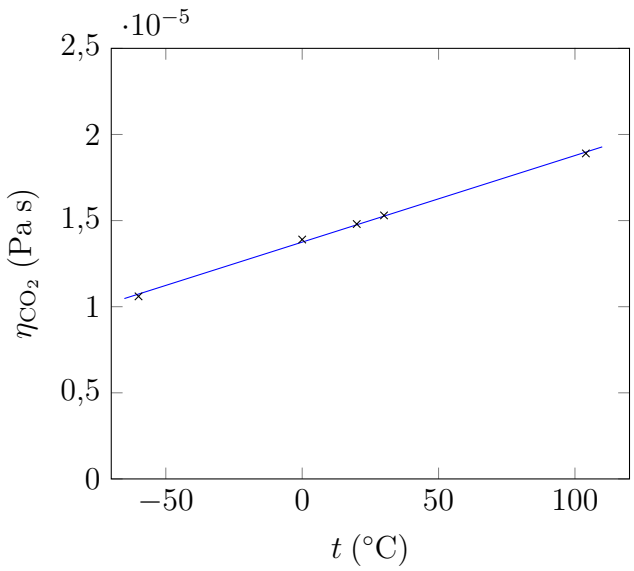
Pro zjištění času kontaktu rozstřikované kapaliny byl uvažován kulovitý tvar kapek o velikosti 393,04 µm. Pro zjednodušení bylo uvažováno, že veškerý prostor rozstřiku je vyplněn těmito kapkami. Jelikož při absorpci hraje klíčovou roli mezifázové rozhraní, nevnáší tento předpoklad příliš velkou chybu. Doba kontaktu fází byla vypočítána na základě zjištění

rychlosti pádu kapky vzduchem. Při znalosti vzdálenosti trysky a první překážky, na kterou dopadají kapky, lze z rychlosti pádu kapek odhadnout přibližný čas kontaktu fází.

Pro výpočet rychlosti usazování kapek je nutné zjistit v první řadě viskozitu vzdušiny, k tomuto účelu byla na základě tabelovaných hodnot sestavena regrese závislosti viskozity CO_2 na teplotě [26]:

$$\eta_{CO_2} = 5{,}027 \cdot 10^{-8} t + 1{,}375 \cdot 10^{-5} \tag{2.39}$$

jejíž tvar je graficky znázorněn na obr. 2.12.



Obr. 2.12: Znázornění závislosti viskozity CO_2 na teplotě (2.39)

Viskozita CO_2 je tedy:

$$\eta_{CO_2} = 5{,}027 \cdot 10^{-8} \cdot 23{,}34 + 1{,}375 \cdot 10^{-5} = 1{,}492 \cdot 10^{-5}\ \text{Pa s} \tag{2.40}$$

Viskozita vzduchu byla zjištěna stejným způsobem z regrese sestavené z tabulkových hodnot [8]:

$$\begin{aligned} \eta_{\text{vzd.}} &= 4{,}96 \cdot 10^{-8} t_{\text{vzd.}} + 1{,}721 \cdot 10^{-5} \\ \eta_{\text{vzd.}} &= 4{,}96 \cdot 10^{-8} \cdot 23{,}34 + 1{,}721 \cdot 10^{-5} \\ \eta_{\text{vzd.}} &= 1{,}837 \cdot 10^{-5}\ \text{Pa s} \end{aligned} \tag{2.41}$$

Viskozita vzdušiny se potom vypočítá ze směšovacího pravidla:

$$\begin{aligned} \eta_{\text{sm.}} &= \eta_{CO_2} \varphi + \eta_{\text{vzd.}} (1 - \varphi) \\ \eta_{\text{sm.}} &= 1{,}492 \cdot 10^{-5} \cdot 5\,409 \cdot 10^{-6} + 1{,}837 \cdot 10^{-5} \left(1 - 5\,409 \cdot 10^{-6}\right) \\ \eta_{\text{sm.}} &= 1{,}835 \cdot 10^{-5}\ \text{Pa s} \end{aligned} \tag{2.42}$$

Nyní je možné vypočítat Archimedovo kriterium pro posouzení jestli pád kapek vzdušinou je laminární, turbulentní nebo přechodný.

$$\begin{aligned} Ar =& \frac{d^3 \cdot (\rho - \rho_{\text{sm.}})\, \rho_{\text{sm.}} g}{\eta^2} \\ Ar =& \frac{(393{,}05 \cdot 10^{-6})^3 \cdot (1\,010{,}51 - 1{,}187) \cdot 1{,}187 \cdot 9{,}81}{(1{,}835 \cdot 10^{-5})^2} \\ Ar =& 2\,119{,}4 \end{aligned} \tag{2.43}$$

Archimedovo číslo je zde, stejně jako ve všech ostatních experimentech, větší než 3,6 a současně menší než 84 000, z toho plyne že charakter pádu kapky vzdušinou je přechodný mezi turbulentním a laminárním, mezi Archimedovým a Reynoldsovým číslem platí vztah:

$$\begin{aligned} Re^{0,7} &= \left(\frac{Ar}{13{,}9}\right)^{0,5} \\ Re &= \left(\frac{Ar}{13{,}9}\right)^{\frac{0,5}{0,7}} \\ Re &= \left(\frac{2\,119{,}4}{13{,}9}\right)^{\frac{0,5}{0,7}} \\ Re &= 36{,}26 \end{aligned} \tag{2.44}$$

na základě kterého lze vypočítat rychlost pádu kapky:

$$\begin{aligned} V_\mathrm{S} =& \frac{Re \cdot \eta}{d \cdot \rho} \\ V_\mathrm{S} =& \frac{36{,}26 \cdot 1{,}835 \cdot 10^{-5}}{393{,}05 \cdot 10^{-6} \cdot 1{,}187} \\ V_\mathrm{S} =& 1{,}426\ \mathrm{m\ s^{-1}} \end{aligned} \tag{2.45}$$

Z rychlosti lze již snadno na základě znalosti výšky zkrápěcí hlavy vypočítat přibližný čas kontaktu fází:

$$\tau = \frac{h}{V_\mathrm{S}} = \frac{0{,}43}{1{,}426} = 0{,}301\ 5\ \mathrm{s} \tag{2.46}$$

Výpočet koeficientu přestupu hmoty v kapalné fázi

Pro výpočet koeficientu přestupu hmoty v kapalné fázi $k_{\ell C}$ dle vztahů uvedených výše (*kapitola 1.1.5*) je nutné znát koncentraci absorbované složky na mezifázovém rozhraní, což není prakticky zjistitelná hodnota. Dalším způsobem je výpočet koeficientu přestupu pomocí Sherwoodova kriteria dle (1.46), pro tento postup je však nutné znát plochu mezifázového rozhraní. Pro určení plochy rozhraní by byly nutné matematické simulace, kterými se tato práce v rámci rozsahu nezaobírá [4].

Výpočet $k_{\ell C}$ byl proveden na základě Higbieho modelu, platí tedy:

$$k_{\ell C} = 2 \cdot \sqrt{\frac{D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}}{\pi\tau}} = 2 \cdot \sqrt{\frac{2{,}034 \cdot 10^{-11}}{\pi \cdot 0{,}301\ 5}} = 9{,}268 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{m\ s^{-1}} \tag{2.47}$$

kde τ je čas kontaktu fází a $D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}$ je difuzivita kontaminantu v elektrolytu [4].

Výpočet difuzivity NaOH v roztoku

Difuzivita iontů elektrolytu je různá, díky tomu vzniká nepatrný potenciálový gradient, který zpomaluje rychleji difundující ionty a urychluje pomalu difundující ionty. Výsledkem je stejná difuzivita obou iontů. Pro výpočet celkové difuzivity je třeba znát difuzivitu každého iontu a také jejich pohyblivost. Difuzivita jednotlivých iontů se vypočítá ze vztahu:

$$D^{+} = \frac{\mathrm{R}Tu^{+}}{F}, \quad D^{-} = \frac{\mathrm{R}Tu^{-}}{F}, \tag{2.48}$$

kde D^+ a D^- jsou difuzivity kladných a záporných iontů ($\mathrm{m^2s^{-1}}$), u^+ a u^- jsou pohyblivosti kladných a záporných iontů ($\mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$) a F je Faradayova konstanta ($\mathrm{C\,mol^{-1}}$).

Celková difuzivita elektrolytu se poté vypočítá ze vztahu:

$$D^{\pm} = \frac{2D^+D^-}{D^+ + D^-}\left(1 + \frac{\mathrm{d}\ln\gamma_{\pm}}{\mathrm{d}\ln C}\right) \tag{2.49}$$

kde C je koncentrace elektrolytu, a $\gamma_{\pm}$ je střední iontový aktivitní koeficient. V případě ideálního chování roztoku lze považovat termodynamický člen ($\mathrm{d}\ln\gamma_{\pm}/\mathrm{d}\ln C$) roven nule. Spojením rovnic (2.48) a (2.49) lze potom získat následující vztah:

$$D^{\pm} = \frac{2\mathrm{R}T}{F}\frac{u^+u^-}{u^+ + u^-} \tag{2.50}$$

Pohyblivost iontu $\mathrm{Na^+}$ je $51{,}9 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$, pohyblivost iontu $\mathrm{OH^-}$ je $205{,}5 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$ a Faradayova konstanta je $96\,485{,}34\ \mathrm{C\,mol^{-1}}$, výpočet celkové difuzivity má potom tvar:

$$D^{\pm} = \frac{2 \cdot 8{,}314 \cdot (19{,}64 + 273{,}15)}{96\,485{,}34} \cdot \frac{51{,}9 \cdot 10^{-9} \cdot 205{,}5 \cdot 10^{-9}}{51{,}9 \cdot 10^{-9} + 205{,}5 \cdot 10^{-9}} = 2{,}091 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m^2s^{-1}} \tag{2.51}$$

Výpočet Hattova kritéria

Pro zjištění zda reakce běží druhým, pseudoprvním, nebo prvním řádem je nutný výpočet parametru $\sqrt{M'}$, které odpovídá Hattovu kritériu ze vztahu (1.79):

$$\begin{aligned}
M' =& \frac{D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} k_2 C_{\mathrm{B}\ell}}{k_{\ell C}{}^2} \\
Ha =& \frac{\sqrt{D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}} k_2 C_{\mathrm{B}\ell}}}{k_{\ell C}} \\
Ha =& \frac{\sqrt{2{,}034 \cdot 10^{-11} \cdot 6\,724{,}9 \cdot 10^{-3} \cdot 0{,}290\,5 \cdot 10^3}}{9{,}268 \cdot 10^{-6}} \\
Ha =& 21{,}51
\end{aligned} \tag{2.52}$$

Výpočet rozpustnosti oxidu uhličitého v absorpčním roztoku

Rozpustnost plynu definovatelnou jako obrácenou hodnotu Henryho konstanty v kapalině nelze měřit, proto je nutné ji odhadnout. K tomuto účelu lze využít vztah mezi Henryho konstantou v roztoku H_C a ve vodě H_{C0} dle Krevelena a Hoftijzera (1.68), platí tedy [7]:

$$H_C = H_{C0} \cdot 10^{h_{\mathrm{f}} I}, \tag{2.53}$$

kde h_{f} je definován rovnicí (1.69), I je iontová síla roztoku. Vzhledem k tomu, že příspěvek plynu k rozpouštěcímu faktoru h_{g} je závislý na teplotě, byly údaje z tab. 1.3 proloženy matematickým modelem, aby bylo možné vypočítat h_{g} a také h_{f} pro libovolnou teplotu. Matematický model (A.1) je graficky znázorněn na obr. A.1. Výpočet h_{g} má podobu:

$$\begin{aligned}
h_{\mathrm{g}}\left(\cdot 10^{-5}\right) =& 5{,}968 \cdot 10^{-7} \cdot 19{,}64^4 - 5{,}681 \cdot 10^{-6} \cdot 19{,}64^3 - 2{,}161 \cdot 10^{-3} \cdot 19{,}64^2 + \\
&+ 5{,}617 \cdot 10^{-3} \cdot 19{,}64 - 6{,}894 \cdot 10^{-1} \\
h_{\mathrm{g}} =& -1{,}367 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{m^3mol^{-1}}
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Na základě dat v tab. 1.3 má výpočet celkového rozpustnostního faktoru h_f následující tvar:

$$\begin{aligned} h_\mathrm{f} =& h^+ + h^- + h_\mathrm{g} \\ h_\mathrm{f} =& (9{,}1 + 6{,}6 + 2{,}1 - 1{,}367) \cdot 10^{-5} = 1{,}643 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{m^3 mol^{-1}} \end{aligned} \tag{2.55}$$

Henryho konstanta ve vodě při teplotě experimentu byla vypočítána ze vztahu (1.60):

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\ln H_C =& -\frac{\Delta_\mathrm{rozp} h}{\mathrm{R}T^2}\mathrm{d}T \\ \int_{H_{C0}^*}^{H_{C0}} \mathrm{d}\ln H_C =& -\frac{\Delta_\mathrm{rozp} h}{\mathrm{R}} \int_{T^*}^{T} T^2 \mathrm{d}T \\ \ln H_{C0} - \ln H_{C0}^* =& -\frac{\Delta_\mathrm{rozp} h}{\mathrm{R}} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*}\right) \\ \ln H_{C0} =& \ln H_{C0}^* - \frac{\Delta_\mathrm{rozp} h}{\mathrm{R}} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*}\right) \\ H_{C0} =& H_{C0}^* \cdot \hat{e}\left[-\frac{\Delta_\mathrm{rozp} h}{\mathrm{R}} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*}\right)\right] \end{aligned} \tag{2.56}$$

za předpokladu, že rozpustnost, neboli převrácená Henryho konstanta CO_2 ve vodě je při 20 °C (T^* je tedy 298,15 K) $H_{C0}^* = 38{,}5 \cdot 10^{-5}\ \mathrm{mol\,m^{-3}Pa^{-1}}$ a rozpouštěcí entalpie $\Delta_\mathrm{rozp} h$ je 2 200 J $\mathrm{mol^{-1}Pa^{-1}}$, má výpočet H_C tvar [7, 15]:

$$H_{C0} = \frac{1}{38{,}5 \cdot 10^{-5}} \hat{e}\left[-\frac{2\,200}{8{,}314}\left(\frac{1}{19{,}64 + 273{,}15} - \frac{1}{293{,}15}\right)\right] = 2\,594{,}5\ \mathrm{Pa\ m^3 mol^{-1}} \tag{2.57}$$

Henryho konstantu v použitém roztoku NaOH se vypočítá dle (1.68):

$$\begin{aligned} H_C{}^{\odot} =& H_{C0} \cdot 10^{h_\mathrm{f} I} \\ H_C{}^{\odot} =& 2\,594{,}5 \cdot 10^{-1{,}643 \cdot 10^{-4} \cdot 0{,}292\ 2} \\ H_C{}^{\odot} =& 2\,549{,}8\ \mathrm{Pa\ m^3 mol^{-1}} \end{aligned} \tag{2.58}$$

Výpočet molární koncentrace oxidu uhličitého na mezifázovém rozhraní

Pro zjištění koncentrace CO_2 na mezifázovém rozhraní je nutná znalost parciálního tlaku CO_2 na mezifázovém rozhraní, což nelze v tomto experimentu změřit. Přibližnou koncentraci na mezifázovém rozhraní lze vypočítat na základě modifikovaného Henryho zákona (1.59) a Daltonova zákona (celkový tlak v systému je dán součtem parciálních tlaků složek) platí tedy:

$$P_{\mathrm{CO_2}} = H_C \cdot C_{\mathrm{CO_2,f}} \tag{2.59}$$

kde H_C je Henryho konstanta, tedy $P_{\mathrm{CO_2}}$ je parciální tlak CO_2 a $C_{\mathrm{CO_2,f}}$ je potom přibližná koncentrace CO_2 na mezifázovém rozhraní.

Koncentrace $C_{\mathrm{CO_2,f}}$ je na základě výše zjištěné Henryho konstanty $H_C{}^{\odot}$:

$$\begin{aligned} C_{\mathrm{CO_2,f}} =& \frac{\varphi_{\mathrm{CO_2}} \cdot p_\mathrm{in}}{H_C{}^{\odot}} \\ C_{\mathrm{CO_2,f}} =& \frac{5\,409 \cdot 10^{-6} \cdot 100\,779}{2\,549{,}8} \\ C_{\mathrm{CO_2,f}} =& 0{,}210\ 1\ \mathrm{mol\ m^{-3}} \end{aligned} \tag{2.60}$$

Výpočet Reakčního faktoru okamžité reakce

Aby bylo možné zjistit reakční faktor reakce, je nejprve nutné zjistit reakční faktor okamžité reakce E_{ri}, ten se vypočítá ze vztahu (1.80):

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{ri}} =& \sqrt{\frac{D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}}{D^{\pm}}} + \frac{C_{\mathrm{B}\ell}}{\Gamma C_{\mathrm{CO_2,f}}} \cdot \sqrt{\frac{D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}}{D^{\pm}}} \\ E_{\mathrm{ri}} =& \sqrt{\frac{2{,}034 \cdot 10^{-11}}{2{,}091 \cdot 10^{-9}}} + \frac{0{,}290\,5 \cdot 10^{3}}{2 \cdot 0{,}210\,1} \cdot \sqrt{\frac{2{,}034 \cdot 10^{-11}}{2{,}091 \cdot 10^{-9}}} \\ E_{\mathrm{ri}} =& 68{,}28 \end{aligned} \tag{2.61}$$

kde Γ je počet molů reagující látky B, které reagují s každým molem látky A, pro reakci CO_2 s NaOH platí $\Gamma = 2$.

Vyhodnocení vlivu chemické reakce

Hattovo číslo bylo vypočítáno $Ha = 21{,}51$, zatímco reakční faktor okamžité reakce byl vypočítán $E_{\mathrm{ri}} = 68{,}28$. Podmínka $Ha \ll 1$ není splněna, znamená to tedy, že chemická reakce je natolik rychlá, že nelze její vliv zanedbat. Podmínka $Ha \ll E_{\mathrm{ri}}$ je defakto splněna, Hattovo číslo je menší než reakční faktor, ale ne výrazně. Znamená to tedy, že rekce běží podle pseudoprvního nebo prvního řádu. Reagující látka difunduje k povrchu dostatečně rychle a nedojde k jejímu vyčerpání vlivem chemické reakce. Vzhledem k tomu, že platí i bližší podmínka $Ha < \frac{1}{2}E_{\mathrm{ri}}$, souhlasí rychlost reakce s rovnicí prvního řádu s přesností přibližně 10 %.

2.4 Diskuze výsledků

V této kapitole budou probrány jednotlivé experimenty a prodiskutovány na základě naměřených a vypočítaných dat.

2.4.1 První část – vliv samostatných prvků

Uzavřené přepážky

Při tomto nastavení došlo k největším změnám hydraulických vlastností vůči plynné fázi, což je patrné především z rozdílu tlaku na vstupu a výstupu, aby byl dosažen požadovaný tlak na vstupu, musel frekvenční měnič nastavit vysoké otáčky ventilátoru a v důsledku toho byl na výstupní tlakové sondě naměřen vyšší podtlak až −2,0 mbar oproti −1,0 mbar při otevřených přepážkách.

Na základě vypočítaného normovaného objemového průtoku CO_2 na vstupu i výstupu, byla vypočítána průměrná účinnost vypírky na 41 ± 2 %, účinnost při všech přepážkách otevřených byla 40 ± 1 %. Je zřejmé, že účinnost se spíše snižuje, ale vzhledem k malému rozdílu, to lze považovat za chybu měření. Na základě tohoto zjištění je patrné, že kombinace všech tří přepážek uzavřených, není příliš vhodná pro zvýšení účinnosti procesu.

Horní přepážka

Při měření přestupu hmoty při uzavřené horní přepážce byla účinnost na základě normovaného průtoku zjištěna 40 ± 2 %, tato samotná přepážka tedy účinnost přestupu hmoty

nezvyšuje. Tlak na výstupu z kolony byl naměřen průměrně −1,01 mbar, oproti experimentu s otevřenými přepážkami −0,97 mbar. Je tedy zřejmé, že tato přepážka nezpůsobuje ani významnou tlakovou ztrátu.

Obvodová přepážka

Při experimentu s uzavřenou obvodovou přepážkou byla zjištěna účinnost 37 ± 1 %, tlak na výstupu byl průměrně −1,0 mbar. Účinnost tedy klesla přibližně o 3 % a tlaková ztráta systému zůstala zachována. Tato přepážka má tedy negativní vliv na přestup hmoty.

Uzavření obvodové clony pravděpodobně mění charakter toku ve zkrápěcí hlavě, ale tato změna ovlivňuje účinnost výměníku hmoty spíše negativně.

Spodní přepážka

Vliv spodní přepážky byl zjištěn pozitivní, naměřená účinnost byla 44 ± 1 % a průměrný tlak na výstupu −1,9 mbar. Vzrostla tedy tlaková ztráta, ale vzrostla zároveň účinnost prostupu hmoty. Přepážka je umístěna na úrovni trysky, jejím uzavřením se tedy mění tvar rozstřikované kapaliny, tvoří tak v horní části absorpčního prostoru hrdlo, kde dochází k těsnějšímu kontaktu fází. Tato přepážka tedy zvyšuje účinnost systému přibližně o 4 %, ale navzdory zvýšení nároku na ventilátor.

Výška zkrápěcí hlavy

Vysunutím zkrápěcí hlavy pravděpodobně dojde ke zvýšení doby kontaktu fází. Maximální poloha výšky trysky nad místem kolize kapek s podložkou je však pouze o 24 cm výše než minimální poloha. Při pracovních podmínkách byl vypočítán jen velmi malý rozdíl času kontaktu, ve spodní poloze byl čas průměrně 0,3 s, zatímco v horní 0,47 s. Rozdíl je tedy nepatrný.

Účinnost byla zjištěna 38 ± 1 % při tlaku na výstupu −1,0 mbar, došlo tedy ke snížení účinnosti přibližně o 2 % a hydraulické vlastnosti zůstaly zachovány. Rozdíl oproti experimentu s otevřenými přepážkami je přibližně 2 %, vzhledem k chybě měření obou experimentů lze tyto hodnoty považovat téměř za identické. Pro posouzení vlivu výšky kolony by bylo vhodné změřit účinnost při větším rozdílu výšky zkrápěcí hlavy, nebo takové uspořádání, kdy lze měnit i vzdálenost vstupu plynné fáze a trysky. Aparatura umožňuje další navýšení, ale přístroj byl nainstalován nevhodně pod osvětlením laboratoře, takže posun o více než 24 cm nebyl možný.

Posun deflegtoru

Při vysunutém deflegtoru byla naměřena účinnost přestupu 37 ± 2 % při tlaku na výstupu −1,0 mbar. Vysunutí deflegtoru tedy snižuje účinnost při zachování tlakové ztráty, změna charakteru proudění vlivem změny deflegtoru však není známa, je však pravděpodobné, že v zasunuté poloze je charakter proudění v koloně více tangenciální. Deflegtor v zasunuté poloze tak způsobuje více turbulentní proudění plynu, tím pádem intenzivnější promíchání na straně plynu, proto je tato poloha výhodnější.

Shrnutí – posouzení vlivu chemické reakce

Pro lepší srovnání byly veškeré zjištěné účinnosti při výše zmíněných experimentech seřazeny do tab. 2.3. Experiment s uzavřenými přepážkami je zařazen v části, kde jsou

Tab. 2.3: Přehled vlivu jednotlivých prvků na účinnost systému – srovnání s otevřenými překážkami

	Otevřené přepážky	**Horní přepážka**	**Obvodová přepážka**	**Spodní přepážka**	**Zvedlá hlava**	**Vysunutý deflegtor**
ξ (%)	40 ± 1	40 ± 2	37 ± 1	44 ± 1	38 ± 1	37 ± 2
Ha (−)	$21{,}5 \pm 0{,}3$	$21{,}6 \pm 0{,}1$	$21{,}8 \pm 0{,}4$	$21{,}9 \pm 0{,}3$	$27{,}0 \pm 0{,}4$	$21{,}9 \pm 0{,}1$
E_{ri} (−)	69 ± 2	72 ± 1	$72{,}4 \pm 0{,}3$	70 ± 2	$68{,}8 \pm 0{,}2$	70 ± 2

projednány kombinace regulačních prvků, tab. 2.3 obsahuje také Hattovo kriterium a reakční faktor okamžité reakce pro posouzení vlivu chemické reakce pro jednotlivé regulační prvky.

V předchozí kapitole byl posouzen vliv chemické reakce na experiment s uzavřenými přepážkami, pro který byly počítány ukázkové výpočty. Z tab. 2.3 je však patrné, že podmínka $Ha < \frac{1}{2}E_{\mathrm{ri}}$ platí pro všechny experimenty. Avšak změna výšky zkrápěcí hlavy má pravděpodobně malý vliv na chemickou reakci, Hattovo číslo se při tomto nastavení od ostatních nastavení neparně liší, může to však být jen chyba měření.

2.4.2 Druhá část

Teplotní závislost

V další části byl prověřen vliv teploty media v nádrži na účinnost systému. Voda z vodovodního řádu má teplotu dle nezámrzné hloubky země. V závislosti na ročním období se teplota vody pohybuje mezi 9 až 14 °C. Při měřeních bylo zjištěno, že blíží-li se teplota kapaliny teplotě laboratoře, uniká z kolony značné množství vlhkosti, což zkresluje měření IR sondy na výstupu. Výsledkem je potom nižší naměřená účinnost. Při vychlazení media na nízkou teplotu je sice chyba měření eliminována, ale energetická a časová náročnost experimentu je výrazně vyšší. Z toho důvodu byla proměřena závislost účinnosti na teplotě.

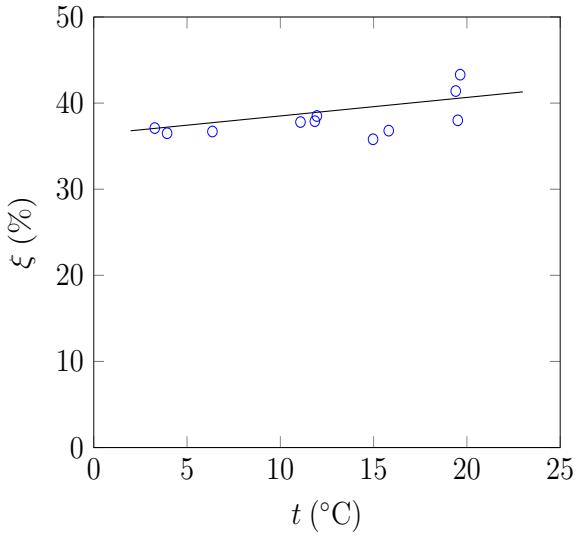
Vychlazení nádrže objemu 90 dm^3 trvá přibližně hodinu, proto by bylo výhodnější provádět experimenty při teplotě blízké teplotě vody ve vodovodním řádu.

Tab. 2.4: Účinnost, Hattovo kriterium a reakční faktor okamžité reakce v závislosti na teplotě absorpčního roztoku

t (°C)	ξ (%)	Ha (−)	E_{ri} (−)
6,36	36,7	13,81	55,77
3,27	37,1	12,38	51,59
3,93	36,5	12,68	52,53
11,96	38,5	16,75	66,29
11,08	37,8	16,25	61,11
11,85	37,9	16,68	61,76
15,06	37,6	18,55	67,27
15,81	36,8	19,01	67,46
14,97	35,8	18,50	69,03
19,64	43,3	21,51	68,28
19,40	41,4	21,35	74,74
19,51	38,0	21,42	77,34

Experiment byl proměřen při uzavřených přepážkách aby byla zaručena maximální možná separace kapek absorpčního media. Data a vypočítané hodnoty pro posouzení závislosti účinnosti a vlivu chemické reakce na teplotě byly seřazeny do tab. 2.4.

Z naměřených dat vyplývá, že účinnost vypočítaná na základě normovaného objemového průtoku CO_2 není výrazně závislá na teplotě. Regrese zobrazená na obr. 2.13 je stoupající, avšak je zřejmé že rozptyl naměřených hodnot při vyšších teplotách je značný. Chyba měření je pravděpodobně způsobena nekontrolovaným nárůstem vlhkosti v oblasti měřící IR sondy. Zvýšená vlhkost zkresluje měření tím, že snižuje účinnost. Bylo by vhodné změřit účinnost systému při vyšších teplotách, musel by však být použit na výstupu před IR sondou chladič pro kondenzaci par.



Obr. 2.13: Závislost účinnosti absorpce ξ na teplotě absorpčního media

Vzhledem k tomu, že většinu mezifázového rozhraní přes které probíhá prostup hmoty je tvořeno kapkami velikosti přibližně 400 µm, padající skrze proud vzdušiny o teplotě přibližně 21 až 24 °C (záleží na aktuální laboratorní teplotě), tak teplota kapalného media nebude mít velký vliv na účinnost přestupu hmoty. Mezi kapkami media a proudem vzdušiny probíhá intenzivní přestup tepla. Přestup tepla je prokazatelný na základě rozdílu teplot vzdušiny na vstupu a výstupu z kolony.

Když probíhaly v laboratoři stavební práce, klesla laboratorní teplota na cca 15 °C. Tento experiment byl měřen se zvednutou zkrápěcí hlavou, účinnost vypírky byla při teplotě vzduchu na vstupu 15 °C průměrně 42 ± 1 %, zatímco se stejným nastavením, ale při teplotě plynu 22 °C byla účinnost 38 ± 1 %. Je tedy zřejmé, že teplota plynu na vstupu má zásadnější vliv na přestup hmoty než teplota zkrápěcího media v nádrži. Bylo by vhodné využít tepelných výměníků v laboratoři a provést měření přestupu hmoty v závislosti na teplotě plynu na vstupu.

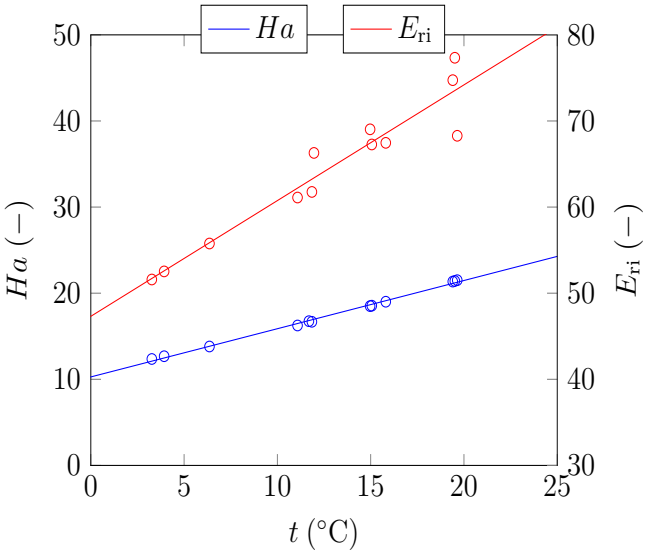
Tab. 2.5: Tabulka porovnávající teplotu vzdušiny na vstupu a výstupu při různých teplotách absorpčního media

	5 °C			**10 °C**			**15 °C**			**20 °C**		
t_ℓ	6,4	3,3	3,9	12,0	11,1	11,9	15,1	15,8	15,0	19,6	19,4	19,5
t_{in}	24,1	24,9	24,7	23,8	23,7	23,9	22,6	22,3	22,7	23,3	23,5	23,3
t_{out}	18,0	19,1	14,7	19,4	17,5	18,6	18,9	18,0	18,1	21,3	21,0	21,0

t_ℓ v tab. 2.5 je teplota absorpční kapaliny v nádrži, t_{in} je teplota vzdušiny na vstupu do kolony a t_{out} je teplota vzdušiny na výstupu z kolony.

Při teplotě absorpčního media 3,9 °C se směs plynů ochladila až o 10 °C. Značná část objemu kapaliny ihned po výstupu z trysky narazí do stěny kolony a poté volně stéká na dno, tato část kapaliny se vlivem kontaktu s plynnou fází příliš neohřívá, zatímco kapky, které mají delší volnou dráhu se budou ohřívat značně. Je tedy zcela evidentní, že teplotní zabarvení v průběhu přestupu hmoty ovlivňuje především plynná fáze.

Z tab. 2.4 je patrné, že podmínka $Ha < \frac{1}{2}E_{\text{ri}}$ platí vždy. Reakční faktor okamžité reakce i Hattovo číslo se se vzrůstající teplotou značně mění, ale charakter reakce je stále zachován. V teplotním rozsahu experimentu se chemická reakce vždy řídí rychlostní rovnicí prvního řádu. Difuze reaktantu k mezifázovému rozhraní je natolik rychlá, že se vlivem reakce nestačí spotřebovat.



Obr. 2.14: Závislost Hattova čísla a reakčního faktoru okamžité reakce na teplotě

Rozdíl mezi Hattovým kriteriem a reakčním faktorem s rostoucí teplotou narůstá, při vyšší teplotě se průběh reakce přibližuje pseudoprvnímu řádu.

Na základě výše zjištěných dat byly všechny experimenty dále prováděny při teplotě přibližně 15 °C. Tato teplota byla zvolena kvůli eliminaci snižování účinnosti vlivem vlhkosti a zároveň kvůli menší časové náročnosti chlazení media.

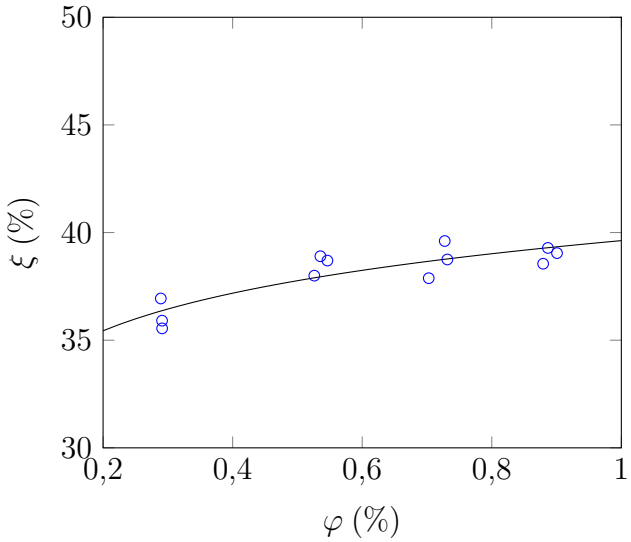
Závislost účinnosti na obsahu kontaminantu ve vzdušině

Při vysunuté hlavě byla proměřena závislost obsahu CO_2 ve vzdušině na vstupu do kolony. Průtok plynu z tlakové lahve byl nastaven tak, aby objemový zlomek odpovídal 0,3; 0,5; 0,7 a 0,9 obj. %. pro každý objemový zlomek byly provedeny celkem 3 experimenty. Výsledná závislost je zobrazena na obr. 2.15. Je tedy zřejmé, že při vyšším obsahu kontaminujícího plynu v čištěné vzdušině účinnost nepatrně stoupá. Z grafu je však patrné, že vzrůst regrese a rozptyl naměřených hodnot je srovnatelný. Bylo by vhodné proměřit i vyšší koncentrace, to však není s použitými přístroji možné, protože IR sondy měří v rozsahu 0 až 10 000 ppm, tedy 0 až 1 obj. %.

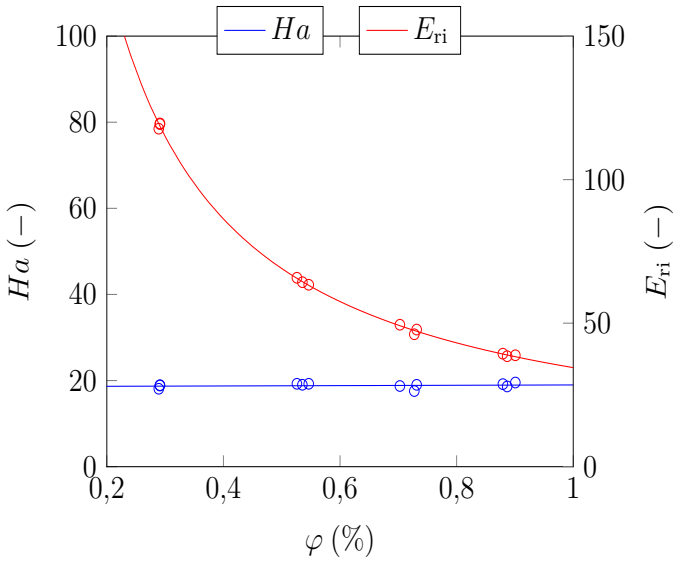
Při vyšším obsahu CO_2 roste parciální tlak CO_2 v systému, Hattovo číslo stejně tak reakční faktor okamžité rekce budou na koncentraci CO_2 závislé. Z grafu na obr. 2.16

lze vyčíst, že Hattovo číslo se vzrůstajícím obsahem CO_2 ve vzdušině nepatrně stoupá, zatímco reakční faktor okamžité reakce klesá.

Reakční faktor E_{ri} určuje o kolik vzroste rychlost absorpce účinkem chemické absorpce. Při nízkých koncentracích CO_2 je reakční faktor okamžité reakce vysoký (obr. 2.16) tedy vliv chemické reakce je vyšší. Se vzrůstající koncentrací oxidu uhličitého v čištěné vzdušině klesá vliv chemické reakce na rychlost absorpce [7].



Obr. 2.15: Závislost účinnosti procesu na objemovém zlomku CO_2 ve vzdušině



Obr. 2.16: Závislost Hattova čísla a reakčního faktoru okamžité reakce na objemovém zlomku CO_2

3 ZÁVĚR

Na poloprovozní pračce plynu s možností nastavení způsobu proudění vzdušiny bylo naměřeno celkem 45 experimentů pro posouzení vlivu těchto změn na účinnost prostupu hmoty. Cílem bylo najít takové nastavení prvků, aby účinnost byla co nejvyšší a energetická náročnost systému (otáčky čerpadla a ventilátoru) co nejnižší.

Nejprve byly proměřeny vlivy jednotlivých prvků samostatně. Vliv na přestup hmoty byl charakterizován účinností ξ (%) zjištěné na základě normovaného průtoku plynného CO_2 na vstupu a výstupu ze zkrápěného prostoru aparatury.

Bylo zjištěno, že největší vliv na účinnost procesu má kruhová clona, umístěná v bezprostřední blízkosti trysky. Zvýšení účinnosti probíhá díky vytvoření ústí na konci absorpčního prostoru, díky čemuž dochází v tomto místě k těsnějšímu kontaktu fází. Tato přepážka však značně ovlivňuje tlakovou ztrátu kolony, tudíž jsou kladeny vyšší nároky na podtlakový ventilátor.

Podobná clona je umístěna také těsně pod separátorem kapek, v tomto místě však nebyl zjištěn žádný pozitivní vliv přítomnosti clony. Hypoteticky však lze říci, že tato clona v uzavřené poloze zvyšuje účinnost separátoru kapek, zvyšuje však požadavky na podtlakový ventilátor.

Dále byl posouzen vliv obvodové clony, skládající se ze dvou identických otočných desek. Bylo zjištěno, že uzavření této clony nezvyšuje účinnost procesu. Bylo by tedy vhodné zvětšit otvory v deskách clony, tím by se snížila tlaková ztráta systému při zachování nebo zvýšení účinnosti.

Poloha deflegtoru se ukázala nejvýhodnější v maximální zasunuté poloze, při tomto nastavení je proudění v koloně pravděpodobně více turbulentní a účinnost je tak vyšší.

Nastavení výšky zkrápěcí hlavy bylo nutné vyzkoušet z důvodu plánované výměny zkrápěcí hlavy za jinou, vyšší a průhlednou, která rovněž umožňuje změnu vzdálenosti ústní plynné fáze a zkrápěcí trysky. Navýšení zkrápěcí hlavy se však projevilo spíše negativně. Vzhledem k větší výšce nové zkrápěcí hlavy byly experimenty v druhé části měřeny při vysunuté zkrápěcí hlavě. Součástí plánu experimentální části bylo testování nové hlavy, to však nebylo z časových důvodů možné, neboť experimentální práce byla zastavena z důvodu montážních prací v laboratoři.

V druhé části práce byl prověřen vliv teploty zkrápěcího roztoku a obsahu kontaminujícího plynu v proudu vzdušiny na účinnost systému.

Závislost účinnosti na teplotě je patrná z obr. 2.13. Účinnost při vyšší teplotě stoupá, ale je jasné, že stoupá i chyba měření. To je způsobeno tím, že při vyšší teplotě dochází k vyššímu únosu vlhkosti do místa, kde je nainstalovaná IR sonda citlivá na vlhkost. Stálo by za úvahu proměřit sadu experimentů s nižší teplotou vzdušiny na vstupu, proto by však musel být nainstalován výměník tepla na vstupu do kolony.

Z obr. 2.15 vyplývá, že při vyšším obsahu CO_2 ve vzdušině narůstá účinnost s mocninnou funkcí, avšak ne nijak významně. Stálo by za úvahu proměřit dále několik experimentů při vyšší koncentraci CO_2, např. až několik desítek obj. %. Problém je však omezený rozsah měření IR sond použitých při experimentu.

Z experimentální práce vyplývá, že nejvhodnějším nastavením celého přístroje je uzavřená clona v blízkosti spirálové trysky. Při tomto nastavení bylo dosaženo maximální účinnosti a to 44,4 %. Všechny vypočítané data včetně mezivýpočtů, stejně tak naměřené data jsou uvedeny v přílohách (*kapitola A.2*).

LITERATURA

[1] Kaku, M. *Fyzika budoucnosti.* Vyd. 1. vydání. Praha: Argo, 2013. ISBN 978-80-7363-523-7.

[2] Kjótský protokol k Rámcové úmluvě OSN o změně klimatu 1998.
Dostupné z:
`http://mzp.cz/cz/kjotsky_protokol`

[3] Míka, V., Neužil, L. *Chemické inženýrství II.* Vyd. 2. vydání. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická, 1997. ISBN 80-708-0200-4.

[4] Perry, R. H. *Perry's chemical Engineer's Handbook.* 7.vyd. vydání. New York: McGraw-Hill, 1998. ISBN 0-07-115982-7.

[5] DOJČANSKÝ, L. J., J. *Chemické Inžinierstvo II.* První vydání. Malé centrum, 2000. 392 s. ISBN 80-967064-8-9.

[6] Šatava, V. *Fyzikální chemie silikátů II.* první vydání. Praha: VŠCHT, 1987. .

[7] DANCKWERTS, P. *Reakce v soustavě plyn – kapalina.* 1. vydání. SNTL – nakladatelství technické literatury, 1975. .

[8] Svěrák, T., Richter, J.: Studijní materiály k Chemickému inženýrství 2016 nepublikované.

[9] Čech, V.: Studijní materiály k předmětu Tenké vrstvy 2018 nepublikované.

[10] NOVÁK, J. *Fyzikální chemie II.* První vydání. Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 2001. 316 s. ISBN 80-7080-436-X.

[11] Hrudková, A., Markvart, J. *Nealkoholické nápoje.* První vydání. Praha: SNTL, 1989. ISBN 04-808-89.

[12] ŠIMÁNEK, J. *Čištění plynu II.*. Druhé přepracované a doplněné vydání. VŠCHT Praha, 1989. 116 s. ISBN 80-7080-033-X.

[13] Heymes, F., Demoustier, P. M., Charbit, F., Fanlo, J., Moulin, P. Recovery of toluene from high temperature boiling absorbents by pervaporation. *Journal of Membrane Science.* 2006-11-01, ročník vol. 284, 1-2, str. 145–154 ISSN 03767388 doi:10.1016/j.memsci.2006.07.029.
Dostupné z:
`http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376738806004777`

[14] Wang, W., Ma, X., Grimes, S., Cai, H., Zhang, M. Study on the absorbability, regeneration characteristics and thermal stability of ionic liquids for VOCs removal. *Chemical Engineering Journal.* 2017, ročník 328, Supplement C, str. 353 – 359 ISSN 1385-8947 doi:https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.06.178.
Dostupné z:
`http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894717311300`

[15] Kalivoda, J. *Odstraňování plynných polutantů ze vzdušnin na poloprovozní pračce.* Brno: , 2017. Dizertační práce. Vysoké učení technické Brno, Fakulta chemická.

[16] Hu, G., Nicholas, N. J., Smith, K. H., Mumford, K. A., Kentish, S. E., Stevens, G. W. Carbon dioxide absorption into promoted potassium carbonate solutions: A review. *International Journal of Greenhouse Gas Control*. 2016, ročník 53, str. 28 – 40 ISSN 1750-5836 doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2016.07.020.
Dostupné z:
`//www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1750583616303838`

[17] Surampalli, R. Y. *Carbon capture and storage*. První vydání. Virginia: American Society of Civil Engineers, 2015. ISBN 978-0-7844-1367-8.

[18] DANCKWERTS, P.: {A1} - Kinetics of the Absorption of Carbon Dioxide in Water. In: *Insights Into Chemical Engineering*, editace DANCKWERTS, P. str. 5 – Amsterdam: Pergamon 1981 ISBN 978-0-08-026250-5 doi:http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-08-026250-5.50008-3.
Dostupné z:
`http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780080262505500083`

[19] Spiral Nozzle for Scrubber 2017.
Dostupné z:
`https://www.lorric.com/en/Products/Nozzles/SPP`

[20] Spraying nozzle 2017.
Dostupné z:
`http://www.directindustry.com/prod/bete/product-7149-568730.html`

[21] Visual Encyclopedia of Chemical Engineering 2018.
Dostupné z:
`http://encyclopedia.che.engin.umich.edu/Pages/SeparationsChemical/Absorbers/Absorbers.html`

[22] Lin, C.-C., Chu, C.-R. Feasibility of carbon dioxide absorption by NaOH solution in a rotating packed bed with blade packings. *International Journal of Greenhouse Gas Control*. 2015, ročník 42, str. 117 – 123 ISSN 1750-5836 doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2015.07.035.
Dostupné z:
`//www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1750583615300438`

[23] Sung, W.-D., Chen, Y.-S. Characteristics of a rotating packed bed equipped with blade packings and baffles. *Separation and Purification Technology*. 2012, ročník 93, str. 52 – 58 ISSN 1383-5866 doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2012.03.033.
Dostupné z:
`//www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1383586612001906`

[24] E-tabulky 2016.
Dostupné z:
`http://uchi.vscht.cz/uploads/etabulky/drsnost.html`

[25] Caustic Soda Solution 2011.
Dostupné z:
`https://www.vinnolit.com/vproducts.nsf/allPages/50AB7B8678A88129C12573B1004E7AC1/\protect\T1\textdollarfile/Produktdatenblatt%20NaOH50-en_02.02.2011.pdf?open`

[26] Vohlídal, J. *Chemické a analytické tabulky.* první vydání. Praha: Grada, 1999. ISBN 978-80-7169-855-5.

[27] Pohorecki, R., Moniuk, W. Kinetics of reaction between carbon dioxide and hydroxyl ions in aqueous electrolyte solutions. *Chemical Engineering Science.* 1988, ročník 43, 7, str. 1677 – 1684 ISSN 0009-2509 doi:https://doi.org/10.1016/0009-2509(88)85159-5.
Dostupné z:
`http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0009250988851595`

[28] Periodická soustava prvků 2017.
Dostupné z:
`http://web.vscht.cz/~nadhernl/psp.html`

[29] Krauß, M., Rzehak, R. Reactive absorption of CO2 in NaOH: An Euler-Euler simulation study. *Chemical Engineering Science.* 2018, ISSN 0009-2509 doi:https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.01.009.
Dostupné z:
`http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250918300095`

SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

Seznam fyzikálních veličin

A	plocha povrchu	m^2
a	specifický povrch	m^{-1}
b_I	konstanta pro výpočat difuzivity plynu v elektrolytu	$m^3 kmol^{-1}$
C	molární koncentrace	$mol\ m^{-3}$
C_A	molární koncentrace difundující složky A	$mol\ m^{-3}$
C_{A1}	molární koncentrace difundující složky A na začátku difúze	$mol\ m^{-3}$
C_{A2}	molární koncentrace difundující složky A na konci difúze	$mol\ m^{-3}$
C_{Af}	molární koncentrace difundující složky A na mezifázovém rozhraní	$mol\ m^{-3}$
C_{Ag}	molární koncentrace difundující složky A v plynné fázi	$mol\ m^{-3}$
$C_{A\ell}$	molární koncentrace difundující složky A v jádru kapalné fáze	$mol\ dm^{-3}$
$C_{B\ell}$	molární koncentrace difundující složky B v jádru kapalné fáze	$mol\ m^{-3}$
C_B	molární koncentrace indiferentní složky B	$mol\ m^{-3}$
C_{Bls}	střední logaritmická molární koncentrace indiferentní složky B	$mol\ m^{-3}$
$C_{CO_2,f}$	molární koncentrace oxidu uhličitého na mezifázovém rozhraní	$mol\ m^{-3}$
d	charakteristický rozměr	m
D^+	difuzivita kladných iontů	$m^2 s^{-1}$
D^-	difuzivita záporných iontů	$m^2 s^{-1}$
$D^\pm$	difuzivita elektrolytu	$m^2 s^{-1}$
d_{32}	Sauterův průměr	µm
D_{AB}	vzájemná difuzivita složky A a B	$m^2 s^{-1}$
D_A	difuzivita složky A	$m^2 s^{-1}$
D_g	difuzivita složky A v plynné fázi	$m^2 s^{-1}$
D_B	difuzivita složky B	$m^2 s^{-1}$
$D^\pm_{CO_2}$	difuzivita CO_2 v roztoku elektrolytu	$m^2 s^{-1}$
$D^W_{CO_2}$	difuzivita CO_2 ve vodě	$m^2 s^{-1}$
D_ℓ	difuzivita složky A v kapalné fázi	$m^2 s^{-1}$
d_s	povrchový průměr	µm
d_v	objemový průměr	µm
E_r	reakční faktor, vyjadřující vliv chemické reakce na absorpci	–
E_{ri}	reakční faktor, když je reakce okamžitá, nebo je rychlost reakce řízena jen difúzí	–
F	Faradayova konstanta	$C\ mol^{-1}$
f	počet fází	–
g	gravitační zrychlení	$m \cdot s^{-2}$
H	Henryho konstanta	Pa

h	výška	m
h^+	příspěvek kladných iontů v rozpustnostním faktoru roztoku	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$
h^-	příspěvek záporných iontů v rozpustnostním faktoru roztoku	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$
H_C	Henryho konstanta	$\mathrm{Pa\ m^3mol^{-1}}$
h_f	rozpouštěcí faktor roztoku (suma příspěvků iontů a plynu)	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$
h_g	příspěvek plynu v rozpustnostním faktoru roztoku	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$
$\Delta_\mathrm{rozp}h$	molární rozpouštěcí entalpie	$\mathrm{J\ mol^{-1}Pa^{-1}}$
I	iontová síla roztoku	$\mathrm{mol\ m^{-3}}$
J_A	ustálená rychlost molárního toku látky A	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
J	hustota toku hmoty	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
$J_{\mathrm{A}x}$	rychlost molárního toku látky A ve směru osy x	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
k_1	rychlostní konstanta dopředné chemické reakce prvního řádu	$\mathrm{s^{-1}}$
k_2^∞	rychlostní konstanta dopředné chemické reakce druhého řádu při nekonečném zředění	$\mathrm{m^3kmol^{-1}s^{-1}}$
k_2	rychlostní konstanta dopředné chemické reakce druhého řádu	$\mathrm{m^3kmol^{-1}s^{-1}}$
K_A1	disociační konstanta prvního stupně	–
K_A2	disociační konstanta druhého stupně	–
K_C	koeficient prostupu hmoty, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem koncentrací difundující složky	$\mathrm{m\ s^{-1}}$
$k_{\mathrm{g}P}$	koeficient přestupu hmoty v plynné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem parciálních tlaků	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}Pa^{-1}}$
$k_{\mathrm{g}Y'}$	koeficient přestupu hmoty v plynné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem relativních hmotnostních zlomků	$\mathrm{kg\ m^{-2}s^{-1}}$
$k_{\mathrm{g}Y}$	koeficient přestupu hmoty v plynné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem relativních molárních zlomků	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
$k_{\mathrm{g}y}$	koeficient přestupu hmoty v plynné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem molárních zlomků	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
$k_{\ell C}$	koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem koncentrací	$\mathrm{m\ s^{-1}}$
$k_{\ell X'}$	koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem relativních hmotnostních zlomků	$\mathrm{kg\ m^{-2}s^{-1}}$
$k_{\ell X}$	koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem relativních molárních zlomků	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
$k_{\ell x}$	koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem molárních zlomků	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}}$
K_P	koeficient prostupu hmoty, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem parciálních tlaků difundující složky	$\mathrm{mol\ m^{-2}s^{-1}Pa^{-1}}$
M'	bezrozměrná veličina, pro reakci druhého řádu, platí $M' = \frac{1}{4}\pi C_{\mathrm{B}\ell} \cdot \tau$	–

M	molární hmotnost	$\mathrm{g\,mol^{-1}}$
$\dot{m}$	hmotnostní průtok	$\mathrm{kg^3hod^{-1}}$
m	hmotnost	kg
$\dot{m}_\mathrm{A}$	hmotnostní tok složky A	$\mathrm{kg\,s^{-1}}$
$\dot{n}$	tok látkového množství	$\mathrm{kmol\,hod^{-1}}$
n	látkové množství	mol
$\dot{n}_\mathrm{A}$	tok látkového množství složky A	$\mathrm{mol\,s^{-1}}$
$\dot{n}_\mathrm{Ad}$	difúzní tok látkového množství složky A	$\mathrm{mol\,s^{-1}}$
$\dot{n}_\mathrm{Ak}$	konvektivní tok látkového množství složky A	$\mathrm{mol\,s^{-1}}$
$\dot{n}_\mathrm{B}$	tok látkového množství složky B	$\mathrm{mol\,s^{-1}}$
p	tlak	Pa
P_A	parciální tlak složky A	Pa
P_A^*	parciální tlak čisté složky A	Pa
P_A1	parciální tlak složky A na začátku difúze	Pa
P_A2	parciální tlak složky A na konci difúze	Pa
P_Af	parciální tlak složky A na mezifázovém rozhraní	Pa
P_Ag	parciální tlak složky A v jádru plynné fáze	Pa
$P_\mathrm{A\ell}$	parciální tlak složky A v kapalné fázi	Pa
$p_\mathrm{\ell r}$	tlak kapaliny korigovaný o tlakovou ztrátu	Pa
P_B	parciální tlak složky B	Pa
P_Bls	střední logaritmická hodnota parciálního tlaku indiferentní složky B	Pa
$P_\mathrm{CO_2}$	parciální tlak oxidu uhličitého	Pa
$p_\mathrm{\ell tr.}$	naměřený tlak kapaliny na trysce	Pa
l	délka	m
$l_\mathrm{ekv.}$	ekvivalentní délka potrubí	m
$\Delta p_\mathrm{ztr.}$	ztráta tlaku třením	Pa
R	univerzální plynová konstanta	$\mathrm{J\,mol^{-1}K^{-1}}$
$\dot{R}_\mathrm{A}$	rychlost tvorby látkového množství látky A v elementárním objemu chemickou reakcí	$\mathrm{mol\,m^{-3}s^{-1}}$
r_A	rychlost reakce látky A v jednotce objemu	$\mathrm{mol\,m^{-3}s^{-1}}$
S	plocha průřezu	$\mathrm{m^2}$
s	počet složek soustavy	–
T	termodynamická teplota	K
t	teplota	°C
t_ℓ	teplota absorpční kapaliny v nádrži	°C
u^+	pohyblivost kladných iontů	$\mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$
u^-	pohyblivost záporných iontů	$\mathrm{m^2V^{-1}s^{-1}}$
$\dot{V}$	objemový průtok	$\mathrm{m^3hod^{-1}}$
V	objem	$\mathrm{m^3}$
v_b	měrný objem	$\mathrm{m^3kg^{-1}}$
$\dot{V}_\ell$	objemový průtok kapalné fáze	$\mathrm{m^3hod^{-1}}$
V_m	molární objem	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$
$\dot{V}_N$	objemový průtok	$N\mathrm{m^3hod^{-1}}$
V_S	rychlost usazování kapek rozstřikované kapaliny	$\mathrm{m\,s^{-1}}$
w	rychlost proudění	$\mathrm{m\,s^{-1}}$
w_i	složení i-té složky – hmotnostní zlomek	–

X'_{A}	relativní hmotnostní zlomek složky A v kapalné fázi	–
X_{A}	relativní molární zlomek složky A v kapalné fázi	–
x_{A}	molární zlomek složky A v kapalné fázi	–
Y'_{A}	relativní hmotnostní zlomek složky A v plynné fázi	–
Y_{A}	relativní molární zlomek složky A v plynné fázi	–
y_{A}	molární zlomek složky A v plynné fázi	–
Z	mocenství iontu	–
z_{g}	difúzí překonaná vzdálenost v plynné fázi	m
z_{gd}	tloušťka difúzního filmu v plynné fázi	m
z_{ℓ}	difúzí překonaná vzdálenost v kapalné fázi	m
$z_{\ell\mathrm{d}}$	tloušťka difúzního filmu v kapalné fázi	m

Seznam bezrozměrných kritérií

Ar	Archimedovo kritérium	–
Ha	Hattovo kritérium	–
Re	Reynoldsovo kriterium	–
Sc	Schmidtovo kritérium	–
Sh	Sherwoodovo kritérium	–

Seznam symbolů řecké abecedy

α	úhel	°
α'	Ostwaldův absorpční součinitel	–
Γ	počet molů reagující látky B, které reagují s každým molem látky A	–
ε_D	turbulentní difuzivita	–
$\bar{\varepsilon}_D$	integrální střední turbulentní difuzivita	–
ε	absolutní drsnost potrubí	mm
φ	objemový zlomek	–
$\gamma_{\pm}$	střední iontový aktivitní koeficient	–
η	dynamická viskozita	Pa s
Λ	soubor nezávisle proměnných termodynamických veličin	–
Λ°	soubor nezávisle proměnných termodynamických veličin v homogenním stavu	–
λ_{t}	součinitel tření potrubí	–
π	řád reakce vzhledem k produktu	–
ρ	hustota	kg m^{-3}
θ	charakteristický rozměr náplně	m
τ	čas	s
υ	počet stupňů volnosti	–
ξ	účinnost absorpce	%
ψ_{B}	bezrozměrný asociační parametr rozpouštědla – látky B	–

Seznam vektorů

$\boldsymbol{A}$	vektor plochy	m^2

$\boldsymbol{i}$	jednotkový vektor ortogonálního souřadnicového systému	–
$\boldsymbol{j}$	jednotkový vektor ortogonálního souřadnicového systému	–
$\boldsymbol{J}_{\mathrm{A}}$	vektor intenzity difúzního toku látkového množství látky A	$\mathrm{mol\,m^{-2}s^{-1}}$
$\boldsymbol{J}$	vektor intenzity difúzního toku	$\mathrm{mol\,m^{-2}s^{-1}}$
$\boldsymbol{k}$	jednotkový vektor ortogonálního souřadnicového systému	–
$\boldsymbol{v}$	vektor lokální rychlosti proudění	$\mathrm{m\,s^{-1}}$
$\bar{\boldsymbol{\phi}}_{\mathrm{A}}$	vektor celkové okamžité intenzity toku	$\mathrm{m\,s^{-1}}$

Seznam matematických operátorů

∂	Symbol parciální derivace	–
d	diferenciál	–
Δ	Laplaceův „delta“ operátor, $\nabla \cdot \nabla = \nabla^2 \equiv \Delta$	$\mathrm{m^{-1}}$
∇	Hamiltonův „nabla“ operátor	$\mathrm{m^{-2}}$

Seznam matematických symbolů

x	prostorová souřadnice osy x kartézského souřadnicového systému	m
y	prostorová souřadnice osy y kartézského souřadnicového systému	m
z	prostorová souřadnice osy z kartézského souřadnicového systému	m

Označení

$\odot$	označení roztoku	–
g	označení plynné fáze	–
in	označení veličiny na vstupu do systému	–
ℓ	označení kapalné fáze	–
out	označení veličiny na výstupu ze systému	–
f	označení mezifázového rozhraní	–
s	označení pevné fáze	–
sm.	označení veličiny platné pro směs plynů (vzdušinu)	–
vzd.	označení veličiny platné pro čistý vzduch	–

Seznam textových zkratek

DEA	dietanolamin
MDEA	metyldietanolamin
MEA	monoetanolamin
VOC	Voltatile organic compounds – těkavé organické sloučeniny

SEZNAM OBRÁZKŮ

1.1 Závislost P_A a C_A na vzdálenosti od mezifázového rozhraní při přestupu látky A z plynné do kapalné fáze . . . 9
1.2 Grafické znázornění hnacích sil přestupu látky v izotermicko-izobarickém diagramu . . . 12
1.3 Grafické znázornění Henryho a Raoultova zákona . . . 15
1.4 Zobrazení vlivu změny teploty na rovnovážnou křivku za předpokladu $t_2 > t_1$ 16
1.5 Rovnováha oxidu uhličitého ve vodě . . . 18
1.6 Struktura 1-butyl-3-metylimidazolium bis-(trifluorometylsulfonyl)imidu . . 20
1.7 Koncentrační profily při reakci druhého řádu . . . 21
1.8 Závislost reakčního faktoru na $\sqrt{M'}$ pro reakci druhého řádu [15] . . . 23
1.9 Nákres povrchového absorbéru s chladící kapalinou . . . 26
1.10 Schema proudění plynu a kapaliny v deskovém (kaskádovém) výměníku hmoty . . . 27
1.11 Schema spirálové trysky a clony tryskou tvořené . . . 28
1.12 Druhy náplně kolon . . . 29
1.13 Nákres probublávajícího absorbéru s mícháním kapalné fáze . . . 30
1.14 Absorbér s rotační čepelovou loží . . . 31
2.1 Zjednodušený nákres zařízení . . . 33
2.2 Potrubí spirálové trysky . . . 34
2.3 Schema potrubí kontaminujícího plynu . . . 35
2.4 Snímky clony pod tryskou . . . 36
2.5 Snímky obvodové clony . . . 36
2.6 Snímky vrchní clony . . . 36
2.7 Snímek deflegtoru ve vysunuté poloze . . . 37
2.8 Schema tlakového potrubí . . . 40
2.9 Závislost viskozity 1% roztoku NaOH na teplotě [25] . . . 41
2.10 Závislost hustoty 1% roztoku NaOH na teplotě [25] . . . 42
2.11 Znázornění polynomu pro výpočet Sauterova poloměru (2.37) . . . 47
2.12 Znázornění závislosti viskozity CO_2 na teplotě (2.39) . . . 48
2.13 Závislost účinnosti absorpce ξ na teplotě absorpčního media . . . 55
2.14 Závislost Hattova čísla a reakčního faktoru okamžité reakce na teplotě . . . 56
2.15 Závislost účinnosti procesu na objemovém zlomku CO_2 ve vzdušině . . . 57
2.16 Závislost Hattova čísla a reakčního faktoru okamžité reakce na objemovém zlomku CO_2 . . . 57
A.1 Teplotní závislost h_g . . . 77

SEZNAM TABULEK

1.1 Ostwaldův absorpční součinitel a Henryho konstanta vybraných plynů . . . 15
1.2 Vztahy mezi jednotlivými koeficienty přestupu k (vztahy platí i pro koeficienty prostupu K) . . . 17
1.3 Rozpustnostní faktory (h^+, h^- a h_g) některých chemických ekvivalentů . . 18
2.1 Použité měřicí čidla v aparatuře . . . 37
2.2 Tabelované hodnoty potřebné pro výpočet tlakové ztráty [8, 24] . . . 41
2.3 Přehled vlivu jednotlivých prvků na účinnost systému – srovnání s otevřenými překážkami . . . 54
2.4 Účinnost, Hattovo kriterium a reakční faktor okamžité reakce v závislosti na teplotě absorpčního roztoku . . . 54
2.5 Tabulka porovnávající teplotu vzdušiny na vstupu a výstupu při různých teplotách absorpčního media . . . 55
A.1 Paramatry pro výpočet difuzivity plynu v roztoku elektrolytu metodou Ratcliff a Holdcroft [29] . . . 77
A.2 Hodnoty příspěvků k rozpustnostnímu faktoru h_g pro oxid uhličitý . . . 77
A.3 Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů . . . 78
A.4 Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů . . . 79
A.5 Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí . . . 80
A.6 Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů . . . 81
A.7 Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů . . . 82
A.8 Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí . . . 83
A.9 Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů . . . 84
A.10 Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů . . . 84
A.11 Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí . . . 85

SEZNAM PŘÍLOH

A Přílohy **77**
A.1 Tabelované hodnoty 77
A.1.1 Výpočet difuzivity 77
A.1.2 Hodnoty příspěvku plynu k rozpustnostnímu faktoru 77
A.2 Experimentální data 78
A.2.1 První část 78
A.2.2 Teplotní závislost 81
A.2.3 Závislost na obsahu kontaminantu 84

A PŘÍLOHY

A.1 Tabelované hodnoty

A.1.1 Výpočet difuzivity

Tab. A.1: Paramatry pro výpočet difuzivity plynu v roztoku elektrolytu metodou Ratcliff a Holdcroft [29]

Iont	b_I(m^{3}kmol^{-1})
Na^+	-0,085 7
OH^-	-0,108 8
HCO_3^-	-0,115 0
CO_3^{2-}	-0,245 0

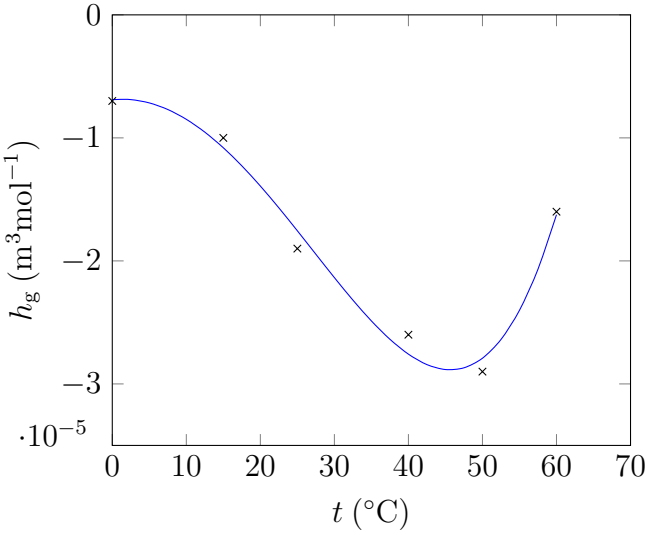
A.1.2 Hodnoty příspěvku plynu k rozpustnostnímu faktoru

Tab. A.2: Hodnoty příspěvků k rozpustnostnímu faktoru h_g pro oxid uhličitý

t (°C)	0	15	25	40	50	60
$h_g \cdot 10^{-5}$ (m^{3}mol^{-1})	-0,7	-1,0	-1,9	-2,6	-2,9	-1,6

Závislosti příspěvku plynu h_g nejlépe z matematického hlediska odpovídal polynom 4. stupně uvedený na obr. A.1.

$$h_g\left(\cdot 10^{-5}\right) = 5{,}968\cdot 10^{-7}t^4 - 5{,}681\cdot 10^{-6}t^3 - 2{,}161\cdot 10^{-3}t^2 + 5{,}617\cdot 10^{-3}t - 6{,}894\cdot 10^{-1} \quad \text{(A.1)}$$



Obr. A.1: Teplotní závislost h_g

A.2 Experimentální data

A.2.1 První část

Data externích měřicích přístrojů

Naměřené data z IR sondy na vstupu a výstupu stejně tak z externího anemometru byly měřeny každou minutu, hodnoty celého experimentu byly zprůměrovány a seřazeny do tab. A.3.

Tab. A.3: Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů

	φ_{in0}	φ_{out0}	φ_{in}	φ_{out}	w (m s^{-1})
Otevřené přepážky	717,8	444,5	5 295	3 279	5,43
	606,3	363,2	5 541	3 319	5,49
	687,0	400,7	5 190	3 027	5,39
Uzavřené přepážky	571,8	324,1	5 409	3 066	5,50
	659,5	385,5	4 924	2 878	5,45
	715,8	443,0	4 767	2 951	5,47
Horní přepážka	735,0	425,3	5 245	3 035	5,42
	749,8	454,8	5 179	3 142	5,40
	729,3	448,8	5 104	3 142	5,44
Obvodová přepážka	499,2	310,9	5 097	3 175	5,39
	513,8	328,7	5 010	3 205	5,36
	573,3	359,4	5 035	3 157	5,43
Spodní přepážka	629,8	342,7	5 087	2 768	5,34
	797,5	448,5	5 236	2 944	5,38
	724,8	405,7	5 443	3 047	5,42
Vysunutá hlava	761,8	465,6	5 262	3 216	5,36
	582,8	353,4	5 369	3 256	5,40
	524,5	329,6	5 363	3 370	5,34
Vysunutý deflegtor	638,0	392,3	5 484	3 372	5,41
	1010	643,0	5 297	3 371	5,47
	955,8	624,1	5 197	3 394	5,47

Kde φ_{in0} je průměrná pozaďová hodnota obsahu CO_2 ve vzduchu bez kontaminace v jednotce ppm, φ_{out0} je průměrná naměřená hodnota CO_2 na výstupu v první fázi experimentu, kdy nebyl otevřen ventil kontaminujícího plynu. φ_{in} a φ_{out} s jednotkou ppm jsou potom průměrné naměřené hodnoty obsahu CO_2 na vstupu a výstupu v druhé fázi experimentu, po otevření ventilu s kontaminujícím plynem.

Data interních měřicích přístrojů

Jednotka zaznamenávače dat Siemens Logo zaznamenává v průběhu experimentu hodnoty interních měřicích prvků každých 5 s. Průměrné hodnoty tlaku, teploty a průtoku byly vždy zprůměrovány a vloženy do tab. A.4.

Tab. A.4: Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů

	$p_{\ell\text{tr.}}$ (bar)	t_ℓ °C	$p_{\text{vzd.in}}$ (mbar)	$p_{\text{vzd.out}}$ (mbar)	$p_{\text{lab.}}$ (Pa)	$t_{\text{vzd.in}}$ °C	$t_{\text{vzd.out}}$ °C	$\dot{V}_\ell$ (l min^{-1})
Otevřené přepážky	2,83	18,98	−0,21	−0,97	100 800	23,45	20,50	112,99
	2,83	20,07	−0,21	−0,98	100 800	23,27	21,45	112,91
	2,83	19,80	−0,21	−0,97	100 900	23,48	20,92	112,85
Uzavřené přepážky	2,83	19,64	−0,21	−1,97	100 800	23,34	21,32	113,15
	2,83	19,40	−0,21	−1,90	100 800	23,46	21,01	112,90
	2,83	19,51	−0,21	−1,98	100 800	23,30	20,98	112,94
Horní přepážka	2,83	19,66	−0,21	−1,00	100 900	23,77	21,04	112,76
	2,83	19,83	−0,21	−1,00	100 900	23,89	21,10	112,68
	2,83	19,95	−0,21	−1,01	100 900	23,88	21,29	112,70
Obvodová přepážka	2,83	20,76	−0,21	−1,00	102 500	22,51	21,44	112,60
	2,83	19,64	−0,21	−1,00	102 500	22,75	20,56	112,59
	2,83	19,49	−0,21	−1,01	102 500	23,15	20,70	112,85
Spodní přepážka	2,83	19,97	−0,21	−1,83	102 500	22,96	21,00	112,55
	2,83	20,75	−0,21	−1,83	102 500	23,03	21,57	112,93
	2,83	19,69	−0,21	−1,89	102 500	23,75	21,41	112,71
Zvedlá hlava	2,83	19,19	−0,21	−0,98	101 900	23,84	21,17	112,78
	2,83	20,21	−0,21	−0,99	101 800	21,93	20,97	112,80
	2,83	19,94	−0,21	−0,98	101 800	21,44	20,69	112,69
Deflegtor	2,83	19,93	−0,21	−0,99	101 000	22,90	20,94	112,82
	2,83	20,36	−0,21	−0,99	101 000	23,90	21,60	112,80
	2,83	20,15	−0,21	−0,99	101 000	23,65	21,30	112,84

Kde $p_{\ell\text{tr.}}$ je naměřený tlak kapaliny na trysce, t_ℓ je teplota absorpčního media naměřená v zásobní nádrži, $p_{\text{vzd.in}}$ je tlak vzdušiny na vstupu do systému, $p_{\text{vzd.out}}$ je tlak vzdušiny na výstupu, $p_{\text{lab.}}$ je atmosferický tlak naměřený v laboratoři, $t_{\text{vzd.in}}$, $t_{\text{vzd.out}}$ je teplota vzdušiny na vstupu a výstupu a $\dot{V}_\ell$ je objemový průtok kapalné fáze.

Vypočítané data

Vypočítané hodnoty, které charakterizují proces absorpce, podle postupu uvedeného v kapitole Vyhodnocení experimentálních dat (*kapitola 2.3*) byly seřazeny do tab. A.5.

Tab. A.5: Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí

	Otevřené přepážky	Uzavřené přepážky	Horní přepážka	Obvodová přepážka	Spodní přepážka	Vysunutá hlava	Deflegtor
$\Delta p_{\text{ztr.}}$ (bar)	0,186 0	0,186 3	0,185 0	0,184 3	0,184 4	0,185 3	0,185 2
	0,185 5	0,185 6	0,184 8	0,184 6	0,185 3	0,185 0	0,185 0
	0,185 3	0,185 8	0,184 8	0,185 5	0,184 9	0,184 8	0,185 2
$I\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right)$	0,292 4	0,292 2	0,292 6	0,291 8	0,292 4	0,292 6	0,292 1
	0,292 2	0,292 4	0,292 5	0,291 7	0,292 9	0,292 1	0,293 0
	0,292 4	0,292 3	0,292 4	0,292 1	0,292 7	0,291 8	0,292 7
$k_2\left(\frac{\text{m}^3}{\text{kmol}^3\text{s}^3}\right)$	6 446,8	6 724,9	6 734,3	7 220,9	6 869,0	6 535,3	6 850,6
	6 912,3	6 622,6	6 808,0	6 723,3	7 220,1	6 974,4	7 043,4
	6 795,0	6 669,7	6 859,7	6 659,8	6 748,5	6 854,3	6 949,8
$D^{\pm}_{\text{CO}_2}\cdot 10^{11}\left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}^{-1}}\right)$	1,996	2,034	2,036	2,101	2,054	2,008	2,052
	2,061	2,020	2,047	2,036	2,101	2,068	2,078
	2,045	2,027	2,054	2,026	2,038	2,052	2,066
d_{32} (µm)	393,05	393,05	393,05	393,05	393,06	393,05	393,05
	393,05	393,05	393,05	393,05	393,06	393,05	393,06
	393,06	393,05	393,05	393,06	393,05	393,05	393,05
τ (s)	0,301 5	0,301 5	0,301 5	0,303 0	0,303 0	0,471 2	0,301 8
	0,301 3	0,301 5	0,301 5	0,302 8	0,303 0	0,470 8	0,301 8
	0,301 5	0,301 5	0,301 5	0,303 0	0,303 0	0,470 8	0,301 8
$k_{\ell C}\cdot 10^6\left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)$	9,181	9,268	9,273	9,396	9,290	7,366	9,304
	9,332	9,236	9,298	9,253	9,396	7,478	9,363
	9,293	9,252	9,313	9,227	9,254	7,449	9,336
$D^{\pm}\cdot 10^9\left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)$	2,086	2,091	2,091	2,099	2,093	2,088	2,093
	2,094	2,089	2,092	2,091	2,099	2,095	2,096
	2,092	2,090	2,093	2,090	2,091	2,093	2,094
Ha (−)	21,06	21,51	21,52	22,34	21,79	26,51	21,72
	21,80	21,35	21,64	21,55	22,34	27,37	22,02
	21,62	21,42	21,72	21,46	21,60	27,14	21,88
$H_C^{\ominus}\left(\frac{\text{Pa m}^3}{\text{mol}}\right)$	2 589,5	2 594,8	2 595,0	2 603,8	2 597,5	2 591,2	2 597,1
	2 598,3	2 592,9	2 596,3	2 594,8	2 603,7	2 599,4	2 600,6
	2 596,1	2 593,8	2 597,3	2 593,6	2 595,2	2 597,2	2 598,9
$C_{\text{CO}_2,\text{f}}\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^{-3}}\right)$	0,206 1	0,210 1	0,203 9	0,200 6	0,200 7	0,206 9	0,213 2
	0,214 9	0,191 4	0,201 2	0,197 9	0,206 1	0,210 2	0,205 7
	0,201 7	0,185 2	0,198 3	0,199 0	0,214 9	0,210 2	0,201 9
E_{ri} (−)	69,06	68,28	70,41	72,53	71,8	68,96	67,55
	67,15	74,74	71,51	72,54	70,62	68,75	70,42
	71,32	77,34	72,68	71,99	66,83	68,54	71,55

Kde $\Delta p_{\text{ztr.}}$ je ztráta tlaku třením v kapalné fázi, I je iontová síla roztoku, k_2 je rychlostní konstanta dopředné chemické reakce druhého řádu, $D^{\pm}_{\text{CO}_2}$ je difuzivita CO_2 v roztoku elektrolytu, d_{32} je Sauterův průměr kapek rozstřikované kapaliny, τ je čas kontaktu fází, $k_{\ell C}$ je koeficient přestupu hmoty v kapalné fázi, kde hnací síla je vyjádřena rozdílem

koncentrací, $D^{\pm}$ je difuzivita elektrolytu, Ha je Hattovo kritérium, $H_C{}^{\odot}$ je rozpustnost CO_2 v roztoku vyjádřená pomocí Henryho konstanty, $C_{CO_2,\mathrm{f}}$ je molární koncentrace oxidu uhličitého na mezifázovém rozhraní a E_{ri} je reakční faktor okamžité reakce.

A.2.2 Teplotní závislost

Data externích měřicích přístrojů

Naměřená data IR sondami a externím anemometrem při zjišťování závislosti účinnosti procesu na teplotě byly seřazeny do tab. A.6.

Tab. A.6: Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů

	φ_{in0}	φ_{out0}	φ_{in}	φ_{out}	w (m s^{-1})
5 °C	707,3	526,8	5 213	3 299	5,62
	706,8	516,5	5 324	3 347	5,46
	688,0	524,5	5 292	3 356	5,47
10 °C	613,8	437,5	4 847	2 976	5,60
	597,8	436,8	5 177	3 235	5,55
	642,5	484,5	5 194	3 221	5,64
15 °C	576,3	440,3	5 068	3 157	5,59
	624,8	505,0	5 116	3 231	5,52
	588,8	495,5	4 930	3 162	5,46
20 °C	571,8	324,1	5 409	3 066	5,50
	659,5	385,5	4 924	2 878	5,45
	715,8	443,0	4 767	2 951	5,47

Označení veličin v tabulce je stejné jako v tabulce uvedené výše, tedy φ_{in0}, φ_{out0} je obsah CO_2 ve vzdušině na vstupu a výstupu v jednotce ppm před otevřením ventilu s kontaminujícím plynem.

Data interních měřicích přístrojů

Průměrné hodnoty 10minutového experimentu naměřené každých 5 sekund interními sondami byly zaznamenány v tab. A.7.

Tab. A.7: Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů

	$p_{\ell\mathrm{tr.}}$ (bar)	t_ℓ °C	$p_{\mathrm{vzd.in}}$ (mbar)	$p_{\mathrm{vzd.out}}$ (mbar)	$p_{\mathrm{lab.}}$ (Pa)	$t_{\mathrm{vzd.in}}$ °C	$t_{\mathrm{vzd.out}}$ °C	$\dot{V}_\ell$ (l min^{-1})
5 °C	2,83	6,359	−0,21	−2,20	102 000	24,14	18,02	112,0
	2,83	3,271	−0,21	−2,19	102 000	24,87	19,06	111,7
	2,83	3,925	−0,21	−2,19	102 000	24,72	14,72	111,6
10 °C	2,83	11,96	−0,21	−2,18	102 000	23,79	19,36	112,5
	2,83	11,08	−0,21	−2,13	102 000	23,67	17,55	112,4
	2,83	11,85	−0,21	−2,10	102 000	23,90	18,57	112,4
15 °C	2,83	15,06	−0,21	−2,05	101 400	22,64	18,87	112,3
	2,83	15,81	−0,21	−1,96	101 400	22,27	18,05	112,5
	2,83	14,97	−0,21	−2,03	101 400	22,74	18,13	112,4
20 °C	2,83	19,64	−0,21	−1,97	100 800	23,34	21,32	113,1
	2,83	19,40	−0,21	−1,90	100 800	23,46	21,01	112,9
	2,83	19,51	−0,21	−1,98	100 800	23,30	20,98	112,9

Vypočítané data

Tab. A.8: Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí

	5 °C	10 °C	15 °C	20 °C
$\Delta p_{\text{ztr.}}$ (bar)	0,186 6	0,186 2	0,184 9	0,186 3
	0,186 7	0,186 2	0,185 2	0,185 6
	0,186 1	0,185 9	0,185 2	0,185 8
$I\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right)$	0,292 3	0,292 1	0,291 7	0,292 2
	0,292 4	0,292 0	0,291 5	0,292 4
	0,292 2	0,292 0	0,291 4	0,292 3
k_2 $\left(\frac{\text{m}^3}{\text{kmol}^3\text{s}^3}\right)$	2 762,3	4 059,7	4 992,1	6 724,9
	2 217,6	3 824,7	5 244,9	6 622,6
	2 324,9	4 029,5	4 962,5	6 669,7
$D^{\pm}_{\text{CO}_2}$ $\cdot 10^{11}\left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}^{-1}}\right)$	1,337	1,607	1,773	2,03
	1,205	1,562	1,813	2,02
	1,232	1,602	1,767	2,03
d_{32} (µm)	393,05	393,05	393,06	393,05
	393,05	393,05	393,05	393,05
	393,05	393,05	393,05	393,05
τ (s)	0,302 2	0,302 4	0,301 8	0,301 5
	0,302 2	0,302 2	0,301 8	0,301 5
	0,302 4	0,302 4	0,302 0	0,301 5
$k_{\ell C}$ $\cdot 10^6\left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)$	7,505	8,226	8,649	9,268
	7,125	8,112	8,746	9,236
	7,202	8,213	8,631	9,252
$D^{\pm}$ $\cdot 10^9\left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}}\right)$	1,996	2,036	2,058	2,09
	1,974	2,03	2,063	2,09
	1,979	2,035	2,057	2,09
Ha (−)	13,81	16,75	18,55	21,51
	12,38	16,25	19,01	21,35
	12,68	16,68	18,50	21,42
$H_C{}^{\odot}$ $\left(\frac{\text{Pa m}^3}{\text{mol}}\right)$	2 485,8	2 532,4	2 557,8	2 594,8
	2 459,6	2 525,2	2 563,9	2 592,9
	2 465,2	2 531,5	2 557,1	2 593,8
$C_{\text{CO}_2,\text{f}}$ $\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^{-3}}\right)$	0,213 8	0,195 2	0,200 9	0,210 1
	0,220 7	0,209 1	0,202 3	0,191 4
	0,218 9	0,209 2	0,195 4	0,185 2
E_{ri} (−)	55,77	66,29	67,27	68,28
	51,59	61,11	67,46	74,74
	52,53	61,76	69,03	77,34

A.2.3 Závislost na obsahu kontaminantu

Data externích měřicích přístrojů

Tab. A.9: Tabulka naměřených dat z externích měřících přístrojů

	φ_{in0}	φ_{out0}	φ_{in}	φ_{out}	w (m s^{-1})
0,3 %	566,8	467,0	2 910	1 863	5,44
	577,5	515,3	2 911	1 874	5,35
	567,5	507,8	2 891	1 822	5,48
0,5 %	642,3	513,8	5 261	3 256	5,48
	843,3	680,8	5 354	3 266	5,56
	851,5	692,5	5 463	3 347	5,49
0,7 %	500,8	409,0	7 027	4 361	5,45
	567,8	472,8	7 274	4 384	5,57
	566,3	505,0	7 315	4 474	5,40
0,9 %	1010	825,0	9 007	5 478	5,60
	909,3	753,3	8 867	5 376	5,46
	847,3	718,0	8 793	5 392	5,46

Data interních měřicích přístrojů

Tab. A.10: Tabulka naměřených dat z interních měřících přístrojů

	$p_{\ell\mathrm{tr.}}$ (bar)	t_ℓ °C	$p_{\mathrm{vzd.in}}$ (mbar)	$p_{\mathrm{vzd.out}}$ (mbar)	$p_{\mathrm{lab.}}$ (Pa)	$t_{\mathrm{vzd.in}}$ °C	$t_{\mathrm{vzd.out}}$ °C	$\dot{V}_\ell$ (l min^{-1})
0,3 %	2,83	15,59	−0,21	−1,05	100 300	23,74	20,06	112,4
	2,83	15,72	−0,21	−1,04	100 300	23,80	18,46	112,7
	2,83	14,36	−0,21	−1,04	100 300	23,38	18,00	112,4
0,5 %	2,83	16,17	−0,21	−1,06	101 700	23,12	20,22	169,9
	2,83	15,81	−0,21	−1,06	101 700	23,40	19,53	170,0
	2,83	16,17	−0,21	−1,05	101 700	23,68	18,45	112,8
0,7 %	2,83	15,41	−0,21	−1,07	100 100	23,50	21,27	112,6
	2,83	13,46	−0,21	−1,05	100 300	23,54	18,34	112,3
	2,83	15,86	−0,21	−1,04	100 300	23,50	18,26	112,5
0,9 %	2,83	16,63	-0,21	-1,04	101 600	23,77	18,78	112,7
	2,83	15,18	-0,21	-1,04	101 600	24,03	18,88	112,6
	2,83	16,05	-0,21	-1,04	101 600	24,25	19,20	112,6

Vypočítané data

Tab. A.11: Tabulka vypočítaných dat důležitých pro charakterizaci absorpce s chemickou reakcí

	0,3 %	0,5 %	0,7 %	0,9 %
$\Delta p_{\mathrm{ztr.}}$ (bar)	0,185 1	0,414 6	0,185 6	0,185 8
	0,185 8	0,415 3	0,185 3	0,185 8
	0,185 5	0,186 0	0,185 3	0,185 5
$I\left(\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^3}\right)$	0,291 4	0,291 6	0,2913	0,292 0
	0,291 1	0,291 8	0,2915	0,291 9
	0,291 2	0,291 8	0,2911	0,291 6
k_2 $\left(\frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{kmol}^3\mathrm{s}^3}\right)$	5 169,5	5 370,0	5107,9	5 535,3
	5 212,6	5 245,6	4488,7	5 031,9
	4 765,5	5 370,5	5261,2	5 328,4
$D^{\pm}_{\mathrm{CO_2}}$ $\cdot 10^{11}\left(\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^{-1}}\right)$	1,801	1,834	1,792	1,86
	1,808	1,813	1,686	1,779
	1,735	1,834	1,817	1,827
d_{32} (µm)	393,05	393,06	393,06	393,06
	393,05	393,05	393,05	393,05
	393,05	393,05	393,05	393,05
τ (s)	0,300 9	0,302 2	0,300 9	0,302 2
	0,300 9	0,302 2	0,300 9	0,302 2
	0,300 9	0,302 2	0,300 9	0,302 2
$k_{\ell C}$ $\cdot 10^6\left(\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}\right)$	8,730	8,790	8,708	8,852
	8,747	8,740	8,446	8,658
	8,568	8,790	8,768	8,774
$D^{\pm}$ $\cdot 10^9\left(\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}\right)$	2,062	2,066	2,061	2,069
	2,063	2,063	2,047	2,059
	2,053	2,066	2,064	2,065
Ha $(-)$	18,85	19,25	18,73	19,54
	18,92	19,03	17,57	18,63
	18,10	19,25	19,01	19,17
$H_C^{\odot}$ $\left(\frac{\mathrm{Pa\ m}^3}{\mathrm{mol}}\right)$	2 562,1	2 566,9	2 560,7	2 570,6
	2 563,2	2 563,9	2 544,8	2 558,8
	2 552,1	2 566,9	2 564,3	2 565,9
$C_{\mathrm{CO_2,f}}$ $\left(\frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{m}^{-3}}\right)$	0,113 9	0,208 4	0,274 6	0,355 9
	0,113 9	0,212 3	0,286 6	0,352 0
	0,113 6	0,216 4	0,286 0	0,348 1
E_{ri} $(-)$	119,4	65,82	49,45	38,81
	119,6	64,27	46,13	38,48
	117,8	63,38	47,77	39,37