

DOI: 10.19666/j.rlfed.202508010

双接触式碳捕集气液两相吸收床 氨法碳捕集传质过程模拟

张 硕¹, 李德波², 方立军^{1,3}, 陈 拓², 周杰联², 高庆水²

(1. 华北电力大学动力工程系, 河北 保定 071003;

2. 南方电网电力科技股份有限公司, 广东 广州 510080;

3. 华北电力大学河北省低碳高效发电技术重点实验室, 河北 保定 071003)

[摘 要] 【目的】探究双接触式碳捕集气液两相吸收床强化氨法碳捕集传质性能。【方法】基于欧拉-拉格朗日 CFD 框架, 结合双膜理论对 Fluent 进行二次开发, 构建氨法碳捕集传质模型。【结果】液滴 CO₂ 负载沿塔高呈单峰分布, 壁面低而中心高, 且随液气比降低, CO₂ 净通量增大, 负载增大。烟气入口存在明显偏流, 偏流程度随液气比减小而减弱, 液滴分布不均导致 CO₂ 吸收与浓度场分布不均; 液气比自 0.40 m³/m³ 降至 0.17 m³/m³ 时, CO₂ 捕集率由 89.19% 降至 77.29%, 减小了 13.34%, 出口 CO₂ 摩尔分数由 1.45% 升至 3.00%。气相总传质系数 K_G 在床高 3/4 以下较高; 喷嘴母管下方形成了带状低 K_G 区; 随液气比减小, 整体上高 K_G 区缩减, 由喷嘴母管阻碍作用形成的带状低 K_G 区呈上抛物线形态。流场方面, 床内因入口与文丘里效应形成两处高速区及涡流, 气相流速沿床高呈双峰分布, 沿 X 方向为对称三段波动, 沿 Y 方向呈非单调分布, 液气比减小加剧了局部扰动及流速上升。【结论】双接触式碳捕集气液两相吸收床传质性能良好, 液气比对流动与传质行为具有显著调控作用, 研究结果可为碳捕集设备优化提供理论依据。

[关 键 词] 双接触式气液两相吸收床; 二氧化碳捕集; 氨法; 流动特性; 传质过程

[引用本文格式] 张硕, 李德波, 方立军, 等. 双接触式碳捕集气液两相吸收床氨法碳捕集传质过程模拟[J]. 热力发电, 2026, 55(5): 99-108. ZHANG Shuo, LI Debo, FANG Lijun, et al. Simulation of mass transfer processes of ammonia-based carbon capture in double-contact carbon capture gas-liquid two-phase absorption bed[J]. Thermal Power Generation, 2026, 55(5): 99-108.

Simulation of mass transfer processes of ammonia-based carbon capture in double-contact carbon capture gas-liquid two-phase absorption bed

ZHANG Shuo¹, LI Debo², FANG Lijun^{1,3}, CHEN Tuo², ZHOU Jielian², GAO Qingshui²

(1. Department of Power Engineering, North China Electric Power University, Baoding 071003, China;

2. China Southern Grid Power Technology Co., Ltd., Guangzhou 510080, China;

3. Hebei Key Laboratory of Low Carbon and High Efficiency Power Generation Technology, North China Electric Power University, Baoding 071003, China)

Abstract: [Objective] At present, the greenhouse effect is becoming increasingly severe, making it crucial to control CO₂ emissions from fossil fuel combustion. Carbon dioxide capture technology represents both the primary step and the critical pathway, serving as a vital means for reducing carbon emissions in the future. [Methods] Based on a novel double-contact carbon capture gas-liquid two-phase absorption bed, and to investigate its enhanced mass transfer performance for ammonia-based carbon capture, this study employs an Eulerian-Lagrangian CFD framework. By integrating dual-film theory into a secondary development of Fluent, a mass transfer model for ammonia-based carbon capture is constructed. [Results] The droplet load exhibits a unimodal distribution along the

收稿日期: 2025-08-04 修回日期: 2025-08-29 接受日期: 2025-09-04 网络首发日期: 2026-01-20

基金项目: 广东省能源产业科技创新项目: 新型高效低耗捕集 CO₂ 吸收剂开发及系统节能技术 (NWKJ2024L-001)

Supported by: Science and Technology Innovation Project of the Energy Industry in Guangdong Province (NWKJ2024L-001)

第一作者简介: 张硕 (2001), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为大型碳捕集吸收床数值模拟及大型碳捕集系统仿真, shuozhang224@163.com。

通信作者简介: 李德波 (1983), 男, 博士, 教授级高级工程师, 主要研究方向为煤粉燃烧理论、数值模拟和现场试验, 超超临界锅炉调试、试验和技术监督, 煤粉燃烧高级数值模拟, 大规模并行计算方法和程序开发, ldbyx@126.com。

tower height, being low near the walls and high towards the center. As the liquid-to-gas ratio decreases, the net CO_2 flux increases, leading to a higher droplet load. Significant flow deviation exists at the flue gas inlet, with its severity diminishing as the liquid-to-gas ratio decreases. The uneven droplet distribution causes non-uniformity in CO_2 absorption and concentration field distribution. When the liquid-to-gas ratio decreases from $0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$ to $0.17 \text{ m}^3/\text{m}^3$, the CO_2 capture efficiency drops from 89.19% to 77.29%, a reduction of 13.34%, while the outlet CO_2 molar fraction rises from 1.45% to 3.00%. The overall gas-phase mass transfer coefficient (K_G) remains relatively high below three-quarters of the bed height. A banded region of low K_G forms beneath the nozzle manifold. In the region above the nozzles, K_G gradually decreases with increasing bed height due to insufficient mass transfer driving force and the influence of mass transfer resistance from the gas film side. As the liquid-to-gas ratio decreases, the high K_G zone contracts, and the banded low K_G zone exhibits a parabolic upward trajectory. Regarding the flow field, two high-velocity zones and vortices form within the bed due to the inlet and Venturi effect. The average gas phase velocity in the Z-direction exhibits a bimodal distribution along the bed height, a symmetrical three-segment oscillation along the X-cross section, and a non-monotonic distribution along the Y-cross section. As the liquid-to-gas ratio decreases, the disturbance between the gas and liquid phases intensifies, causing the average gas phase velocity along the $Y=0$ cross section and the X-cross section to gradually increase. [Conclusion] The double-contact carbon capture gas-liquid two-phase absorption bed exhibits favourable mass transfer characteristics, with the liquid-to-gas ratio exerting a significant regulatory effect on both flow and mass transfer. These findings provide a theoretical basis for optimizing carbon capture equipment.

Key words: double-contact gas-liquid two-phase absorption bed; carbon dioxide capture; ammonia process; flow characteristics; mass transfer process

随着社会发展, 全球变暖与温室效应日益严峻^[1-2]。化石燃料燃烧是二氧化碳的主要来源^[3-5], 每年排放近四亿吨^[6], 占 CO_2 总排放量的 95.2% 以上^[7]。因此, 对化石燃料燃烧产生的二氧化碳进行控制具有重要意义。二氧化碳捕集技术是首要环节与关键路径^[8-9], 是未来减少碳排放的重要手段, 能够有效缓解温室效应^[10]。吸收塔是二氧化碳捕集技术的关键设备之一, 而其气液两相之间的传质性能则是吸收塔吸收性能的关键技术指标。

国内外诸多学者针对吸收塔的气液两相吸收性能进行了大量研究。Chen 等人^[11]为了优化低温碳捕集技术中脱附塔效率问题, 建立了耦合欧拉-拉格朗日的 CFD 脱附传质模拟框架, 结果表明: 在恒定喷雾流量下, 较小液滴可显著提升 CO_2 捕集率与传热性能; 塔内回流区可进一步延长气体停留时间, 强化碳捕集效果。Najamezhadmashhadi 等人^[12]为探究喷淋塔内气液入口布置的优化方案, 采用纯碳酸钾溶剂吸收剂测试了 4 种流型的吸收性能, 结果表明: 提升 CO_2 捕集效率的最优方案为将气体喷嘴置于塔体两侧, 使液体自上而下喷入, 该方案能够显著强化气液混合与接触。Yin 等人^[13]在填料塔中探究 MEA-环丁砜-水体系相变吸收剂的传质性能, 发现在 4 mol/L MEA/ 5 mol/L 环丁砜体系中, 分相后上层液相 CO_2 负载趋近于 0, 因此吸收剂解吸量降低了一半, 能耗大幅降低, 同时体积传质系数随液流量增大而升高, 随贫液 CO_2 负载与 CO_2 分压增加而下降。Wang 等人^[14]对工业矿化喷淋塔的

流动特性与反应效率进行数值模拟, 结果表明, CO_2 吸收效率与浆液流速、喷雾速度和喷雾角度呈正相关, 与烟气流速、入口 CO_2 浓度呈负相关, 与浆料粒径呈负相关, 且对浆料粒度最敏感。Wang 等人^[15]应用机器学习构建了胺法 CO_2 捕集传质参数支持向量机预测模型, 该模型可准确预测塔内物性及传质分布, 识别不同条件下的传质控制机制。Wu 等人^[16]基于变径喷淋塔分析了操作参数的重要性, 各因素与传质之间的关系, 以及双喷嘴对置撞击和中间喷雾 2 种方法, 结果发现, 吸收性能主要受 MEA 浓度和 CO_2 浓度 2 个参数的影响, 双喷嘴对置撞击喷雾法能够提高 CO_2 捕集率。

本文重点研究双接触式碳捕集气液两相吸收床的吸收性能。基于独特的双接触式流型设计, 依据双膜理论传质模型完成建模, 通过计算流体力学构建耦合欧拉-拉格朗日的 CFD 模拟架构, 研究双接触式碳捕集气液两相吸收床中氨溶液不同液气比 (L/G) 对液滴 CO_2 负载分布、 CO_2 吸收特性、气液两相传质性能以及气液两相流动特性的影响。

1 双接触式碳捕集气液两相吸收床模型

1.1 物理模型

模拟对象为华北电力大学双接触式碳捕集气液两相吸收床实验室台架, 其结构示意图如图 1 所示。模型截面为标准的正方形, 边长为 80 mm , 吸收床高为 $1\,200 \text{ mm}$ 。喷嘴母管布置于距吸收床底 400 mm 处, 烟气入口位于距吸收床底 300 mm 处。喷嘴为

2 排布置, 呈等边三角形排列, 喷嘴总数为 3 个, 形成液相交错布置以增大液相覆盖面积。

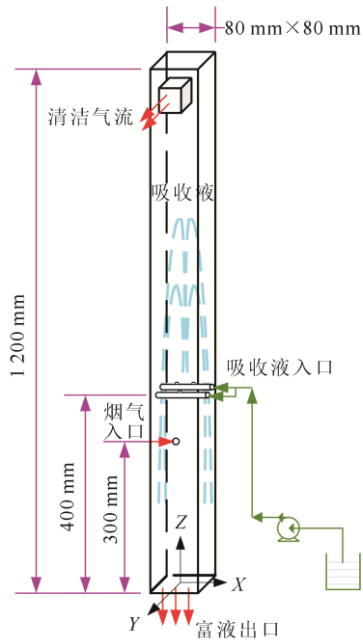


图1 双接触式碳捕集气液两相吸收床结构示意图
Fig.1 Structural diagram of the gas-liquid two-phase absorption bed with double-contact carbon capture

该吸收床原理是: 吸收液经加压泵加压后由喷嘴从吸收床底部射入形成吸收液液柱, 烟气经由吸收床底部烟气入口进入吸收床体, 在上升过程中与吸收液顺流接触; 当吸收液达到最高点后, 以自由落体状态下降, 过程中与烟气逆流接触。因此吸收液在上升和下落过程中与烟气有 2 次接触^[17]。本文坐标系如图 1 底部所示, 以吸收床底部中心点为原点, 吸收床高方向为 Z 轴正方向, 清洁气流出口方向为 Y 轴正方向, 喷嘴母管(吸收液)入口方向为 X 轴负方向。

1.2 数值方案与计算工况

借助 Ansys Fluent 软件, 通过自定义函数 UDF 代码构建耦合欧拉-拉格朗日的模拟架构进行数值求解, 以实现双膜模型气液两相之间的相互作用。UDF 基于双膜模型编写, 分别作用于液滴源相、烟气源相, 用以传递氨法碳捕集所进行的传质与传热。模拟工况见表 1, 入口烟气为体积分数 88% 的 N_2 与体积分数 12% 的 CO_2 混合的模拟烟气。

1.3 网格无关性验证

为确定最合适的仿真模型的网格数目, 加快计算进程和提高精确度, 共划分了 7 套网格, 网格数分别为 32 871、55 684、69 478、149 192、186 592、

399 512 和 1 038 426。图 2 给出了不同网格数下气相流速随吸收床高度的变化规律。可以看出, 当网格数超过 186 592 后, 再增加网格数时所计算的速度分布曲线相差不大。综合考虑计算效率和计算精度, 取网格数 186 592 开展后续计算。

表 1 计算工况
Tab.1 Calculated working conditions

工况	液气比/ ($m^3 m^{-3}$)	烟气流量/ ($m^3 h^{-1}$)	氨水流量/ ($m^3 h^{-1}$)	氨水质量 分数/%
工况 1	0.40	0.30	0.12	4
工况 2	0.25	0.48	0.12	4
工况 3	0.20	0.60	0.12	4
工况 4	0.17	0.72	0.12	4

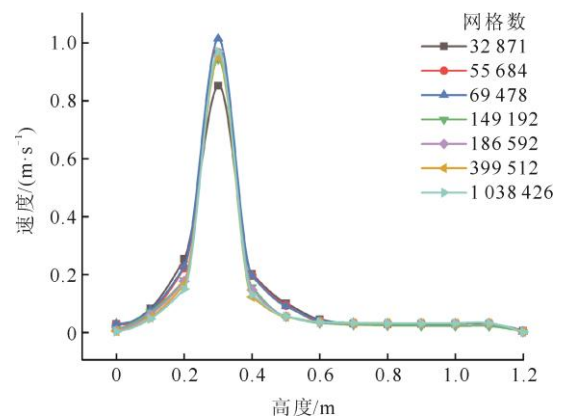


图 2 网格无关性验证
Fig.2 Grid independence verification

2 氨法碳捕集传质过程建模

氨法碳捕集的基础主要是扩散理论和气液传质模型。针对气液反应的吸收过程, 已有多种不同的气液传质理论, 如 Whitman 的双膜模型^[18]、Higbie 的溶质渗透理论^[19]、Danckwerts 的表面更新理论^[20]以及考虑湍流的气液传质理论^[21], 其中双膜理论是最经典的传质模型。基于双膜理论, 本文建立了典型的快速反应-扩散耦合体系——氨法碳捕集传质模型。

2.1 双膜理论传质模型

双膜理论也称为有效膜理论, 由 Whitman^[18]率先提出。图 3 给出了双膜理论原理示意^[22]。双膜理论将对流传质过程描述为: 气液界面两侧各存在一层虚拟静止的气膜和液膜, 厚度分别为 δ_g 和 δ_l ; 全部传质阻力集中于这 2 层静止膜中; 气膜内的条件与气相主体内的条件相同, 液膜内的条件与液相主体内的条件相同; 气膜和液膜交界处的相界面气体和液体处于平衡状态, 膜中的传质是定态的分子扩

散^[23], 两相间的物质传递速率取决于通过气膜与液膜的分子扩散速率^[24]。通过气膜的扩散由气相主体溶质分压 p_g 与气膜溶质分压 p_i 的分压梯度决定, 并通过液膜溶质质量浓度 c_g 与液相主体溶质质量浓度 c_l 所形成的浓度梯度穿过液膜, 过程如式(1)所示。

$$\frac{dW}{d\theta} = k_p(p_g - p_i) = k_c(c_i - c_l) \quad (1)$$

式中: W 为吸收量, kg; θ 为吸收时间, s; k_p 为气膜扩散系数, kg/(s Pa); k_c 为液膜扩散系数, m³/s; p_g 为气相主体中溶质分压力, Pa; p_i 为气膜中溶质分压力, Pa; c_l 为液相主体溶质质量浓度, kg/m³; c_i 为液膜内溶质质量浓度, kg/m³。

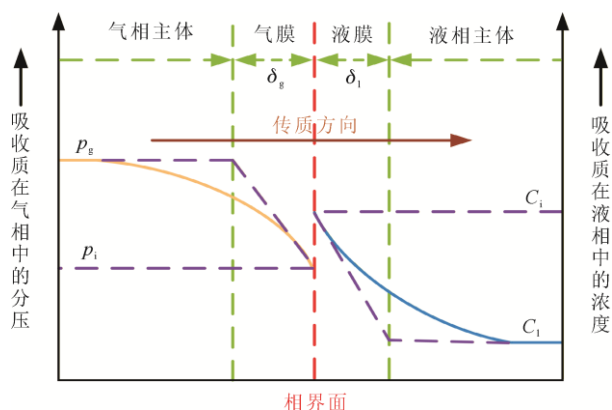


图3 双膜理论原理示意

Fig.3 Schematic diagram of principle of the two-film theory

依据上述双膜理论, 采用式(2)计算 CO₂ 传质质量速率^[25]:

$$m(\text{CO}_2) = M(\text{CO}_2) \cdot N(\text{CO}_2) \cdot A_D \quad (2)$$

式中: $m(\text{CO}_2)$ 为 CO₂ 传质质量速率, kg/s; $M(\text{CO}_2)$ 为 CO₂ 分子量, kg/kmol; $N(\text{CO}_2)$ 为 CO₂ 传质速率, kmol/(m² s); A_D 为气液接触面积, m²。

根据《化工原理》^[25], 采用式(3)计算 $N(\text{CO}_2)$:

$$N(\text{CO}_2) = K_G(p_g - p_L^*) \quad (3)$$

式中: p_g 为 CO₂ 在气相中的分压, Pa; p_L^* 为液相中 CO₂ 的分压, Pa; K_G 为 CO₂ 气相总传质系数, kmol/(m² s Pa)。

CO₂ 气相总传质系数^[22,25]:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_g} + \frac{1}{H\beta k_L} \quad (4)$$

式中: k_g' 为气相传质系数, kmol/(m² s Pa); k_L 为液相传质系数, m/s; H 为溶解度系数, kmol/(m³ Pa); β 为基于拟一级反应假设化学反应增强因子, 可采用 Hatta 表示, 如式(5)^[26]:

$$\beta \approx Ha = \frac{\sqrt{k D(\text{CO}_2) C(\text{NH}_3)}}{k_L} \quad (5)$$

式中: Ha 为 Hatta 数; k 为二级反应速率常数, m³/(kmol s); $D(\text{CO}_2)$ 为 CO₂ 扩散系数, m²/s; $C(\text{NH}_3)$ 为自由氨浓度, kmol/m³。

烟气 CO₂ 捕集率^[17]:

$$\eta = \frac{C_{in} - C_{out}}{C_{in}(1 - C_{out})} \times 100\% \quad (6)$$

式中: η 为烟气 CO₂ 捕集率, %; C_{out} 为反应床烟气出口 CO₂ 体积分数, %; C_{in} 为反应床烟气进口 CO₂ 体积分数, %。

2.2 烟气控制方程

采用欧拉-拉格朗日方法进行模拟, 烟气控制方程主要包括连续性方程、能量方程、动量方程以及组分输运方程。本文湍流模型采用基于雷诺时均的 $N-S$ 方程并选取 Realizable $k-\varepsilon$ 湍流模型封闭方程组。连续性方程、能量方程、动量方程以及组分输运方程控制方程如下^[26-28]。

$$\frac{\partial \rho_y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_y u_i) = S_{mass} \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_y u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_y u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho_y g + S_{mom,i} \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_y e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_y e u_j) = -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i (\tau_{ij})_{eff} \right] + S_{en} \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_y \omega_A) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_y \omega_A u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_A \rho_y \frac{\partial \omega_A}{\partial x_j} \right) + S_{A,mass} \quad (10)$$

式中: ρ_y 为烟气密度, kg/m³; u_i 和 u_j 分别为烟气 i 和 j 方向速度, m/s; p 为静压, Pa; τ_{ij} 为应力张量, N; g 为重力加速度, m/s²; e 为烟气比焓, J/kg; λ_{eff} 为烟气等效导热系数, W/(m K); ω_A 为 A 组分气体在烟气中的质量分数, %; D_A 为 A 组分扩散系数, m²/s; $(\tau_{ij})_{eff}$ 为偏应力张量, N; S_{mass} 为连续性方程源项, kg/(m³ s); $S_{mom,i}$ 为动量方程源项, kg/(m² s²); S_{en} 为能量方程源项, W/m³; $S_{A,mass}$ 为组分输运方程源项, kg/(m³ s)。

2.3 液滴控制方程

液滴采用离散项模型拉格朗日的方法进行模拟。该方法能够追踪单个粒子或液滴的运动轨迹, 精确捕捉液滴在复杂流场中的运动、温度、直径变化等状态, 并能与连续相形成双向耦合。液滴粒径采用

rosin-rammler 分布, 最大粒径为 2 mm, 最小粒径为 1 mm, 平均粒径为 1.5 mm。基于拉格朗日方法描述的轨迹、速度、温度、质量守恒和组分守恒为^[26,29]:

$$\frac{dm_d}{dt} = m(\text{CO}_2) + m(\text{H}_2\text{O}) \quad (11)$$

$$m_d \frac{du_d}{dt} = \frac{1}{2} \rho_y C_D |u_g - u_d| (u_g - u_d) A_D + m_d g \quad (12)$$

$$m_d c_d \frac{dT_d}{dt} = h(T - T_d) A_D + h_{\text{vap}} m(\text{H}_2\text{O}) + \frac{m(\text{CO}_2) h(\text{CO}_2)}{M(\text{CO}_2)} \quad (13)$$

$$\frac{dm_d w_{A,d}}{dt} = m_A + M_A r_A \quad (14)$$

式中: m_d 为液滴质量, kg; $m(\text{H}_2\text{O})$ 为 H_2O 传质速率, kg/s; u_d 为液滴速率, m/s; C_D 为拽力系数, kg/s; c_d 为液滴比热容, J/(kg K); h 为对流换热系数, W/(m² K); h_{vap} 为汽化潜热, J/kg; $h(\text{CO}_2)$ 为吸收 CO_2 所放出的热量, J/mol; $w_{A,d}$ 为组分 A 质量分数, %; m_A 为组分 A 传质质量流率, kg/s; M_A 为组分 A 分子量, kg/kmol; r_A 为组分 A 由化学反应引起的变化速率, mol/s。

2.4 模型验证

对 CO_2 捕集率的模拟值与实验值^[30]进行比较, 如图 4 所示。由图 4 可以看出, 模拟值与实验值的最大误差为 5.2%, 表明本文所建立的氨法 CO_2 吸收模型具有较高的计算精度, 能够很好地描述双接触式碳捕集气液两相吸收床内的吸收过程。

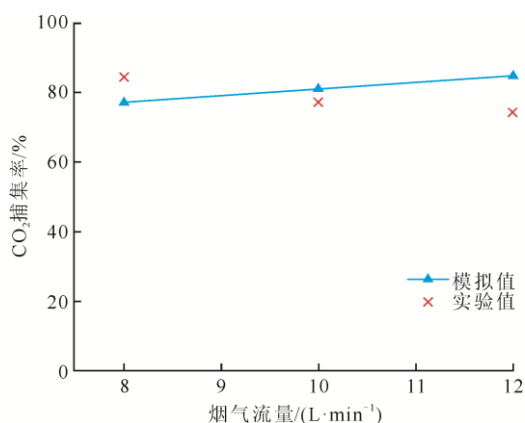


图 4 模型验证
Fig.4 Model validation

3 结果与讨论

在所验证工况的基础上, 着重分析液气比为 0.40、0.25、0.20、0.17 m³/m³ 4 种情形下双接触式碳捕集气液两相吸收床强化氨法碳捕集的传质过

程, 尤其是液滴 CO_2 负载分布、 CO_2 吸收特性、气液两相传质性能以及气液两相流动分布。

3.1 液滴 CO_2 负载分布

液滴负载是单位体积或单位质量吸收液液滴所捕获的 CO_2 的量。图 5 为液气比分别为 0.40、0.25、0.20、0.17 时液滴 CO_2 负载分布情况。从图 5 可以看出: 氨水液滴自吸收床高 $Z=400$ mm 处经 3 个呈等边三角形的喷嘴射入; 4 种不同液气比下, 在喷嘴母管附近 (吸收床高 $Z=400$ mm 处) 液滴负载最小, 自液滴入口开始, 随行程增加液滴负载增大并呈极强的不均匀性, 同时沿吸收床高度方向呈单峰分布。

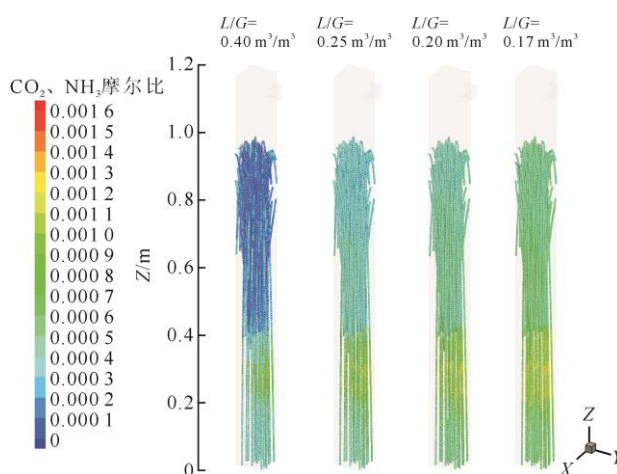


图 5 不同液气比时液滴 CO_2 负载分布情况
Fig.5 Distribution of CO_2 loading on droplets

从图 5 还可以看出, 反应床壁面附近的液滴负载较低, 而中心区域较高。这主要是因为壁面边界层效应导致壁面区域存在明显的摩擦效应, 因而气相流速减小, 物种组分相较于中心区域更新速度更慢且液滴呈锥形向上喷射; 在向上的射流过程中, 锥形截面积逐渐增大, 部分液滴射流至壁面而被壁面捕捉, 在壁面附近形成液膜, 气液相对速度低, 故而壁面附近呈现持续性低负载带。

在 4 种液气比下, 随液气比减小, 气相流量增大, 气相流速逐渐增大, 气相动能增大, 湍流强度增大。在单位时间内, 液气比越低, 气相进入的 CO_2 绝对净通量越大, 因此液滴负载随液气比减小而增大, 在喷嘴上方的顶部反应区 CO_2 、 NH_3 摩尔比自液气比 0.40 m³/m³ 时的 0~0.000 4 增大至液气比 0.17 m³/m³ 时的 0.000 5~0.000 8。在烟气入口, 吸收床高 $Z=400$ mm 处所影响的入口区域的液滴负载是整个流程的最大区域, 且入口区域所影响的范围随液气比

减小而增大。在吸收床底部区域,液滴负载相对入口区域较小,但整体大于喷嘴上方的顶部反应区。这主要是因为液滴中自由氨吸收 CO_2 释放大部分热量,所发生的化学反应集中在液滴表面,热量同步积累于液滴中,导致液滴温度上升,因此在吸收床底部液滴温度升高抑制了液滴中自由氨对 CO_2 的吸收,导致液滴负载降低。但是,随液气比减小 CO_2 绝对净通量增大,导致吸收床底部区域液滴负载绝对值逐渐增大。

3.2 CO_2 吸收特性

图 6 为 4 种液气比下 $X=0$ 截面上的 CO_2 摩尔分数分布情况。从图 6 可以看出,整体上,烟气入口侧壁面区域 CO_2 摩尔分数较大,对侧区域 CO_2 摩尔分数较小。这主要受两方面影响:一是烟气入口侧气相流场分布,烟气入口侧靠近气相入口,周围气相流场受气相入口效应的影响,气相流速大,湍流程度大,致使新进入的高浓度 CO_2 烟气在压差驱动下沿烟气入口侧壁面向上流动;二是液滴需要经过向上流动和自由回落 2 个过程,导致其分布的不均匀性增大。由图 6 可见,烟气入口附近存在明显偏流现象,且偏流程度随液气比减小而逐渐减弱。

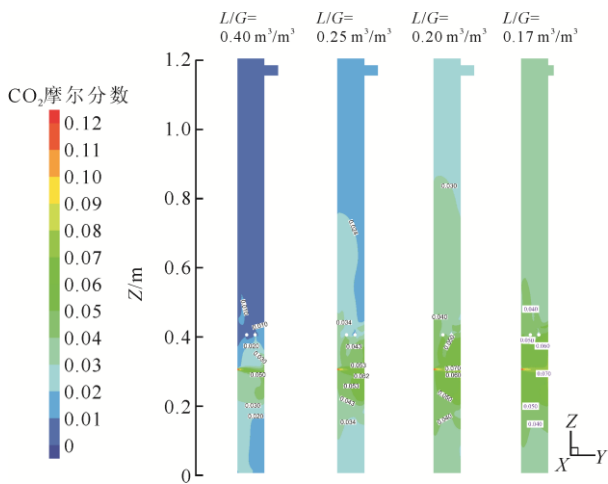


图 6 $X=0$ 截面不同液气比时 CO_2 摩尔分数分布情况
Fig.6 Distributions of CO_2 mole fraction in $X=0$ m cross section

液气比分别为 0.40、0.25、0.20、0.17 m^3/m^3 时, $X=0$ 截面的平均 CO_2 摩尔分数分别为 1.10%、2.90%、3.55%和 3.99%。在液气比自 0.40 m^3/m^3 减小至 0.17 m^3/m^3 时,烟气流量逐渐增大,而相同的液滴流量吸收 CO_2 的能力有限,导致在液气比减小过程中 $X=0$ 截面平均 CO_2 摩尔分数逐渐增大,未反应的 CO_2 含量越来越大,高浓度 CO_2 区域均主要集

中在烟气入口侧,且随液气比减小,高浓度 CO_2 区域范围逐渐增大,这主要是受近烟气入口局部高速气流的影响。

不同液气比对 CO_2 捕集率及出口 CO_2 摩尔分数的影响如图 7 所示。液气比自 0.40 m^3/m^3 减小至 0.17 m^3/m^3 时, CO_2 捕集率自 89.19%减小至 77.29%,减小了 13.34%;出口 CO_2 摩尔分数自 1.45%增大至 3.00%,增大了 106.90%。这主要是因为液气比减小的过程中,反应床内液滴体积分数相对减小,气液平均接触面积减小,液滴平均负载更大,导致出口 CO_2 摩尔分数逐渐增大, CO_2 捕集率逐渐减小。

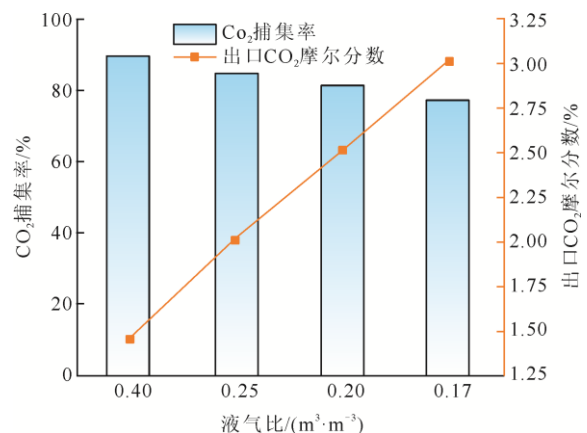


图 7 4 种液气比下 CO_2 捕集率及出口 CO_2 摩尔分数
Fig.7 CO_2 capture rates and CO_2 molar ratios at the outlet with different liquid to gas ratios

3.3 气液两相传质性能

图 8 为液滴吸收 CO_2 过程中在 $X=0$ 截面的 CO_2 气相总传质系数分布情况。可以看出, CO_2 气相总传质系数在吸收床底部区域、入口区域以及喷嘴顶部区域较大。在喷嘴顶部区域,随高度增大, CO_2 气相总传质系数逐渐减小,在最顶部区域接近 0。结合式(1)和图 6 可知:在喷嘴下方的吸收床底部区域和入口区域, CO_2 摩尔分数比较大,因此 CO_2 分压增大,导致烟气侧传质推动力大,且此区域气相受入口效应的影响,湍动度大,气液相对接触面积更大,故 CO_2 气相总传质系数较大;在入口区域,受喷嘴母管的阻碍作用,自由下落的液滴无法完全落入喷嘴母管下方区域,因而 CO_2 气相总传质系数较入口区域明显减小,形成连续带状低 CO_2 气相总传质系数区;在喷嘴顶部区域,自喷嘴喷入的新鲜液滴碳捕集能力最大,但结合图 6 可知,在喷嘴上方,随着吸收床高的增大, CO_2 摩尔分数逐渐减小, CO_2 分压降低,气膜侧传质阻力增大,传质推动力减小,

因此 CO_2 气相总传质系数逐渐减小;在最顶部区域, CO_2 气相总传质系数接近 0, 这主要是由双接触式碳捕集气液两相吸收床的工作原理造成的,结合图 5 可知,液滴在初速度的作用下达达到最大高度,之后在重力作用下做自由落体运动,其无法到达最顶部区域,所以此区域内不存在气液两相间的传质。

在液气比自 $0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$ 减小至 $0.17 \text{ m}^3/\text{m}^3$ 时,高 CO_2 气相总传质系数区域分布范围明显减小,喷嘴母管阻碍作用所形成的带状低 CO_2 气相总传质系数区呈上抛物线趋势且连续变化明显。

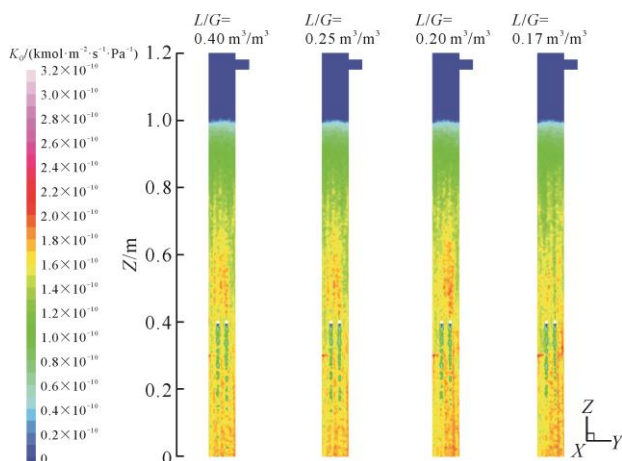


图 8 $X=0$ 截面 4 种液气比下 CO_2 气相总传质系数
Fig.8 Distributions of total CO_2 gas-phase mass transfer coefficient in $X=0$ cross-section

图 9 和图 10 分别为 X 方向和 Y 方向上的平均 CO_2 气相总传质系数分布。由图 9 可知:在 X 方向上 4 种液气比下平均 CO_2 气相总传质系数呈 M 形波动,而并非呈与几何模型相似的对称分布;在 $X=-0.02 \text{ m}$ 和 $X=0.02 \text{ m}$ 处分别存在峰值不同的 2 个极大值点,这是因为喷嘴呈等边三角形排布(图 1),在液滴自喷嘴向上以锥形喷射入反应床内部时,在锥形半径达到一定程度时,3 只喷嘴所形成的圆形截面中的液滴发生相互碰撞,由于液滴具有背离中心向外的速度(图 5),所以在 $X=-0.02 \text{ m}$ 和 $X=0.02 \text{ m}$ 处分别存出现 2 个极大值点,且因气流的不均匀性导致 2 个极大值点峰值不同。由图 10 可知,在 Y 方向上 4 种液气比下平均 CO_2 气相总传质系数呈近似 W 形波动,两侧趋势以 $Y=0 \text{ m}$ 呈对称分布,主要是因为 $Y=0.01 \text{ m}$ 与 $Y=-0.01 \text{ m}$ 处靠近喷嘴,新鲜液滴含量较其他区域更高,但此区域内 CO_2 摩尔分数更低, CO_2 分压更低,传质推动力减弱,故而平均 CO_2 气相总传质系数减小。

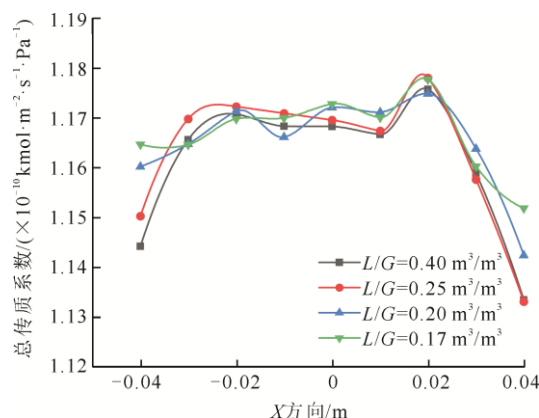


图 9 X 方向平均 CO_2 气相总传质系数分布
Fig.9 Distribution of averaged total CO_2 gas-phase mass transfer coefficient in X -direction

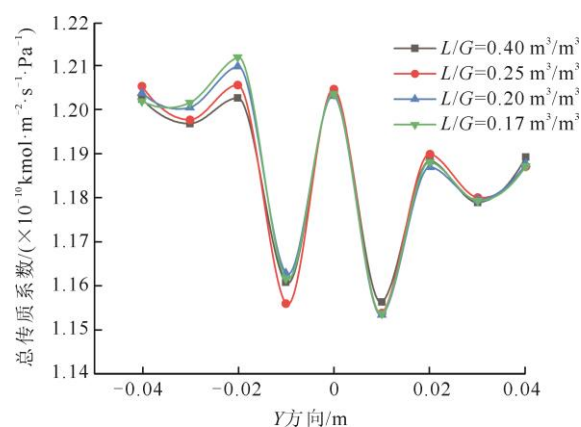


图 10 Y 方向平均 CO_2 气相总传质系数分布
Fig.10 Distribution of average CO_2 gas-phase total mass transfer coefficient in Y -direction

3.4 气液两相流动特性

图 11 考察了 $Y=0$ 截面上的速度分布情况。由图 11 可知,在喷嘴母管下方 ($Z \leq 400 \text{ mm}$) 以及上方 ($Z=400 \sim 800 \text{ mm}$) 区域内形成了 2 个高速气流区,其两侧由于贴壁效应也存在显著的涡流区。在喷嘴母管下方 ($Z \leq 400 \text{ mm}$) 所形成的高速气流区,受烟气入口处存在的入口效应以及入射烟气射流刚性的影响,烟气入口速度越大,射流刚性越强,气流速度越大。在喷嘴母管上方 ($Z=400 \sim 800 \text{ mm}$) 所形成的高速气流区,由于喷嘴母管所在区域气相流通截面积较其他截面明显减小,形成了文丘里效应,此处为文丘里喉部,对气相具有明显的加速作用。形成显著的涡流区主要是因为喷嘴喷射出的高速液滴对周围烟气具有较强的卷吸作用,被液滴卷吸的烟气在气液间作用力的影响下流向发生改变。

在 4 种液气比下,随着液气比的减小,烟气入口流速显著增大,烟气刚性增强,入口烟气偏流减

弱,喷嘴母管下方($Z \leq 400$ mm)所形成的高速气流流速逐渐增大,且该区域高度逐渐增大,其内涡流区也更明显。结合图 12 可知,液气比减小对喷嘴母管形成的文丘里效应区域内的高速气流影响并不明显。

图 12 为吸收床 Z 方向的平均气相流速分布。由图 12 可知,沿吸收床 Z 方向,平均气相流速的分布呈现双峰特征,且随着液气比的减小在气相扰动大的区域(Z 为 $0.2 \sim 0.4$ m 及 $0.9 \sim 1.2$ m)内逐渐增大。

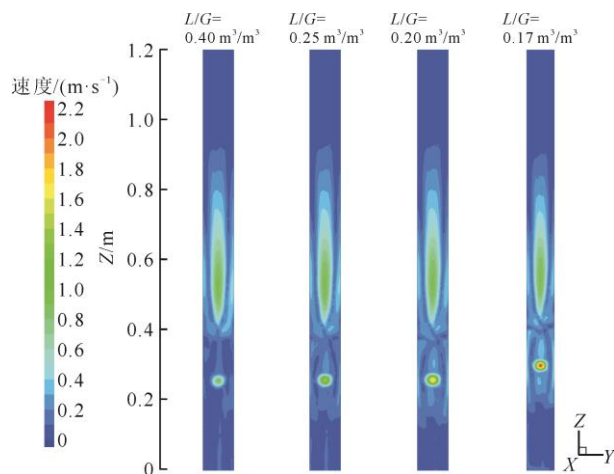


图 11 $Y=0$ 截面 4 种液气比下速度场分布
Fig.11 Distribution of velocity field in $Y=0$ section

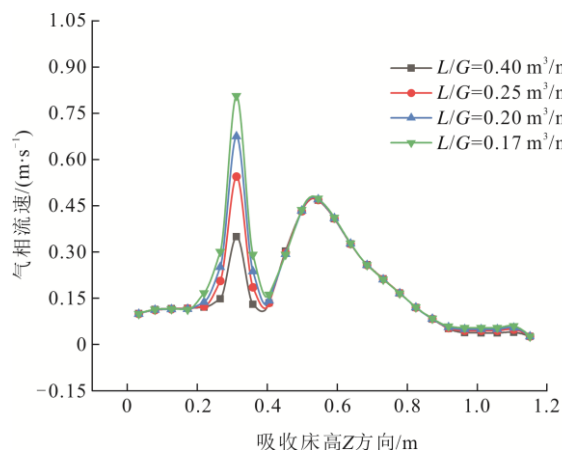


图 12 吸收床 Z 方向平均气相流速分布
Fig.12 Distribution of average gas-phase flow rate in Z direction along the tower height

图 13 为 X 方向平均气相流速分布。由图 13 可知,气相平均流速沿 X 方向的分布呈现关于 $X=0$ m 截面对称的三段式波动特征。峰值出现在 $X=0$ (此处单位建议保留) 截面处,主要原因是该截面处烟气入射、液滴入射以及物理模型均呈现标准的轴对称分布,而三段式分布主要受气液两相间的阻力及

反应床壁面黏性效应的影响,且随液气比减小,气相入口流速显著增大, X 方向平均气相流速也逐渐增大。

图 14 为 Y 方向平均气相流速分布。由图 14 可知,平均气相流速沿 Y 方向的分布呈现显著的非单调特征,在 $Y=-0.04 \sim -0.01$ m 范围急剧增大,随后在 $Y=-0.01 \sim 0.03$ m 区域经历一系列小幅度振荡变化,最终在 $Y=0.04$ m 边界区域急剧减小,且分布趋势沿 $Y=0.01$ m 位置对称。分析其原因主要是在 Y 截面气相与液相均呈非对称性分布,在 $Y < 0$ m 区域内,受烟气入口高速气流的影响,平均气相流速较 $Y > 0$ m 区域波动更大,随液气比减小, Y 截面平均气相流速逐渐增大。

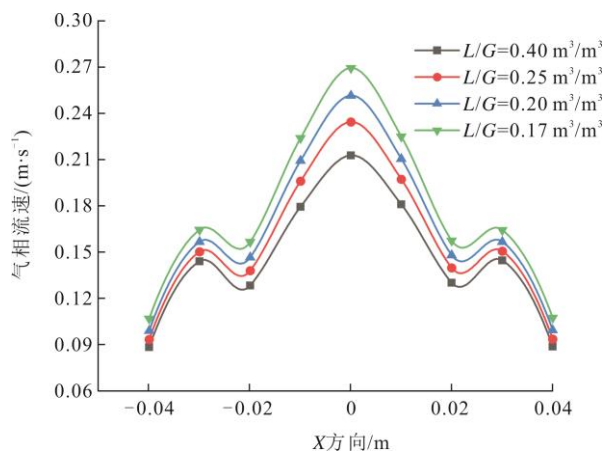


图 13 X 方向平均气相流速分布
Fig.13 Distribution of average gas-phase flow rate in X -direction

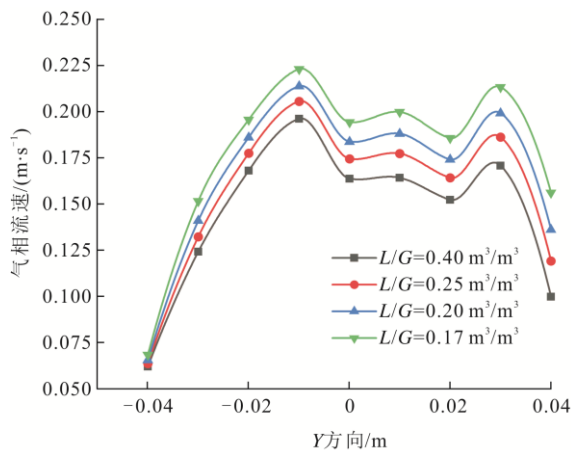


图 14 Y 方向平均气相流速分布
Fig.14 Distribution of average gas-phase flow rate in Y -direction

4 结 论

本文基于欧拉-拉格朗日模拟架构,构建了氨

法碳捕集传质模型,研究了液气比对双接触式碳捕集气液两相吸收床传质及流动性能的影响,结论如下:

1) 该双接触式碳捕集气液两相吸收床内,自入口起液滴 CO_2 负载随行程增加,沿反应床高方向呈单峰分布,在反应床壁面区域低而中心区域高;随液气比降低, CO_2 净通量增大,液滴负载增大。

2) CO_2 吸收特性方面,烟气入口附近存在明显偏流,偏流程度随液气比减小而减弱;液滴分布不均导致 CO_2 吸收与分布不均;液气比自 $0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$ 减小至 $0.17 \text{ m}^3/\text{m}^3$ 时, CO_2 捕集率自 89.19% 减小至 77.29%,减小了 13.34%;出口 CO_2 摩尔分数自 1.45% 增大至 3.00%,增大了 106.90%。

3) 气相总传质系数 K_G 在吸收床高 3/4 以下位置较高;在喷嘴顶部区域,因传质推动力不足且受气膜侧传质阻力影响, K_G 随吸收床高增大而逐渐减小;在喷嘴母管下方形成了带状低 K_G 区;随液气比减小,整体上高 K_G 区域分布明显减小,由喷嘴母管阻碍所形成的带状低 K_G 区呈上抛物线趋势。

4) 在反应床内,由于入口效应和文丘里效应,在 $Y=0$ 截面形成了 2 个高速气流区,且存在显著的涡流区;气相平均流速沿 Z 方向呈现双峰特征;沿 X 方向呈现对称的三段式波动;沿 Y 方向呈现关于 $Y=0.01 \text{ m}$ 对称的非单调特征。液气比减小加剧了气液两相的扰动, Y 截面和 X 截面气相平均流速逐渐增大。

5) 本文双接触式碳捕集气液两相吸收床传质性能良好,液气比对流动与传质行为具有显著调控作用。

【参考文献】

- [1] WU X, YU Y, QIN Z, et al. Performance of CO_2 absorption in a diameter-varying spray tower[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2017, 25(8): 1109-1114.
- [2] OH S, BINNS M, CHO H, et al. Energy minimization of MEA-based CO_2 capture process[J]. Applied Energy, 2016, 169: 353-362.
- [3] SALVINDER K M S, ZABIRI H, TAQVI S A, et al. An overview on control strategies for CO_2 capture using absorption/stripping system[J]. Chemical Engineering Research & Design, 2019, 147: 319-337.
- [4] WU X, SHARIF M, YU Y, et al. Hydrodynamic mechanism study of the diameter-varying spray tower with atomization impinging spray[J]. Separation and Purification Technology, 2021, 268: 118608.
- [5] 侯大伟. 基于哌嗪类复配胺吸收剂的碳捕集、压缩液化成本模拟及敏感性分析[J]. 热力发电, 2025, 54(6): 130-138.

HOU Dawei. Cost simulation and sensitivity analysis of

carbon capture, compression and liquefaction based on piperazine-based mixed amine absorbents[J]. Thermal Power Generation, 2025, 54(6): 130-138.

- [6] 刘克峰, 董卫刚, 胡雪生, 等. 推动二氧化碳捕集、输送、应用和封存发展的政策和举措[J]. 化工进展, 2025, 44(9): 4879-4897.
- LIU Kefeng, DONG Weigang, HU Xuesheng, et al. Policies and measures to promote the development of CCUS[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2025, 44(9): 4879-4897.
- [7] 张晶晶, 马小龙, 李扬. 新疆准东经济技术开发区二氧化碳排放现状与降碳对策研究[J]. 中国环境监测, 2023, 39(增刊 1): 1-6.
- ZHANG Jingjing, MA Xiaolong, LI Yang. Research on the current situation of carbon dioxide emissions and carbon reduction measures in xinjiang zhundong economic and technological development zone[J]. Environmental Monitoring in China, 2023, 39(Suppl.1): 1-6.
- [8] 吴学谦, 宗兴林, 张井鲁, 等. 基于响应面法的二氧化碳膜捕集优化分析研究[J]. 西安石油大学学报(自然科学版), 2025, 40(4): 115-123.
- WU Xueqian, ZONG Xinglin, ZHANG Jinglu, et al. Optimization analysis of carbon dioxide membrane capture based on response surface methodology[J]. Journal of Xi'an Shiyou University(Natural Science Edition), 2025, 40(4): 115-123.
- [9] 黄少轩, 李安, 赵佳豪, 等. 离子液体吸收法碳捕集系统的热力学分析[J]. 热科学与技术, 2025, 24(3): 249-260.
- HUANG Shaoxuan, LI An, ZHAO Jiahao, et al. Thermodynamic analysis of carbon capture system based on ionic liquid absorption[J]. Journal of Thermal Science and Technology, 2025, 24(3): 249-260.
- [10] 邵世康, 朱书全, 李宇琦. 中国动力煤应用现状及碳捕集与封存展望[J]. 洁净煤技术, 2014, 20(5): 66-69.
- TAI Shikang, ZHU Shuquan, LI Yuqi. Steam coal utilization and carbon capture and storage in China[J]. Clean Coal Technology, 2014, 20(5): 66-69.
- [11] CHEN P, CESCHIN A, RAHANTAMIALISOA F N Z, et al. A computational study of desublimation tower characteristics for cryogenic carbon capture[J]. Applied Thermal Engineering, 2025, 267: 125698.
- [12] NAJARNEZHADMASHHADI A, DAS NEVES N, ESCOBAR K Y T, et al. Enhancing CO_2 capture efficiency in a lab-scale spray tower: an experimental study on flow configurations using potassium carbonate[J]. Chemical Engineering Research & Design, 2025, 216: 186-199.
- [13] YIN Y, QIU A, GAO H, et al. Experimental study of the mass transfer behavior of carbon dioxide absorption into ternary phase change solution in a packed tower[J]. Chinese Journal of Chemical Engineering, 2022, 43: 135-142.
- [14] WANG C, LIU M, LIU H, et al. Numerical analysis of CO_2 absorption characteristics in industrial flue gas mineralization spray tower reactor[J]. Separation and Purification Technology, 2025, 354: 129051.
- [15] WANG R, NI L, ZHANG N, et al. Predictive model for CO_2 absorption and mass transfer process based on machine learning methods[J]. Separation and Purification Technology, 2025, 366: 132584.
- [16] WU X M, QIN Z, YU Y S, et al. Experimental and numerical study on CO_2 absorption mass transfer

- enhancement for a diameter-varying spray tower[J]. *Applied Energy*, 2018, 225: 367-379.
- [17] 刘洪锬. 纳米颗粒物强化氨法脱碳实验研究[D]. 保定: 华北电力大学, 2016: 18-31.
LIU Hongkun. Experimental study on enhancement of carbon dioxide absorption into aqueous ammonia by nano particles[D]. Baoding: North China Electric Power University, 2016: 18-31.
- [18] WHITMAN W G. The two film theory of gas absorption[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1962, 5(5): 429-433.
- [19] NEDELTCHEV S, JORDAN U, SCHUMPE A. Correction of the penetration theory based on mass-transfer data from bubble columns operated in the homogeneous regime under high pressure[J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(22): 6263-6273.
- [20] DANCKWERTS P V. Significance of liquid-film coefficients in gas absorption[J]. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1951, 43(6): 1460-1467.
- [21] 李克然. 鼓泡塔气液两相传质特性的 CFD 模拟[D]. 上海: 华东理工大学, 2024: 1-15.
LI Keran. The CFD simulation of gas-liquid mass transfer characteristics in bubble columns[D]. Shanghai: East China University of Science and Technology, 2024: 1-15.
- [22] 陈敏恒, 丛德滋, 齐鸣斋, 等. 化工原理(下册)[M]. 5 版. 北京: 化学工业出版社, 2020: 9-43.
CHEN Minheng, CONG Dezi, QI Mingzhai, et al. Principles of chemical engineering (Volume 2)[M]. 5th ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2020: 9-43.
- [23] 赵博, 李彦, 糕玉群, 等. 图像边界识别法对气液传质理论的实验研究[J]. *工程热物理学报*, 2005, 26(增刊 1): 159-162.
ZHAO Bo, LI Yan, ZHUO Yuqun, et al. An photographic identification boundary method on mass transfer theory[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2005, 26(Suppl.1): 159-162.
- [24] 申强, 杨峥豪, 张香港, 等. CO₂ 捕集过程中气液传质强化研究进展[J]. *石油炼制与化工*, 2024, 55(2): 64-74.
SHEN Qiang, YANG Zhenghao, ZHANG Xianggang, et al. Research progress on intensification of gas-liquid mass transfer in CO₂ capture process[J]. *Petroleum Processing and Petrochemicals*, 2024, 55(2): 64-74.
- [25] 谭天恩, 奚梅. 化工原理 下[M]. 4 版. 北京: 化学工业出版社, 2013: 26-39.
TAN Tianen, DOU Mei. Principles of chemical engineering (Volume 2)[M]. 4th ed. Beijing: Chemical Industry Press, 2013: 26-39.
- [26] 徐寅, 金保昇. 烟气喷淋脱碳数值模拟及其特性分析[J]. *热力发电*, 2021, 50(12): 169-178.
XU Yin, JIN Baosheng. Numerical simulation and characteristic analysis for flue gas spray decarbonization[J]. *Thermal Power Generation*, 2021, 50(12): 169-178.
- [27] 曲江源, 齐娜娜, 关彦军, 等. 湿法烟气脱硫塔内传递与化学反应过程 CFD 模拟[J]. *化工学报*, 2019, 70(6): 2117-2128.
QU Jiangyuan, QI Nana, GUAN Yanjun, et al. CFD simulation of transfer and chemical reaction process in wet flue gas desulfurization tower[J]. *CIESC Journal*, 2019, 70(6): 2117-2128.
- [28] 陶迎, 谢建, 钟渝, 等. 基于计算流体动力学的喷淋塔除酸效果数值模拟研究[J]. *系统仿真技术*, 2024, 20(4): 358-364.
TAO Ying, XIE Jian, ZHONG Yu, et al. Numerical simulation of the effect of acid gas removal via spray tower based on computational fluid dynamics[J]. *System Simulation Technology*, 2024, 20(4): 358-364.
- [29] 徐寅. 喷淋活化氨溶液脱除二氧化碳的试验及数值模拟研究[D]. 南京: 东南大学, 2017: 70-72.
XU Yin. Experimental and modeling investigations of ammonia-based CO₂ capture activated by piperazine[D]. Nanjing: Southeast University, 2017: 70-72.
- [30] 方立军, 刘洪锬, 曹通, 等. 双接触液柱塔氨水吸收二氧化碳实验研究[J]. *锅炉技术*, 2016, 47(6): 67-71.
FANG Lijun, LIU Hongkun, CAO Tong, et al. Experimental research on CO₂ capture using ammonia solution in double-contact liquid column tower[J]. *Boiler Technology*, 2016, 47(6): 67-71.

(责任编辑 李园)