科学通报 2026 年 第 71 卷 第 26 期: 6255 ~ 6272
评 述
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

面向胺吸收法CO_2捕集的过程模拟及效益评价研究进展

高凡翔, 宋亚伟, 林志雄, 师进文*, 刘茂昌, 敬登伟, 郭烈锦

西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 西安 710049

* 联系人, E-mail: jinwen_shi@mail.xjtu.edu.cn

2026-01-04 收稿, 2026-03-27 修回, 2026-03-27 接受, 2026-03-30 网络版发表
国家自然科学基金(52576229)资助

摘要 胺吸收法是最具商业化前景的燃烧后捕集(post combustion carbon capture, PCC)技术, 但对占地空间和公用工程需求较大, 因此目前仍处于工业示范和商业化早期阶段. 过程模拟技术效率高且成本和风险可控, 有望助力胺吸收法PCC加速实现广泛商业化. 本文从过程系统工程视角出发, 系统综述了胺吸收法PCC技术的研究进展. 首先剖析了工艺特征从填料塔(packed bed, PB)结合单胺溶剂向节能配置或旋转填料床(rotating packed bed, RPB)结合新型胺溶剂的演进趋势, 阐述了基于双膜理论、溶质渗透理论和表面更新理论的通用建模原则, 归纳了五种模型类型及优缺点. 之后重点分析了基于PB和RPB的胺吸收法PCC模拟研究现状: 前者在稳态过程特性分析和技术-经济-环境效益评价方面取得了大量成果, 但动态模拟和中试及工业级验证案例仍显不足; 后者目前主要聚焦使用乙醇胺溶剂的小尺寸RPB的建模与参数分析, 在工艺集成设计与全局优化、替代溶剂开发与适用性评估等方面存在较多研究空白. 最后提出应通过高效低能耗溶剂开发、精确过程模型构建、全生命周期综合效益评价等研究, 推进胺吸收法PCC的商业化进程.

关键词 CO_2捕集, 化学吸收, 过程模拟, 传质强化, 效益评价

全球社会正面临日益严峻的环境问题, 包括地表温度、海洋热量、海冰面积等在内的多项气候变化指标在近年来不断创下新的纪录, 如全球平均地表温度较工业化前升高1.1 ℃[1]. 这与温室气体以前所未有的速度释放到大气造成的全球变暖密切相关. 过去三十年间, 以CO_2当量计算的温室气体排放量增长超过40%[2]. 大气CO_2水平的急剧增长主要归因于人为活动, 特别是煤炭、石油和天然气等化石燃料的燃烧. 其中, 化石燃料电厂是CO_2排放的主要贡献者, 这凸显了电厂低碳化转型的重要性. 一种可行途径是使用核能、太阳能和风能等清洁能源替代化石燃料发电. 清洁能源发电可以避免或极低地排放CO_2, 但其目前难以满足可持续发电对低成本、按需供电等方面的要求[3]. 因此, 即便预计电力系统未来将逐步转向使用清洁电力, 化石燃料电厂出于以下优势仍会被保留并发挥关键作用: (1) 快速响应电力峰值需求的短期变化; (2) 为波动和不确定的清洁能源发电提供备用支持; (3) 降低规模化发电成本. 另一种可行途径是捕集、利用或储存化石燃料电厂排放的CO_2(carbon capture, utilization and storage, CCUS)[4]. CCUS技术可将CO_2制备为合成气、液体燃料等化学品, 也可将CO_2直接用于强化采油、采气或永久封存于地下, 为应对气候危机提供多样化且具有商业吸引力的解决方案.

在诸多CCUS技术中, 燃烧后捕集(post combustion carbon capture, PCC)因具有广泛的烟气适应性和易与现有设施集成等优点备受青睐. 胺溶剂化学吸收技术长期以来一直是PCC策略的支柱, 其商业化进程在PCC乃至CCUS所有类型技术中处于领先地位. 然而,

引用格式: 高凡翔, 宋亚伟, 林志雄, 等. 面向胺吸收法CO_2捕集的过程模拟及效益评价研究进展. 科学通报, 2026, 71: 6255–6272
Gao F, Song Y, Lin Z, et al. Progress in process simulation and comprehensive benefit evaluation for amine absorption-based CO_2 capture (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 6255–6272, doi: 10.1360/CSB-2026-0016

© 2026《中国科学》杂志社

基于胺溶剂化学吸收的PCC(胺吸收法PCC)在规模扩大和推广应用中仍面临两大障碍: 昂贵的成本支出和额外的能源需求. 前者与胺吸收法PCC采用的巨大填料塔(packed bed, PB)有关. 例如, 一座处理能力为10000 m^3/h的燃煤PCC工厂配备的PB吸收器和PB再生器直径分别为1.5 m和1.3 m, 高度分别为22 m和11 m[5]. 这些大尺寸PB会转化为高昂的资本成本, 在总投资中占比超过70%[6]. 额外的能源需求则源自溶剂再生. 据报道, 使用乙醇胺(monoethanolamine, MEA)溶剂捕集1 kg CO_2一般需要3 MJ以上的能量[7]. 这意味着需要从发电厂蒸汽轮机中间级提取大量蒸汽, 导致发电量和电厂效率受到严重损失[8]. 上述挑战显著增加了胺吸收法PCC项目获取技术、资金等关键资源的难度, 导致其商业化进程推进缓慢.

一些研究提出创新溶剂配方、改进工艺配置以及优化过程控制等方法降低PCC的能耗. 在溶剂开发领域, 已有大量实验与理论研究对新型溶剂的物理化学性质及其与CO_2的相互作用机制进行了深入剖析, 但相关研究总体处于实验室阶段[9]. 工艺配置改进(如级间冷却、富液分流)的节能效益已获得初步证实, 但在实际工厂采用这些配置往往面临是否会限制工厂的灵活性、操作是否更复杂等质疑[10]. 优化运行参数和控制策略可以使系统在各种约束条件下达到最佳性能, 但现有研究大多针对基准工况和稳态运行, 基于PCC或其与电站集成系统的动态特性研究总体比较匮乏. 另外, 上述方法难以降低PCC系统的占地空间和成本. 过程强化(process intensification, PI)技术为这一问题提供了解决方案. 旋转填料床(rotating packed bed, RPB)是基于超重力场的PI设备, 利用高速旋转产生的数十甚至百倍于重力的离心力将液体快速洒布于环形填料中, 能够有效扩大气液接触面积、加快相界面更新, 从而实现传质强化和体积缩小[11]. RPB还具有灵活的操作性, 可在维持原有操作或运行控制方案的基础上直接替代PB强化PCC[12]. 尽管如此, RPB大规模应用仍受制于尚未成熟的放大路径和稀缺的工艺集成经验.

考虑到实验存在时间周期长、人力成本高和风险较大等不确定因素, 模拟在解决上述问题中的应用日益增加. 过程模拟技术借助计算机构建描述过程特性的数学模型并进行求解, 能够以低成本、低风险且高效快捷的方式实现对PCC涉及的各类单元操作规律与行为的预测, 对于工艺设计和优化、经济环境效益评估等具有重要意义[13]. 然而, 现有关于胺吸收法PCC技术的综述主要聚焦于胺吸收剂配方设计和特性分析、工艺类型辨析和关键性能比较以及前景预测和政策法规制定等主题, 尚未出现从系统工程视角出发探讨过程模拟技术对推动胺吸收法PCC发展的贡献[14,15]. 这阻碍了对该领域核心技术瓶颈与未来发展方向的清晰认知, 也不利于跨学科研究成果的整合与转化.

为了应对上述问题, 本文首先通过分类比较不同的CO_2捕集技术, 明确了胺吸收法PCC技术的优缺点和商业化前景. 之后, 从胺吸收法PCC的工艺特征演进方向出发, 总结了胺溶剂选择、单元设备和工艺建模、基于模型的工艺设计以及效益分析等研究现状. 最后, 分析了胺吸收法PCC模拟研究存在的局限性和未来发展趋势, 以期为PCC和其他CO_2捕集技术的进步和商业化提供参考和支持.

1 燃烧后捕集(PCC)技术路线分析

由于化石燃料的燃烧过程涉及多个阶段, 因此提出在不同的燃烧阶段实施CO_2捕集, 即燃烧前捕集、富氧燃烧和燃烧后捕集. 具体而言, 燃烧前捕集工艺首先进行燃料气化/重整获得合成气, 然后利用水气变换反应增加合成气中CO_2的比例[16], 最后通过各种物理和化学吸收过程分离CO_2并获得富氢合成气. 这种气体可作为燃料用于朗肯和布雷顿联合循环电厂. 在富氧燃烧路线中, 化石燃料在高纯度氧气(>90%)而非空气中燃烧, 因此产生的烟气几乎仅含水和高浓度CO_2(65%~80%), 通过简单的冷凝和敲除液态水便可获得高浓度CO_2流[17]. 燃烧后捕集是一种典型的“末端”CO_2分离技术, 通常布置在脱硫、脱氮、除尘和冷却等环节之后. 含有CO_2和其他杂质的烟气与溶剂逆流进入吸收器, 脱除CO_2的烟气经水洗涤后直接排空, 富含CO_2的吸收剂在经历再生过程后可重回吸收器循环使用[4]. 每种捕集方法都在不同的操作条件下运行, 显示出独特的优势和挑战, 如表1所示[9]. 尽管燃烧前和富氧燃烧捕集技术各有其优点, 但二者难以在各自的优缺点间实现平衡. 燃烧前捕集虽然能同步生成氢燃料, 但无法摆脱使用大规模辅助设备; 富氧燃烧虽然易实现高捕集率, 但需对现有设备进行大幅度改造且空气分离成本高昂. 这些难点阻碍了燃烧前和富氧燃烧的商业化推广. 与之相比, 燃烧后捕集技术在商业应用方面最为成熟[18]. 一方面, 燃烧后捕集具有一个非常引人注目的优势: 无需重大修改便可在已有的电厂或工业系统中集成, 且

表 1 不同CO_2捕集方法的技术特点[9]

Table 1 Technical characteristics of different CO_2 capture methods[9]

描述	燃烧前捕集	富氧燃烧	燃烧后捕集
待脱碳气CO_2浓度(%)	15~40	75~80	3~20
待脱碳气酸性组分	硫化合物	硫氧化物(SO_x)、硫化氢(H_2S)	氮氧化物(NO_x)、SO_x、H_2S、CO_2
燃烧介质	蒸汽/空气	高纯氧气	空气
燃烧温度(℃)	中等(700~1300)	高(约2000)	低(400~800)
压力	高(20~30 atm)	低(约1 atm)	低(0.15~1 atm)
设备尺寸	中等尺寸	小尺寸	大尺寸
典型能耗(GJ/t_{CO_2})	3.35	4.05	4.14
成本(\$/t_{CO_2})	34~63	52	46~74
优点	可产生氢燃料; 与研究设施高度集成; 改造工程量适中	烟气CO_2浓度极高易于分离; 污染物少; 操作范围广	技术成熟; 改造工程量少; 应用规模广且经验较丰富
缺点	水气变化和压缩过程能耗高; 需大量辅助设备; 缺乏应用经验	空气分离设备投资高; 改造工程量大; 扩大规模困难	再生过程能耗高; 空间需求高; 初始投资大
维护保养	需关闭整个工业系统	需关闭整个工业系统	无需关闭工业系统

允许在不全面检修现有设备的情况下进行技术升级, 从而节省时间和资源[19]. 另一方面, 通过持续的研究和技术改进, 燃烧后捕集面临的主要挑战有望彻底或基本解决. 例如, 再生过程的高能耗可以通过节能优化或改良吸收剂来缓解、大尺寸的设备可以通过过程强化技术或降低脱碳水平来缩小等[11].

PCC处理的烟气主要由CO_2、H_2O和N_2组成. 因此, 分离技术的选择很大程度上取决于烟气的物化性质和工艺条件, 譬如流量、温度、压力、杂质和CO_2浓度等. 如图1所示, 这些技术包括吸收、吸附、生物固碳、膜分离和低温分离[20]. 吸收法是目前最常见且商业上可行的CO_2分离技术, 其分为两类: (1) 物理吸收, 通过改变温度和压力实现吸收与再生(吸收发生在高压低温下); (2) 化学吸收, 利用温度控制可逆酸碱反应来完成吸收与再生(吸收在低温下进行)[21]. 化学吸收通常采用有机胺、氨水和碳酸盐等碱性溶液, 物理吸收则采用聚乙二醇二乙醚、低温甲醇、N-甲基吡咯烷酮等. 另外, 离子液体是近年来新兴的吸收溶剂, 在吸收能力和热稳定性方面展示出极大潜力, 并且具有环保特性[22]. 利用范德华力或化学键从气源中分离CO_2的方法称为吸附法, 包括物理吸附和化学吸附[23]. 物理吸附基于沸石、活性炭等, 通过加压吸附CO_2和降压/真空来解吸CO_2(变压/真空吸附). 化学吸附利用固态胺或碱金属碳酸盐等在低温下吸附CO_2和高温下释放CO_2的特性完成吸附与解吸[24]. 生物固碳技术利用微生物从烟气中吸收CO_2并将其转化为生物质[25]. 光合生物特别是海洋微藻被视作理想的CO_2转化器, 因为它们相比陆地植物无需占用额外耕地且对高浓度CO_2具有显著的耐受性[26]. 尽管微藻培养成本较高, 但其光合作用可促进碳酸钙沉淀用于增加碳汇[27]. 基于膜的分离取决于气体组分和膜材料之间的相互作用差异, 这使某些成分能够选择性地通过膜[28]. 膜分离技术在碳捕集工厂中的实施及成本主要取决于膜材料, 通常由聚砜、聚环氧乙烷等聚合物及其改性材料、气体分子筛等制备[21]. 低温分离法通过对混合气多次进行冷凝处理使其中的CO_2发生相变并分离[29].

追求高效和具有成本效益的PCC需要持续的创新、技术进步和对这些不同方法的全面理解. Davoodi等人[30]、刘克峰等人[31]对国内外采用不同燃烧后捕集路线的工程项目进行了详细调研, 发现离子液体吸收法和低温分离法还处于实验室规模的开发阶段, 吸附法、膜法和生物固碳技术已进入到中试规模的示范阶段. 最受青睐的是化学吸收法, 特别是基于胺溶剂的化学吸收法, 其在一些商业规模示范项目中获得了初步应用. 这与以下事实相关: 胺吸收法PCC对各类气源(燃煤/燃气电厂烟气、工业过程废气等)均有良好的适应性, 并且易于扩大规模和实现高捕集率(> 90%). 尽管该方法中吸收剂再生的能量需求很高, 长期运行还存在吸收剂降解、腐蚀等问题, 但大量关于先进吸收剂、节能工艺和强化方法的报道展示出解决这些问题的潜力[10]. 总之, 应对胺吸收法PCC面临的复杂挑战需要学术研究者、相关从业人员和政策制定者的共同努力, 过程模拟技术凭借低成本、低风险、高效率等优点将在其中发挥关键作用.

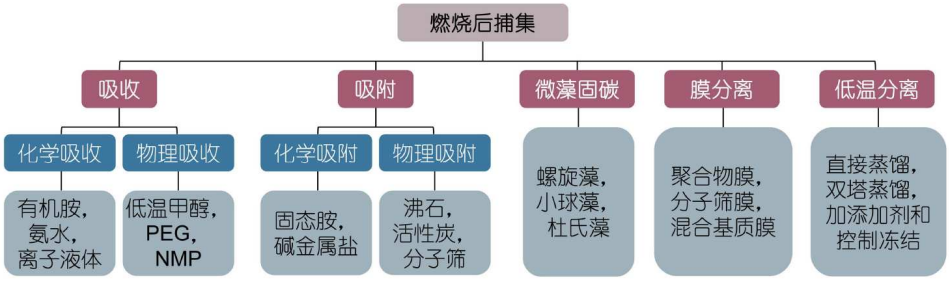


图 1 (网络版彩色)燃烧后捕集技术分类[20]
Figure 1 (Color online) Classification of post-combustion capture technology[20]

2 胺吸收法PCC技术演进和建模原则

2.1 基于固定填料床(PB)的传统PCC

传统PCC工艺指为MEA或其他胺溶剂开发的基于PB的吸收/再生工艺. 其中, 使用30 wt% MEA水溶液的传统PCC工艺被称为基准PCC工艺, 其通常被用于和对传统PCC实施任何溶剂或流程修改的改进PCC工艺进行对比. 图2展示了简化的基准PCC工艺流程[9]: 来自某种能源利用或工业过程的烟气在吸收塔中与CO_2负载为0.24~0.32 mol/mol贫溶剂溶液(贫液)逆流接触. 初始温度约40 ℃的贫液吸收烟气中的CO_2后最高升温至60 ℃. 含有较少CO_2的“干净”烟气由吸收塔顶部流出, 经水洗涤后排空. CO_2负载为0.4~0.5 mol/mol的富溶剂溶液(富液)从吸收塔底部离开, 途经交叉换热器预热后进入再生塔. 再沸器提供了其余的再生热, 使富液中的CO_2在高温(100~120 ℃)和较高压(1.5~2 atm)下得以释放, 它们夹杂着水蒸气和少量溶剂离开再生塔顶部, 在经过进一步的多级压缩冷却环节后被运输至永久埋存点或收集利用. 再生后的贫液通过交叉换热器与来自吸收塔的富液换热后返回吸收塔, 形成循环回路.

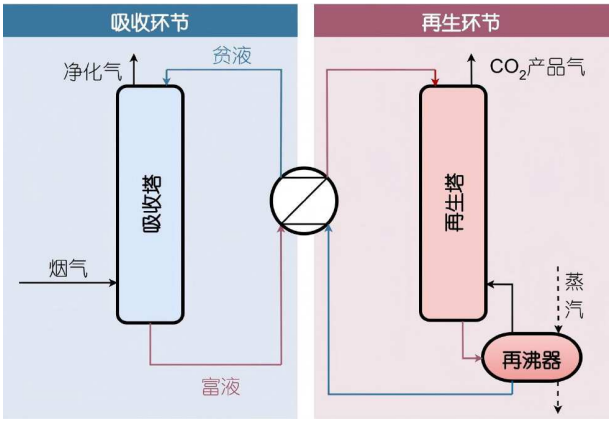


图 2 (网络版彩色)胺吸收法基准PCC工艺简化示意图[9]
Figure 2 (Color online) Simplified schematic diagram of baseline amine-based PCC process flow[9]

2.2 使用旋转填料床(RPB)代替PB强化PCC的驱动力

传统PCC技术已获得大量研究并具备工业化应用条件. Oko等人[32]总结了将PCC装置集成到实际发电厂的示范试验. Nessi等人[18]从溶剂和工艺的演变历程出发, 详细梳理了全球37个不同地点的PCC实验设施、中试和商业工厂. 实验设施和中试工厂的成功运行为模型验证提供了宝贵的实验数据, 也促使业界尝试在商业规模部署PCC. 典型的案例是世界上首个从燃煤烟气捕集CO_2的边界大坝CCS(CO_2 capture and storage)项目以及世界上CO_2捕集规模最大(截至2020年)的佩特拉诺瓦项目[33,34]. 需要注意的是, 这两个项目均在基准PCC的基础上实施了改进, 包括使用定制的低能耗溶剂、吸收器级间冷却、机械蒸汽压缩、热集成等. 这些措施代表了改进PCC的典型方向——新型溶剂开发和节能配置设计, 其虽然有利于降低能耗并节省运营成本, 但也易增加腐蚀/堵塞的风险或使运行/控制变得更复杂. 另外, 这些改进仍难以降低传统PCC高昂的初始投资成本, 不利于PCC技术的广泛商业化[6]. PI技术为解决上述问题提供了新思路, 其已被确定可在维持生产能力的同时大幅(数十倍)缩小系统体积, 因此具有降低投资成本的潜力[11].

Reay等人[35]将PI定义为“任何导致更小、更清洁、更安全、更节能技术的工程开发”. 不同的应用场景催生了PI技术向系列化发展, 包括使用强化场(离心、电磁、微波等)、整合多个工序、精简设备结构规模等.

如图3(a)所示，RPB是目前已知的具有最佳传质能力的设备，这与RPB的结构特征有关[11]. 根据气体流动方向的不同可将RPB分为逆流型、并流型和错流型三种，其中逆流型RPB因能维持气液两相间的最大浓度差，在提升传质效率方面更具优势[36]. 图3(b)展示了逆流型RPB的基本结构[37]. 环形填料安装在两个圆盘之间，圆盘又与转轴相连，填料、圆盘和转子均安装在外壳中. 电机为转轴提供了旋转的动力，由此可产生数百倍于重力的离心力，即超重力(HiGee). 液相在离心力作用下由填料内周径向向外流动，并扩散分裂成微小的液滴、丝或膜等液元，气相则在外部施加的压力梯度下由填料外周径向向内流动，因此在填料内实现了气液逆流接触. 气液相界面在这一过程中会不断更新且面积获得扩大，最终实现相间传质的强化.

在胺吸收法PCC过程中，吸收或解吸CO_2的过程会发生极快可逆化学反应，意味着这是一种传质受限(反应动力学阻力<传质阻力)过程，这与RPB强化传质的特点非常契合. 最关键的是，优异的传质效率使RPB处理相同气量所需的填料体积大幅降低，这不仅有利于减少材料、采购等资本支出，还为空间受限场景(如船舶)实施CO_2捕集提供了解决方案. 与PB相比，RPB还在以下方面具有优势：(1) 溢流极限更高，适用于需要溶剂在短时间内与大流量烟气接触的情况[38]；(2) 具有广泛的溶剂适应性，特别是能够处理高黏度和强腐蚀性的浓缩溶剂[18]；(3) 保持灵活的操作性，使用RPB无需复杂的辅助设备或改变原有流程[12]；(4) 良好的自清洁性，旋转有效降低了RPB发生堵塞的概率[39]. 鉴于此，使用RPB替代PB有望实现更高效、更低能耗、更灵活的PCC.

2.3 面向胺吸收法PCC的建模原则

由于实验研究的时间和资金成本较高且面临场地限制，通过模拟来评估工艺可行性或预测过程性能对PCC的大规模应用至关重要. 胺吸收法PCC工艺的关键设备——PB或RPB中会发生强烈的气液传质和化学反应，可以用平衡级模型或非平衡级(速率级)模型进行描述. 平衡级模型假设离开任一塔板的气相和液相均处于热力学平衡状态，然而实际情况下这种平衡仅出现在气液相界面上[40]. 为了弥补这种偏差，Murphree效率被提出用于修正平衡级模型，但其往往采用经验值. 因此，使用平衡级模型模拟胺吸收法PCC可能导致不准确的结果. 速率级模型是平衡级模型的扩展，在气相和液相主体平衡的基础上考虑了气液界面的热质传递和液膜/相动力学反应，能为胺吸收法PCC过程提供更准确的预测[41].

目前有三种对流传质理论适用于速率建模：双膜理论、溶质渗透理论和表面更新理论[42]. 其中，双膜理论的应用最为广泛，其主要内容为[43]：(1) 气相和液相逆流接触，在气液界面两侧分别存在一层稳定的气膜和液膜，溶质以扩散方式从气相主体依次通过气膜、相界面和液膜进入液相主体；(2) 相界面处传质阻力为零且达到相平衡；(3) 所有的传质阻力集中在两层膜上，两相主体没有传质阻力，即浓度梯度为零. 根据双膜理论，气相主体中的CO_2通过气膜扩散至相界面，而后大

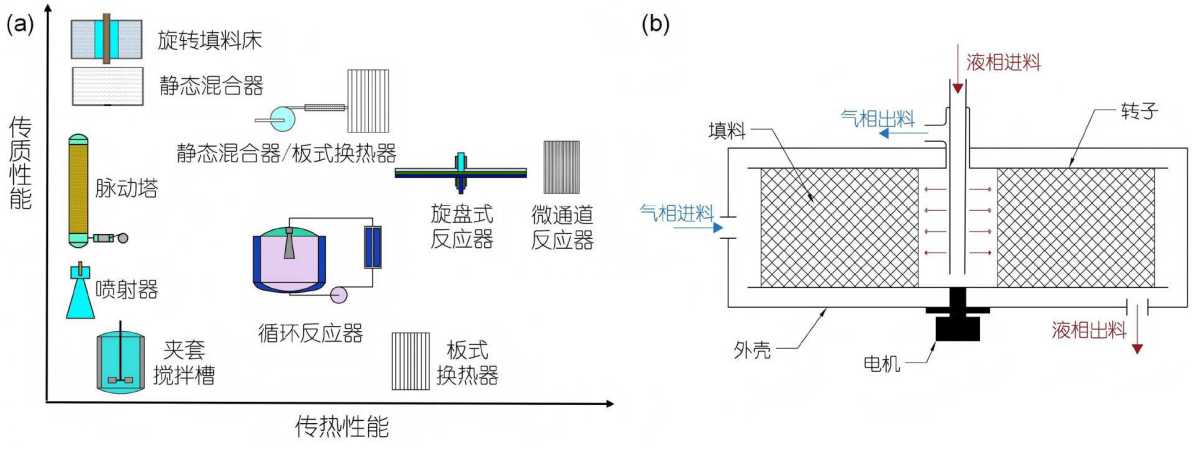


图 3 (网络版彩色)PI设备示意图. (a) 热质传递能力比较[11]；(b) 逆流型RPB的横截面结构[37]

Figure 3 (Color online) Schematic diagram of PI devices. (a) Comparison of heat and mass transfer capabilities[11]; (b) cross-sectional structure of counter-current RPB[37]

部分CO_2在液膜中与胺溶剂发生化学反应被吸收, 小部分CO_2通过液膜扩散进入液相主体, 图4(a)形象展示了这一过程[44]. CO_2扩散进入液相主体与胺溶剂进行反应的过程可以通过三种机制进行描述: 两性离子机制、三分子机制和碱催化水合机制[45]. 对于具有快速反应动力学的溶剂如MEA和哌嗪(piperazine, PZ), 可假设这些反应过程近似达到平衡. 对于与CO_2反应缓慢的溶剂, 如二乙醇胺(diethanolamine, DEA)、N-甲基二乙醇胺(methyldiethanolamine, MDEA)则需考虑考虑反应动力学[46].

胺法PCC的严格速率建模需要考虑电解质热力学、溶液化学、反应动力学、气液两相流动、界面热质传递等的耦合, 但也需在可用数据量、计算代价与预测精度之间寻求平衡. 因此, 根据现有研究对反应、传质等采取的假设细节, 将模型复杂度总体划分为5个水平, 模型的准确性随复杂度的增加而提高, 如图4(b)所示[47]. 沿着横坐标向右移动意味着考虑反应动力学, 向上移动代表考虑传质阻力. 平衡级模型分为两类, 其中I类假设每一级的反应阻力为零, II类进一步考虑了反应动力学. 速率级模型分为三类, I类仅考虑了传质阻力, II类和III类模型则进一步考虑了体相反应动力学. 其中, II类模型使用了增强因子来计算液膜化学反应对传质的影响, 但该法仅适用于伪一阶反应体系[48]. III类速率级模型最为复杂, 因为其同时考虑了传质阻力、电解质热力学、体相反应动力学以及液膜反应引起的传质加速.

3 基于PB模型的胺吸收法PCC技术研究

3.1 使用PB进行PCC的胺溶剂选择

PCC使用的典型吸收剂为有机胺, 其主要由烷醇胺或烷胺组成. 根据与氨基相邻的碳原子上氢原子的数量可将有机胺划分为伯胺、仲胺和叔胺.

MEA是一种典型的伯胺, 与CO_2反应生成氨基甲酸盐化合物, 当在100~140°C下加热时氨基甲酸盐会分解并释放CO_2, 从而实现CO_2的捕获和富集. 然而, 基于MEA溶剂的PCC工艺缺点也很明显: 由于MEA与CO_2的反应热较高, 工艺再生能耗高达3.7~3.9 GJ/t_{CO_2}. 虽然一些研究将MEA与其他低比热容的溶剂复配后可将再生能耗降至3 GJ/t_{CO_2}以下, 但这是以吸收速率和效率为代价实现的[49]. 最关键的是, 有研究证明氨基甲酸盐化合物的分解热约2.12 GJ/t_{CO_2}, 在解吸热中的占比约为68%, 这意味着MEA法PCC工艺的能耗下探空间非常有限[50]. 另外, MEA与空气中的氧气接触时容易降解和挥发, 作为伯胺其碱性也很强, 对管道和设备的耐腐蚀性要求较高. 另一种典型溶剂是叔胺MDEA, 其最大优势在于反应热、显热和蒸发热较低, 因此被视作低能耗吸收剂[38]. 这主要得益于MDEA与CO_2反应仅生成质子化胺和碳酸氢盐, 其中碳酸氢盐的分解热(约1.39 GJ/t_{CO_2})远小于氨基甲酸盐[51]. MDEA在吸收容量和稳定性方面也具有优势. 然而, MDEA对CO_2的吸收速率远小于MEA, 这也是单MDEA溶液长期主要用于天然气脱硫而非工业脱碳的原因[52].

混合胺技术结合了不同有机胺的优点, 可以通过优化胺的混合比例在实现低再生能耗的同时维持较高的吸收速率[53]. 表2总结了混合胺溶剂的六大分支[54]. 第一个分支是最常见的将MEA与各种叔胺混合, 该法将MEA的高吸收速率与叔胺的低解吸热和大吸收容量等诸多优点结合在一起, 同时抵消了MEA再生能耗高、吸收容量小与叔胺吸收速率较慢等缺点. 第二个分支是将PZ与各种类型的叔胺或K_2CO_3等混合, 因为PZ具有比MEA更快的CO_2反应动力学, 通过混合还可避免PZ溶剂带来的沉淀和毒性危害等问题[55]. 2-氨基-2-甲基-1丙醇(2-amino-2-methyl-1-propanol, AMP)是一种空间位阻胺, 具有比叔胺更高的吸收容量和更低的解吸温度, 但吸收速率低于伯胺[56]. 因此, 一些研究者以AMP作为基胺开发联胺或三胺混合物(如AMP + PZ、MEA + AMP + PZ), 致力于在高气体负荷下提高吸收速率, 使其更适合实际工业应用, 由此形成了第三个分支[57]. 第四个分支旨在探明各种叔胺的物理化学性质(分子结构、动力学或碱性等)与吸收/再生性能(CO_2吸收速率、平衡溶解度、热负荷等)的相关性来实现吸收剂的快速开发[58]. 第五个分支开始尝试开发一套全面的、涵盖各种单胺的“吸收/再生”参数以便在一致的水平上比较不同胺类, 这种方法随后被扩展到混合胺溶液[59]. 上述五个分支的研究重点始终是“热负荷导向分析”, 特别是研究各种能耗来源的贡献如吸收热、显热和蒸发潜热等来发现具有节能降本潜力的混合溶剂. 第六个分支的核心是将“协同效应(即同时促进CO_2的吸收和解吸)”应用于“双溶剂”或“三溶剂”体系. 另外, 该分支的研究内容也包括使用第五个分支的吸收/再生参数分析来全面评估混合胺溶剂的性能[60].

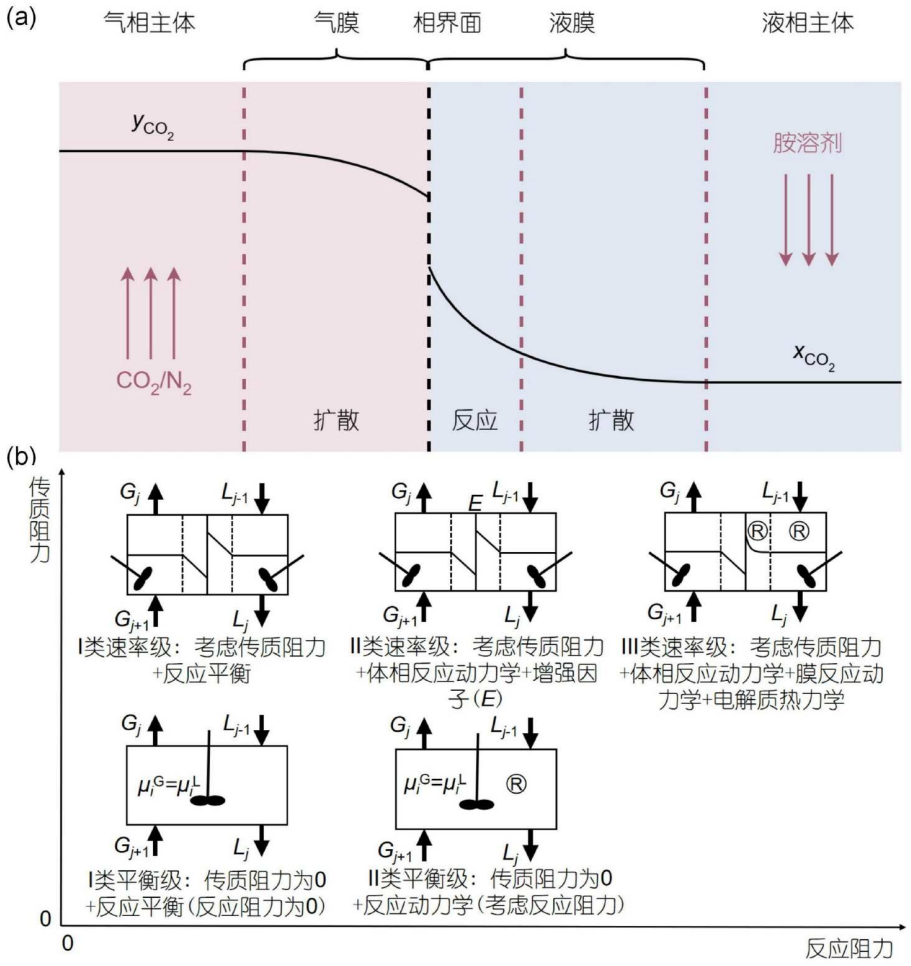


图 4 (网络版彩色)PCC建模理论和复杂度. (a) 双膜理论原理图[44]; (b) 模型类型图[47]

Figure 4 (Color online) PCC modeling theory and complexity. (a) Schematic diagram of two-film theory[44]; (b) diagram of model types[47]

表 2 胺溶剂混合改进方法分类[54]

Table 2 Classification of improved amine solvent mixing methods

类型	研究重点	代表性溶剂体系	起始时间
1	基于MEA的混合胺开发	MEA + 各种叔胺	2005年
2	基于PZ的混合胺开发	PZ + 各种叔胺、PZ + K_2CO_3	2005年
3	基于AMP的混合胺开发	AMP + 二乙烯三胺(diethylenetriamine, DETA)、AMP + DETA + PZ	2016年
4	基于溶剂结构-吸收/再生性能相关性的快速筛选法	MDEA、DEEA、1-二乙氨基-2-丙醇、3-二甲基氨基-1-丙醇	2016年
5	从单胺到混合胺的吸收/再生参数全面研究	AMP、丁基乙醇胺(2-(butylamino)ethanol, BEA)、AMP + BEA	2017年
6	基于“协同效应”的混合胺开发	MEA + DEA	2018年

尽管混合胺溶剂通过调控不同胺的比例可实现优势互补, 但其能耗在PCC规模扩大后难以保持在低水平, 因为需对全部溶剂进行再生. 为此, 提出了基于有机胺配制的相变吸收剂, 其在吸收CO_2后会产生液-液或液-固分相, 从而仅需再生富集CO_2的富相, 大幅降低再生能耗. 例如, Li等人[61]开发了一种二乙氨基乙醇(diethylaminoethanol, DEEA)混合羟乙基乙二胺的相变吸收剂, 其最低再生能耗为2.58 GJ/t_{CO_2}, 比30 wt% MEA溶剂降低了32%. 离子液体由于低挥发性、高稳定性和结构可调等优势, 也被视作极具潜力的PCC吸

收剂, 其通常与有机胺复配以提高吸收能力[62]. 然而, 与传统胺溶剂相比, 这两类新型溶剂的实际工业应用均面临严峻挑战. 相变吸收剂分相的稳定性受工况波动影响较大, 且富相的黏度在追求高吸收容量时会显著上升, 导致传质阻力增大和能耗增加. 离子液体自身黏度大且成本高昂, 目前仍处于实验室研究阶段.

3.2 基于PB的PCC建模和模拟

目前, 对基于PB的PCC过程进行建模和模拟的研究已经非常丰富, 这些研究大体围绕以下对象开展: 单个PB吸收器或PB再生器、基于PB的全流程PCC工艺、全流程PCC与上游环节(烟气净化或电厂)的集成工艺. 其中, 绝大多数研究使用速率级模型, 少数研究出于简化建模的目的使用了平衡级模型. 譬如, Mores等人[63]开发了一个平衡级模型用于模拟和优化MEA溶剂吸收CO_2的过程, 其中Murphree效率被关联为增强因子和液相物性的函数以反映热力学非理想性. 平衡级模型在一些情况下(反应阻力可以忽略或初步评估操作条件对过程的影响)是被允许的, 但速率级模型通常能给出更现实的预测. Lawal等人[64]对基于速率和平衡两种方法进行动态建模和模拟的结果比较也证明了这一点.

得益于计算技术的进步和过程模拟软件的商业化发展, 严格的速率建模框架已被嵌入Aspen Plus等软件中, 为构建PB的III类速率级模型(图4(b))提供了便利. Zhang等人[65]利用Aspen Plus的速率建模框架对MEA法PCC工艺进行建模, 并使用中试工厂的实验数据完成了模型验证. 他们还展示了薄膜离散化和流动模型选项对模型输出的影响. Razi等人[66]在Aspen Plus中构建了MEA法PCC工艺模型, 并评估了不同速率相关性组合对模型预测压降、CO_2捕集水平和温度分布等的影响, 指出应慎重选择速率相关性. Oh等人[67]使用Aspen Plus构建了集成550 MW超临界燃煤电厂和MEA法PCC工艺的模型, 其中吸收器和再生器均采用速率级模型并由中试规模实验数据进行验证. 他们进一步将模型放大至商业规模以评估不同热集成方案对降低电厂净效率损失的影响.

虽然商业软件中的速率建模框架仅需研究者输入关键操作和设计参数, 但在动态建模、检验新提出的传质或动力学相关性等方面仍存在局限. 因此, 一些研究者尝试在数值计算环境中编程底层数学模型, 即自定义速率级模型以满足不同的目的. Kucka等人[68]利用Aspen Custom Modeler(ACM)建立了MEA法PB吸收器的III类速率级模型, 其将反应动力学源项纳入膜区的传热传质方程和体相区的平衡方程中联立求解, 展示出预测中试工厂性能的准确能力. 然而, CO_2吸收过程中包括传质和化学反应在内的复杂控制现象需要以多个非线性偏微分方程组描述, 这导致严格的自定义建模工作量大且求解耗时. 因此, 多数自定义建模研究选择构建简化的速率级模型, 典型方法是使用增强因子替代反应动力学源项, 如图4(b)的II类速率级模型所示. Khan等人[69]为MEA溶剂吸收CO_2的过程开发了II类速率级模型, 通过对速率相关性的敏感性分析发现Onda等人[70]提出的相关性可使预测值更接近测量值, 但也注意到该模型对PB底部液相CO_2浓度和温度的估计偏差较大, 这可能与模型忽略了溶剂蒸发有关. 近年来, 机器学习(machine learning, ML)由于具有强大的处理高维、非线性关系的能力, 在PCC的建模和优化中获得越来越多的应用. 例如, Ashraf等人[71]构建了人工神经网络(artificial neural network, ANN)与支持向量机(support vector machine, SVM)模型以预测MEA法PB吸收器的CO_2捕集水平, 经外部数据集验证发现ANN模型的预测与泛化能力更优. 通过敏感性分析识别出贫液温度和流量为核心影响因素, 并将ANN模型嵌入非线性规划环境求解得到了最佳操作区间.

上述PB建模和模拟研究均围绕MEA溶剂体系进行, 但MEA法PCC面临高再生能耗和溶剂损耗等问题. 替代溶剂在解吸热、CO_2选择性、CO_2反应动力学、抗降解性等方面展现出优于MEA溶剂的潜力, 因此针对替代溶剂的PCC模拟受到了广泛关注. Otitoju等人[72]通过Aspen Plus的RadFrac模块为使用PZ的PCC过程开发了一个速率级模型. 在利用中试工厂的数据完成模型验证后, 他们将该模型扩大至商业规模, 发现PCC工艺总能耗需求仅为3.56 GJ/t_{CO_2}, 远小于基准PCC的5.34 GJ/t_{CO_2}. Alalaiwat等人[73]在Aspen HYSYS中建立了PCC工艺的速率级模型以评估不同配比的MDEA + PZ溶剂, 该模型准确复现了澳大利亚一座试验工厂的运行数据. 结果表明, PCC工艺采用该混合溶剂代替30 wt% MEA溶剂后可节省约36.8%的再生能耗. 机器学习方法也可用于替代溶剂的高效筛选和开发. Hosseinifard等人[74]构建了融合机器学习分类与回归的双模块预测模型, 经多算法对比, 优选梯度提升分类器完成了溶剂初筛, 再采用基于网格搜索的随机森林回归模型实现了对候选溶剂再生能耗的精准预测,

其误差经Aspen HYSYS验证仅为1.3%, 最终确定综合性能最佳的溶剂为MEA. 他们[75]还利用多种机器学习模型预测并优化阿巴丹电厂PCC装置的胺溶剂选择, 发现随机森林模型表现最佳. 进一步开展了基于Aspen HYSYS的模拟和经济分析, 发现二甘醇胺是最具成本效益的选择, 其总公用工程成本比MEA降低了35.76%. 总之, 替代溶剂在降低PCC工艺能耗或成本方面具有关键作用, 但多数新型溶剂由于热力学数据的缺失导致难以构建准确的预测模型, 应进一步加强这类研究.

3.3 基于PB的PCC效益评价

效益评价旨在考察PCC工艺的热力学性能(如再生能耗、㶲效率)、技术经济性能(如年度总成本、捕集成本)以及环境影响(如碳足迹), 特别是量化操作参数优化、新型溶剂开发和节能配置设计等改进技术对PCC商业化的促进作用.

操作参数优化是提高PCC综合效益的直接手段. Abu-Zahra等人[6]对使用MEA溶剂的吸收和再生过程进行了技术经济分析. 通过优化贫液负载、胺浓度和再生压力将PCC能耗降低了0.9 GJ/t_{CO_2}, 并获得了最佳工艺参数组合. 为了降低在电厂实施PCC引入的额外成本, Arias等人[76]以年度总成本(total annual cost, TAC)为目标对使用MEA溶剂的PCC工艺进行了敏感性分析和设计优化, 确定了各单元的最佳尺寸和操作条件. 研究显示, 富液、贫液和烟气的温度对TAC非常敏感. Mongstad技术中心联合AspenTech专家团队核算了550 MWe燃气电厂PCC的成本基准(使用30 wt% MEA溶剂), 发现其TAC为4700万$, CO_2捕集成本为47 \$/t_{CO_2}[77].

采用替代溶剂或节能配置也需要通过效益评价确立其在PCC中实施的可行性. Oh等人[78]将五种针对PB再生器的改进配置用于基准PCC工艺(见2.1节), 这些改进配置结合了贫蒸汽压缩器(lean vapor compressor, LVC)、富液分流器(rich solvent split, RSS)和再生器顶部压缩器(stripper overhead compressor, SOC)中的两个或多个, 其最多可使再生能耗降低32.8%、运营成本节省10.2%. 然而, 这些改进配置会增加PCC的资本成本. Zhang等人[79]对使用AMP + PZ的PCC工艺进行了建模和放大, 并进一步研究了集成级间冷却吸收器(inter-cooling absorber, ICA)或LVC或RSS的PCC工艺的能耗表现. 结果表明, 单独实施ICA、LVC和RSS分别使能耗减少了6.7%、2.7%和8.5%, 而LVC和RSS、ICA和LVC, 以及ICA和RSS的组合实施分别实现了9.3%、8.5%和14%的节能效果, 所有改进同时实施可使PCC工艺实现最多15.2%的能耗节省. 另外, 溶剂替代和流程配置改进的组合有望为PCC工艺带来更显著的效益提升. Bu和Qiu[80]研究了三种溶剂(MEA、PZ和MDEA + PZ)对PCC工艺热力学、经济和环境性能的影响, 发现MDEA + PZ溶剂可使PCC实现最高的㶲效率(47%)、最低的成本(210 \$/t_{CO_2})和最少的CO_2排放(452 kg/h). Otitoju等人[72]评估了PZ替代MEA、ICA和高级闪蒸再生器(advanced flash stripper, AFS)三种改进方案对商业规模(550 MWe燃气烟气)PCC工艺技术和经济性能的影响, 并和基准PCC工艺进行了对比. 结果显示, 使用30 wt% PZ替代30 wt% MEA可将PCC工艺总能耗降低33%. 另外, 使用40 wt% PZ和AFS配置的PCC工艺实现了最低能耗2.76 GJ/t_{CO_2}和最低CO_2捕集成本34.65 \$/t_{CO_2}. Dubois和Thomas[81]将富液循环吸收(rich solvent recycle, RSR)、RSS和贫/富蒸汽压缩器(lean/rich vapor compressor, L/RVC)分别应用于三种PCC工艺中: MEA、PZ、MDEA + PZ, 通过对每种工艺配置进行参数优化和比较, 发现使用10 wt% MDEA + 30 wt% PZ和RSS的PCC工艺再生能耗最低, 为2.39 GJ/t_{CO_2}.

虽然几乎所有研究均强调了各类改进技术对于强化PCC效益的积极意义, 但在实际PCC工厂中实施改进仍需审慎权衡改进后设备复杂度增加带来的投资与运维风险, 并加强工艺净减排效益(考虑自身排放)和环境影响等的评估.

4 基于RPB模型的胺吸收法PCC技术研究

4.1 使用RPB强化PCC的胺溶剂选择

传统PCC的适用溶剂已经获得了广泛研究, 但目前关于不同溶剂在RPB中的适用性研究还较少. 虽然传统PCC和RPB强化PCC的溶剂筛选在很多因素考量方面具有相似性, 但二者也存在关键区别: 溶剂在RPB中的停留时间不到PB的10%[11]. 因此, 筛选适用于强化PCC的溶剂需进一步审查以下因素: (1) 快速CO_2反应动力学: 这决定了捕集CO_2的速率, 特别是对于RPB中气液接触和反应时间较短的情况, 快速反应动力学显得尤为重要. (2) 高CO_2吸收容量: 这与捕集一定量CO_2所需的溶剂流量和显热要求相关, 更高的CO_2吸收容量意味着在相同处理烟气负荷下贫/富液的CO_2负载之差更大, 有利于减少溶剂循环量, 进而使再生能耗下降.

(3) 低吸收热: 这是影响再沸器热负荷的重要因素, 吸收热越低所需的解吸热越少. (4) 优良理化性质: 溶剂的热/氧化降解和腐蚀性使PCC面临额外补充溶剂或更换管道等问题. 另外, 高黏度的溶剂会增加溶剂循环泵功甚至引起管道堵塞. 这些都会增加运营和维护成本. 因此, 需要开发高稳定性、低腐蚀性和适当黏度的溶剂. (5) 环境经济友好: 溶剂与外界环境存在交互, 应认真评估溶剂的毒性和挥发性等以避免二次污染. 溶剂成本也是重要的衡量因素, 这与基于替代溶剂的强化PCC工艺在商业规模的可行性直接有关.

Wang等人[11]对上述因素进行了全面评估, 并为这些因素的相对重要性提供了建议. 具体而言, 反应动力学、吸收容量和吸收热被建议作为评估强化PCC适用溶剂时首要关注的因素, 溶剂成本虽然不可忽略, 但其对溶剂潜力的判断影响最小. 这些建议缩小了强化PCC的溶剂选择范围, MEA这一具有快速反应动力学并在传统PCC中常被作为基准溶剂的溶剂率先被尝试用于强化PCC. Jassim等人[82]在一个小型RPB中测试了基于MEA溶剂的吸收和解吸过程, 研究了贫液温度、转速和MEA浓度对吸收和传质效果的影响. Lin等人[83]研究了在RPB中使用MEA水溶液脱除CO_2的可行性, 并在RPB中将MEA与氢氧化钠和AMP水溶液进行了比较. 他们发现使用MEA溶液的强化PCC拥有最高的捕集效率. Lin等人[84]在另一项工作中将PZ作为促进剂分别与MEA和AMP混合, 这些混合溶剂和单MEA、单AMP溶剂均被用于RPB吸收过程的可行性测试, 通过比较它们在不同浓度下对RPB的捕集效率、传质单元高度及富液CO_2负载的影响得出, 最佳溶剂为12 wt% PZ + 18 wt % MEA. MDEA作为低能耗溶剂也被用于RPB研究. Qian等人[85]从实验和理论出发探究了RPB中MDEA溶液吸收CO_2和H_2S的过程, 测得H_2S和CO_2的吸收效率分别为99.76%和9.50%. 原因是MDEA和H_2S之间的反应是瞬时反应, 而MDEA和CO_2之间反应相对较慢, 仅约1秒的气体停留时间可以满足H_2S吸收的需要但不足以吸收CO_2. 为此, Zhan等人[86]研究了RPB中MDEA + PZ水溶液吸收H_2S和CO_2的过程, 发现H_2S和CO_2的吸收效率分别可达99.98%和96.51%. 另外, 胺浓度、液体流量、温度和转速是影响这一过程的重要因素.

4.2 基于RPB的强化PCC建模和模拟

4.2.1 用于强化吸收/再生的RPB反应器建模和模拟

由于RPB和PB的结构差异, 二者的建模和模拟也大有不同. 对PB建模时通常认为传质只发生在填料上, 而在RPB建模中, 传质被认为发生在填料和转子与外壳之间的空间上. 另外, 与将PB建模为具有恒定横截面积和恒定气液流速的圆柱不同, 如图5所示, RPB应被建模为具有不同横截面积以及不同气液流速的锥形柱, 气相和液相传质系数沿径向发生变化[87].

由于RPB型式多样且尚未在PCC中获得广泛应用, 过程模拟软件并不包含专用于模拟RPB的模块. 因此, RPB的建模和模拟主要通过修改过程模拟软件的已有模块或在数值计算环境中编程数学模型进行. 前者通常采用Visual Fortran子例程自定义适用于超重力场的相关性, 并对其进行编译链接以替换Aspen Plus中RadFrac模块的默认相关性. 另外, 应根据等体积和等流通截面积原则将RPB的圆环填料尺寸(内径、外径和轴向高度)转化为圆柱填料尺寸(直径和高度), 满足RadFrac模块对几何尺寸的输入要求. 这一方法充分利用了过程模拟软件内置的严格速率建模框架, 允许研究者通过相对简单的编程构建RPB的III类速率级模型. Joel等人[88]采用这一方法对使用MEA溶剂的RPB吸收器进行了建模和验证, 并考察了CO_2捕集水平对转速、MEA浓度和溶液温度的敏感性. 他们[89]进一步评估了两组相关性组合(传质系数、相界面积和持液量)对CO_2捕集水平预测精度的影响. 另外, Joel等人[90]沿用相同的方法对RPB再生器进行了建模和验证, 获得了溶剂流量、转速和再沸器温度对再生效率和再生能耗的影响. 这一系列研究还指出, 使用RPB吸收器和RPB再生器代替传统PB, 可将其体积分别缩小至原来的1/12和1/9.691.

尽管修改已有模块的方法展示出足够的预测精度, 但其采用的填料尺寸等价转化预计会导致预测误差随RPB尺寸扩大而增大. 这一方法也不便于检验不断提出的新速率相关性、动力学模型等对超重力场的适用性, 因此多数基于RPB的PCC模拟研究采用自定义建模. 为了降低建模复杂度, 相关工作几乎均选择构建基于增强因子的II类速率级模型. Kang等人[91]根据双膜理论在gPROMS中为RPB构建了一个针对30 wt% MEA溶剂的II类速率级模型, 并指出基于表观反应速率常数的增强因子对于准确预测至关重要. 他们利用该模型研究了不同相关性组合对传质系数和CO_2脱除水平等的预测精度. Borhani等人[92]利用gPROMS软件对使用浓缩MEA溶剂(55 wt%和75 wt%)的RPB吸收器进行了II类速率建模, 首先比较了八种反应动力学模型

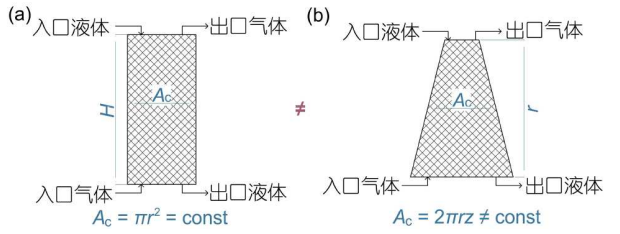


图 5 (网络版彩色)PB建模(a)与RPB建模(b)的差异[87]
Figure 5 (Color online) Differences between PB modeling (a) and RPB modeling (b)[87]

和五种增强因子模型对RPB模型预测结果的影响，发现动力学模型对预测精度的影响远大于增强因子模型，通过正交测试确认转速是影响脱碳水平的最主要因素. 之后，他们[93]开发并验证了RPB再生器的II类速率级模型，进一步利用其研究了转速、再沸器温度、富液流量和压力对再生能耗和再生效率的影响. Oko等人[94]使用在gPROMS中开发的MEA法II类速率级模型验证了RPB中的液相温度可能会显著升高的猜想. 作者认为RPB也需要中间冷却，并提出若干种针对RPB吸收器的中冷器设计方案. Otitoju等人[95]利用ACM构建了RPB的II类速率级模型，其对浓缩MEA溶剂的CO_2捕集水平预测误差小于6%. Rabiee等人[96]在MATLAB中为使用30 wt% MEA溶剂的RPB吸收器开发了II类速率级模型，并初步展示了将MEA替换为MDEA和PZ后RPB的CO_2吸收效率变化. Esmaeili等人[97]使用MATLAB软件首次针对MDEA + PZ水溶液吸收CO_2的过程进行了RPB的II类速率建模，模型预测误差小于7%. 他们通过参数分析发现转速和PZ浓度对CO_2吸收效率的影响最为显著.

ML在近年来受到了RPB建模和模拟研究的重点关注，其被视作数学建模的替代或增强方法，有利于提高模型预测精度和求解速率. Shukla等人[98]利用五种ML算法对RPB吸收器进行了建模，通过与文献报道的CO_2吸收效率数据对比发现高斯过程回归模型精度最优，进一步通过SHAP(shapley additive explanations)分析和优化确定了最大化CO_2吸收效率的操作参数. 他们[99]还利用MDEA + PZ在RPB中吸收CO_2的实验数据评估了数学模型与两种ML模型的准确性，发现基于高斯过程的深度核学习模型准确性更高，但数学模型也提供了极为接近的预测. 为了确保模型的准确性，一些ML建模研究首先开发数学模型以获得更多数据，再将构建的ML模型进行验证，并用于指导未来的工作.

需要指出的是，由于RPB实验数据(尤其是新型溶剂相关)的报道极不充分，无论采用何种方法进行建模，模型的工业适用性验证均存在局限. 未来应同步加强高质量实验的开展和数学建模与ML的融合.

4.2.2 强化PCC的全流程工艺开发与规模扩大

除了探索单独的RPB吸收器或RPB再生器的潜力外，对集成工艺展开设计与评价可以更深入地了解部署RPB对PCC的影响. Wang等人[11]提出了一种简化的强化PCC工艺，包括RPB吸收器、配备旋转盘再沸器的RPB再生器以及印刷电路板式换热器. 他们初步估计强化PCC工艺的成本为传统PCC工艺的六分之一. Im等人[100]在gPROMS平台对RPB吸收器和RPB再生器进行了建模与集成设计，并通过对工艺总能耗实施严格优化明确了操作变量的调整方向. 然而，该研究未展示这种集成工艺应对大规模CO_2源的能耗表现.

为了检验将RPB应用于实际环境的能力，一些工作开始关注如何将RPB工艺扩展到工业规模进行评估. Agarwal等人[101]提出了一种系统的RPB放大设计方法，其有效性通过四项案例研究进行了详细说明. Otitoju等人[95]改良了该方法中关于RPB填料外半径的设计，通过引入传质单元面积解决了极坐标下截面积的非均匀变化问题. 作者将改良设计法用于研究使用RPB吸收器从250 MWe燃气电厂烟气捕集CO_2的技术经济性. 尽管如此，基于Agarwal等人[101]的方法仍主要用于在实验室或中小工业规模开展初步设计，仅能满足避免液泛的基本需求，过度扩大易导致不切实际的压降和尺寸. 为此，Jung等人[102]提出了一种优化驱动的同步设计方法，通过在第一性原理数学模型中集成成本优化问题以同时获得最具经济效益的单元设计和操作参数. 需要注意的是，这种同步设计法的可靠性受限于过程和成本模型的准确性，但这些模型的工业适用性极度缺乏验证. 除了探索放大设计方法外，将多个RPB或RPB和PB串联或并联使用(联用)也有望扩大RPB的应用规模，如表3所示[103].

根据表3这些研究成果可初步判断此类过程具有以下积极方面: (1) 允许中小型RPB通过与PB集成来承担更大规模的CO_2源，避免了RPB中移动机械部件的规模限制[105]; (2) 通过调整塔器间的气体容量分配以适应市场波动带来的运营成本变化有望实现最佳经济性[106]; (3) 多塔器的组合可进一步增强PCC分离酸性组分的能力，这或使胺吸收法PCC实现净零排放(从烟气中捕获95%~99%甚至100%的CO_2)成为可能[110,111].

表 3 联用工艺配置研究总结

Table 3 Summary of research on combined process configuration

来源	研究方法	研究对象	主要内容
Yu等人[104]	实验室规模实验 数学建模和Aspen Plus建模与模拟	包含RPB吸收器或PB吸收器的八种组合配置	从富液CO_2负载、处理气量、CO_2捕集量和再生能耗等多个角度评价了不同配置的性能
Thiels等人[105]	实验室规模实验 ACM建模和模拟	由PB吸收器和RPB吸收器组成的串联配置	根据收集自实验的CO_2摩尔分数验证了ACM中的RPB模型. 对串联配置与单个吸收器在填料体积和节能方面进行了比较
Qian等人[106]	数学建模	PB和RPB吸收器串/并联	探索了最小化年度总成本的配置及不同电价对气量分配和成本效益的影响
Chamchan等人[107]	中试规模实验 ACM和Aspen Plus建模和模拟	可切换PB或RPB作为吸收器的PCC工艺	比较了PB和RPB各自的捕集效率、传质单元高度和再生能耗. 基于实验数据验证了Aspen Plus中的PB模型和ACM中的RPB模型
Pahlavan等人[108]	ACM建模和模拟	配备两个RPB吸收器和一个PB再生器的天然气精炼工艺	提出了两种用于在富集过程中代替PB的双RPB工艺方案. 进行了敏感性分析(转速、RPB压力和贫液流量)和成本评估
Gao等人[109]	Aspen Plus联合Fortran建模和模拟	PB和RPB吸收器串联的PCC工艺	使用MDEA + PZ溶剂对单独使用PB或RPB吸收器以及串联使用二者的PCC工艺进行了放大设计与技术经济评价

4.3 基于RPB的强化PCC效益评价

RPB缩小设备尺寸的优势已非常明确, 但其对PCC效益的强化仍存在争议. 根据Akram等人[112]的实验报道, 一座使用35 wt% MEA的中试PCC工厂将PB吸收器替换为RPB吸收器后, 反而导致更低的CO_2吸收效率和能耗表现. 因此, 一些RPB研究声称的强化效益亟需通过全面的技术-经济-环境评价来量化, 并特别注意与PB的对比.

Otitoju等人[95]评估了面向250 MWe燃气烟气PCC的RPB吸收器技术经济性能, 发现使用55 wt% MEA的RPB吸收器体积仅为PB吸收器的1/4~1/11, 使用75 wt% MEA时RPB吸收器体积可进一步降至PB吸收器的1/5~1/13. 另外, 使用RPB吸收器代替PB吸收器可节省3%~53%的资本支出和8.5~15 \$/t_{CO_2}的捕集成本. Jung等人[102]提出了一种尺寸和操作参数的同步设计方法并将其用于中试规模(100 t/d) RPB工艺设计, 通过经济分析证明同步设计法相比传统设计法可节省9.4%~12.7%的捕集成本. 然而, 研究发现使用30 wt% MEA溶剂可能导致RPB的捕集成本超过PB. Jung等人[113]还探索了最具成本效益的RPB应用规模, 发现当烟气CO_2浓度高于14.5%且选择高浓度MEA溶剂(50 wt%)时, 100~200 t/d是最合适的. 作者还指出当烟气CO_2浓度低于4%时, RPB实现成本效益存在设计挑战. Shamsi等人[114]以甲醇生产石化厂火焰加热器的烟气CO_2为处理目标, 利用30 wt% DETA溶剂进行了RPB设计和技术-经济-环境效益评价, 得出使用CO_2捕集技术每年可避免2771 k\$的净碳税, CO_2捕集成本为12.3 \$/t_{CO_2}.

得益于传质强化和体积缩减, RPB在推动PCC实现节能降本减排方面具有极大潜力. 然而, 这种强化效益极度依赖于RPB设计. 随着RPB应用规模和场景的扩展, 应加快开发通用放大设计方法并完善综合效益评价框架.

5 胺吸收法PCC技术模拟研究的局限与展望

基于PB的传统PCC技术经过多年发展已基本成熟, 大量模型被开发用以深入了解在稳态条件下使用替代溶剂和节能配置的传统PCC过程. 然而, 多数模型的验证依赖实验室规模数据, 中试及工业级验证案例较少, 应推动在中试及以上规模开展实验研究. 另外, 集成PCC与电厂系统等烟气排放源的动态模拟相对较少, 未来应加强这部分工作.

与PB相比, RPB具有更强的传质性能、更低的液泛倾向、更广泛的溶剂适应性和更好的自清洁性, 这意味着使用RPB代替PB有望节省PCC的占地空间、能源消耗及相关成本支出. 然而, PCC对于RPB是一种新兴应用场景, 关于这一主题的研究在以下方面存在不足.

(1) 多数RPB研究局限于实验室规模的单独吸收/再生器应用, 难以对具有单元交互作用的PCC系统做出更现实的预测. 建议对RPB进行高效集成设计和全

局优化，深入了解其对PCC运行和控制的影响．另外，预计机器学习与传统建模技术的融合能有效提升预测精度和可解释性，在指导RPB规模扩大中发挥关键作用．联用多个RPB或PB代表了一种稳妥的规模扩大途径，未来应加强其设计、优化、评价等研究．

(2) 使用MEA溶剂的RPB已具备较高的技术成熟度，但其商业化仍受MEA的高能耗、强腐蚀和易挥发等难题困扰．建议评估其他新型溶剂在RPB中的应用，开发针对不同溶剂体系的精确过程模型，为使用RPB实现更高效、更节能的PCC寻找机会．这同时意味着需要通过基础实验持续完善传质和流体力学参数的预测相关性，并着重关注其对不同类型填料和溶剂体系的适用性．

(3) RPB的经济环境效益研究十分稀缺，这与目前尚未有报道披露实际RPB的详细成本和减排效果信息有关．建议采取分阶段扩大规模和模拟与实验互为验证的策略，基于有限实验数据开发模型指导面向工业规模的RPB实验，并在采买、建造、运行等各阶段严格分析性能指标与成本，为开发更精确且通用的过程与成本模型、实施生命周期碳足迹分析、进一步扩大应用规模等提供数据支持．

6 总结

尽管胺吸收法PCC凭借成熟度高、吸收速率快、烟气适应性强等优点在发电和工业领域获得了大量应用，但高再生能耗、溶剂降解与腐蚀等问题仍是制约其商业化的关键瓶颈．过程模拟技术可通过数学模型预测和优化PCC的单元操作性能，为上述问题提供了高效且低成本的解决途径．本文从过程系统工程视角出发，对胺吸收法PCC的溶剂筛选、工艺模拟与优化、工程放大设计及综合效益评价研究进行了系统梳理与分析，主要结论如下：

胺吸收法PCC的工艺特征由采用固定填料塔结合单胺溶剂向采用节能配置或旋转填料床结合新型胺溶剂演进．建模原则对于任一类型的胺吸收法PCC是通用的，其主要依据的传质理论包括双膜理论、溶质渗透理论和表面更新理论三种．根据对热质传递和反应动力学的不同假设可将建立的模型分为五种类型．

对于基于PB的传统PCC，已有大量模拟研究揭示了不同溶剂和工艺配置下的稳态过程特性和经济环境表现，具备相当高的技术成熟度．然而，多数模型验证依赖实验室数据，需要加快推进中试及工业级的试验示范和模型验证．对于基于RPB的强化PCC，其凭借RPB的传质强化能力实现了体积缩小，在节能、降本、减排方面具有巨大潜力．然而，当前研究多针对采用MEA的小尺寸RPB吸收/再生器进行建模和参数分析，在放大和集成设计、技术-经济-环境效益评价等方面存在大量研究空白．

胺吸收法PCC技术的未来在于通过优选溶剂并结合节能配置和过程强化方法，进一步降低对空间、材料、能耗和成本的需求．因此，应通过持续推进高效低能耗溶剂开发、精确过程模型构建、动态特性分析、集成工艺设计与优化以及全生命周期综合效益评价等研究，加速胺吸收法PCC技术的商业化进程，为火电、工业废气等领域的碳减排提供技术参考．

参考文献

1 Wang Y, Wang H, Cui P, et al. Disaster effects of climate change and the associated scientific challenges (in Chinese). Chin Sci Bull, 2024, 69: 286–300 [王岩, 王昊, 崔鹏, 等. 气候变化的灾害效应与科学挑战. 科学通报, 2024, 69: 286–300]

2 Minx J C, Lamb W F, Andrew R M, et al. A comprehensive and synthetic dataset for global, regional, and national greenhouse gas emissions by sector 1970–2018 with an extension to 2019. Earth Syst Sci Data, 2021, 13: 5213–5252

3 Nemmour A, Inayat A, Janajreh I, et al. Green hydrogen-based E-fuels (E-methane, E-methanol, E-ammonia) to support clean energy transition: a literature review. Int J Hydrogen Energy, 2023, 48: 29011–29033

4 Zhang Z, Wang T, Blunt M J, et al. Advances in carbon capture, utilization and storage. Appl Energy, 2020, 278: 115627

5 Enaasen Flø N, Knuutila H, Kvamsdal H M, et al. Dynamic model validation of the post-combustion CO_2 absorption process. Int J Greenh Gas Control, 2015, 41: 127–141

6 Abu-Zahra M R M, Niederer J P M, Feron P H M, et al. CO_2 capture from power plants. Int J Greenh Gas Control, 2007, 1: 135–142

7 Lee J H, Kim J H, Lee I Y, et al. Bench scale carbon dioxide recovery from the flue gas by monoethanolamine. J Chem Eng Jpn JCEJ, 2010, 43: 720–726

8 Zhang K, Liu Z, Wang Z, et al. Specific exergy consumption as an index for steam extraction scheme selection for CO_2 capture systems in coal-

fired power plants. Greenh Gases, 2016, 6: 275–287
9 Raganati F, Ammendola P. CO_2 post-combustion capture: a critical review of current technologies and future directions. Energy Fuels, 2024, 38: 13858–13905
10 Chen H, Zhang H, Yan Z, et al. Research progress and development trends of alkanolamine-based carbon capture technology. Separation Purification Tech, 2025, 378: 134755
11 Wang M, Joel A S, Ramshaw C, et al. Process intensification for post-combustion CO_2 capture with chemical absorption: a critical review. Appl Energy, 2015, 158: 275–291
12 Kvamsdal H M, Jakobsen J P, Hoff K A. Dynamic modeling and simulation of a CO_2 absorber column for post-combustion CO_2 capture. Chem Eng Processing-Process Intensification, 2009, 48: 135–144
13 De Tommaso J, Rossi F, Moradi N, et al. Experimental methods in chemical engineering: process simulation. Can J Chem Eng, 2020, 98: 2301–2320
14 Akinmoladun A, Tomomewo O S. Advances and future perspectives in post-combustion carbon capture technology using chemical absorption process: A review. Carbon Capture Sci Tech, 2025, 16: 100461
15 Gao F X, Liu Y, Zhang G Q, et al. Research progress of wet process synergistic desulfurization and decarbonization technology for coal-fired flue gas (in Chinese). Chem Ind Eng Prog, 2024, 43: 2324–2342 [高凡翔, 刘阳, 张贵泉, 等. 燃煤烟气湿法协同脱硫脱碳技术研究进展. 化工进展, 2024, 43: 2324–2342]
16 Chao C, Deng Y, Dewil R, et al. Post-combustion carbon capture. Renew Sustain Energy Rev, 2021, 138: 110490
17 Ma C, Li B, Chen D, et al. An investigation of an oxygen-enriched combustion of municipal solid waste on flue gas emission and combustion performance at a 8 MWth waste-to-energy plant. Waste Manage, 2019, 96: 47–56
18 Nessi E, Papadopoulos A I, Seferlis P. A review of research facilities, pilot and commercial plants for solvent-based post-combustion CO_2 capture: packed bed, phase-change and rotating processes. Int J Greenh Gas Control, 2021, 111: 103474
19 Sifat N S, Haseli Y. A critical review of CO_2 capture technologies and prospects for clean power generation. Energies, 2019, 12: 4143
20 Osman A I, Hefny M, Abdel Maksoud M I A, et al. Recent advances in carbon capture storage and utilisation technologies: a review. Environ Chem Lett, 2021, 19: 797–849
21 Li G, Xiao P, Xu D, et al. Dual mode roll-up effect in multicomponent non-isothermal adsorption processes with multilayered bed packing. Chem Eng Sci, 2011, 66: 1825–1834
22 Palomar J, Lemus J, Navarro P, et al. Process simulation and optimization on ionic liquids. Chem Rev, 2024, 124: 1649–1737
23 Karimi M, Shirzad M, Silva J A C, et al. Carbon dioxide separation and capture by adsorption: a review. Environ Chem Lett, 2023, 21: 2041–2084
24 Soo X Y D, Lee J J C, Wu W Y, et al. Advancements in CO_2 capture by absorption and adsorption: a comprehensive review. J CO_2 Utilization, 2024, 81: 102727
25 Ben-Mansour R, Habib M A, Bamidele O E, et al. Carbon capture by physical adsorption: materials, experimental investigations and numerical modeling and simulations – A review. Appl Energy, 2016, 161: 225–255
26 Guo B W, Li X, Zong B N, et al. Carbon fixation by microalgae to achieve CO_2 emission reduction and biomass valorization (in Chinese). Acta Petrol Sin (Petroleum Processing Section), 2023, 39: 668–678 [郭宝文, 李煦, 宗保宁, 等. 微藻固碳实现CO_2减排与生物质增值. 石油学报(石油加工), 2023, 39: 668–678]
27 Nakamura T, Senior C L. Recovery and sequestration of CO_2 from stationary combustion systems by photosynthesis of microalgae. Technical Report, Physical Sciences Inc., 2005
28 Kancherla R, Nazia S, Kalyani S, et al. Modeling and simulation for design and analysis of membrane-based separation processes. Comput Chem Eng, 2021, 148: 107258
29 Yousef A M, El-Maghlany W M, Eldrainy Y A, et al. New approach for biogas purification using cryogenic separation and distillation process for CO_2 capture. Energy, 2018, 156: 328–351
30 Davoodi S, Al-Shargabi M, Wood D A, et al. Review of technological progress in carbon dioxide capture, storage, and utilization. Gas Sci Eng, 2023, 117: 205070
31 Liu K F, Liu T R, Cai Y, et al. Progress in research and engineering demonstration of CO_2 capture technology (in Chinese). Chem Ind Eng Prog, 2024, 43: 2901–2914 [刘克峰, 刘陶然, 蔡勇, 等. 二氧化碳捕集技术研究和工程示范进展. 化工进展, 2024, 43: 2901–2914]
32 Oko E, Wang M, Joel A S. Current status and future development of solvent-based carbon capture. Int J Coal Sci Technol, 2017, 4: 5–14
33 Stephenne K. Start-up of world's first commercial post-combustion coal fired CCS project: contribution of shell cansolv to SaskPower Boundary Dam ICCS project. 12th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, 2014. 6106–6110
34 Vega F, Baena-Moreno F M, Gallego Fernández L M, et al. Current status of CO_2 chemical absorption research applied to CCS: towards full deployment at industrial scale. Appl Energy, 2020, 260: 114313
35 Reay D. The role of process intensification in cutting greenhouse gas emissions. Appl Therm Eng, 2008, 28: 2011–2019

36 Kantouros B, Kazepidis Panagiotis, Papadopoulos A I, et al. Investigating CO_2 absorption in rotating packed beds: development, validation, and operational analysis of a rate-based model. Chem Eng Trans, 2023, 103: 835–840

37 Llerena-Chavez H, Larachi F. Analysis of flow in rotating packed beds via CFD simulations—Dry pressure drop and gas flow maldistribution. Chem Eng Sci, 2009, 64: 2113–2126

38 Dhaneesh K P, Ranganathan P. A comprehensive review on the hydrodynamics, mass transfer and chemical absorption of CO_2 and modelling aspects of rotating packed bed. Separation Purification Tech, 2022, 295: 121248

39 Wang G Q, Xu Z C, Yu Y L, et al. Performance of a rotating zigzag bed—A new HIGEE. Chem Eng Processing-Process Intensification, 2008, 47: 2131–2139

40 Henley E, Seader J D. Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering. 1981, https://cir.nii.ac.jp/crid/1970023484880524303

41 Pandya J D. Adiabatic gas absorption and stripping with chemical reaction in packed towers. Chem Eng Commun, 1983, 19: 343–361

42 Gao X, Zheng C, Chiang P C, et al. Multi-pollutant Control for Flue Gases: Principles and Applications: Berlin: Springer, 2021

43 Wang M, Lawal A, Stephenson P, et al. Post-combustion CO_2 capture with chemical absorption: a state-of-the-art review. Chem Eng Res Des, 2011, 89: 1609–1624

44 Gao X, Zheng C, Chiang P C, et al. Pollutant control by absorption methods. In: Multi-pollutant Control for Flue Gases: Principles and Applications. Singapore: Springer, 2021. 199–279

45 Kollias L, Zhang D, Allec S I, et al. Advanced theory and simulation to guide the development of CO_2 capture solvents. ACS Omega, 2022, 7: 12453–12466

46 Zhang X, Zhang C F, Liu Y. Kinetics of absorption of CO_2 into aqueous solution of MDEA blended with DEA. Ind Eng Chem Res, 2002, 41: 1135–1141

47 Kenig E Y, Schneider R, Górak A. Reactive absorption: optimal process design via optimal modelling. Chem Eng Sci, 2001, 56: 343–350

48 Gaspar J, Fosbøl P L. A general enhancement factor model for absorption and desorption systems: a CO_2 capture case-study. Chem Eng Sci, 2015, 138: 203–215

49 Khan A A, Halder G N, Saha A K. Carbon dioxide capture characteristics from flue gas using aqueous 2-amino-2-methyl-1-propanol (AMP) and monoethanolamine (MEA) solutions in packed bed absorption and regeneration columns. Int J Greenh Gas Control, 2015, 32: 15–23

50 Chu F, Yang L, Du X, et al. CO_2 capture using MEA (monoethanolamine) aqueous solution in coal-fired power plants: modeling and optimization of the absorbing columns. Energy, 2016, 109: 495–505

51 Zheng Y Y. Study on thermodynamic model for CO_2 adsorption in aqueous N-methyldiethanolamine solution (in Chinese). Energy Chem Ind, 2015, 36: 48–53 [郑园园. N-甲基二乙醇胺吸收CO_2的热力学模型研究. 能源化工, 2015, 36: 48–53]

52 Qayyum A, Ali U, Ramzan N. Acid gas removal techniques for syngas, natural gas, and biogas clean up – A review. Energy Sources Part A-Recovery Utilization Environ Effects, 2024, 46: 13136–13159

53 Aghel B, Janati S, Wongwises S, et al. Review on CO_2 capture by blended amine solutions. Int J Greenh Gas Control, 2022, 119: 103715

54 Wu C, Huang Q, Xu Z, et al. A comprehensive review of carbon capture science and technologies. Carbon Capture Sci Tech, 2024, 11: 100178

55 Gao H, Liu S, Gao G, et al. Hybrid behavior and mass transfer performance for absorption of CO_2 into aqueous DEEA/PZ solutions in a hollow fiber membrane contactor. Separation Purification Tech, 2018, 201: 291–300

56 Ooi Z L, Tan P Y, Tan L S, et al. Amine-based solvent for CO_2 absorption and its impact on carbon steel corrosion: a perspective review. Chin J Chem Eng, 2020, 28: 1357–1367

57 Wai S K, Nwaoha C, Saiwan C, et al. Absorption heat, solubility, absorption and desorption rates, cyclic capacity, heat duty, and absorption kinetic modeling of AMP–DETA blend for post–combustion CO_2 capture. Separation Purification Tech, 2018, 194: 89–95

58 Muchan P, Saiwan C, Narku-Tetteh J, et al. Screening tests of aqueous alkanolamine solutions based on primary, secondary, and tertiary structure for blended aqueous amine solution selection in post combustion CO_2 capture. Chem Eng Sci, 2017, 170: 574–582

59 Prasongthum N, Natewong P, Reubroycharoen P, et al. Solvent regeneration of a CO_2-loaded BEA–AMP bi-blend amine solvent with the aid of a solid Brønsted $Ce(SO_4)_2/ZrO_2$ superacid catalyst. Energy Fuels, 2019, 33: 1334–1343

60 Narku-Tetteh J, Muchan P, Saiwan C, et al. Selection of components for formulation of amine blends for post combustion CO_2 capture based on the side chain structure of primary, secondary and tertiary amines. Chem Eng Sci, 2017, 170: 542–560

61 Liu F, Fang M, Dong W, et al. Carbon dioxide absorption in aqueous alkanolamine blends for biphasic solvents screening and evaluation. Appl Energy, 2019, 233-234: 468–477

62 Akinola T E, Oko E, Wang M. Study of CO_2 removal in natural gas process using mixture of ionic liquid and MEA through process simulation. Fuel, 2019, 236: 135–146

63 Mores P, Scenna N, Mussati S. Post-combustion CO_2 capture process: equilibrium stage mathematical model of the chemical absorption of CO_2 into monoethanolamine (MEA) aqueous solution. Chem Eng Res Des, 2011, 89: 1587–1599

64 Lawal A, Wang M, Stephenson P, et al. Dynamic modelling of CO_2 absorption for post combustion capture in coal-fired power plants. Fuel, 2009,

88: 2455–2462
65 Zhang Y, Chen H, Chen C C, et al. Rate-based process modeling study of CO_2 capture with aqueous monoethanolamine solution. Ind Eng Chem Res, 2009, 48: 9233–9246
66 Razi N, Svendsen H F, Bolland O. Validation of mass transfer correlations for CO_2 absorption with MEA using pilot data. Int J Greenh Gas Control, 2013, 19: 478–491
67 Oh S Y, Yun S, Kim J K. Process integration and design for maximizing energy efficiency of a coal-fired power plant integrated with amine-based CO_2 capture process. Appl Energy, 2018, 216: 311–322
68 Kucka L, Müller I, Kenig E Y, et al. On the modelling and simulation of sour gas absorption by aqueous amine solutions. Chem Eng Sci, 2003, 58: 3571–3578
69 Khan F M, Krishnamoorthi V, Mahmud T. Modelling reactive absorption of CO_2 in packed columns for post-combustion carbon capture applications. Chem Eng Res Des, 2011, 89: 1600–1608
70 Onda K, Takeuchi H, Okumoto Y. Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in packed columns. J Chem Eng Jpn JCEJ, 1968, 1: 56–62
71 Ashraf W M, Dua V. Machine learning based modelling and optimization of post-combustion carbon capture process using MEA supporting carbon neutrality. Digital Chem Eng, 2023, 8: 100115
72 Otitoju O, Oko E, Wang M. Technical and economic performance assessment of post-combustion carbon capture using piperazine for large scale natural gas combined cycle power plants through process simulation. Appl Energy, 2021, 292: 116893
73 Alalaiwat D, Khan E. Post-combustion carbon capture process modeling, simulation, and assessment of synergistic effect of solvents. Int J Greenh Gas Control, 2024, 135: 104145
74 Hosseinifard F, Setak M, Amidpour M. Integrating machine learning-based classification and regression models for solvent regeneration prediction in post-combustion carbon capture: an absorption-based case. Results Eng, 2025, 26: 104856
75 Hosseinifard F, Soufeh A M, Salimi M, et al. Reducing energy and economic costs in post-combustion carbon capture with intelligent amine selection system: a case study on the Abadan power plant. Energy Rep, 2025, 13: 1488–1507
76 Arias A M, Mores P L, Scenna N J, et al. Optimal design and sensitivity analysis of post-combustion CO_2 capture process by chemical absorption with amines. J Cleaner Production, 2016, 115: 315–331
77 Putta K R, Saldana D, Campbell M, et al. Development of CO_2 capture process cost baseline for 555 MWe NGCC power plant using standard MEA solution. In: Proceedings of the 16th Greenhouse Gas Control Technologies Conference (GHGT-16), 2022. 23–24
78 Oh H T, Ju Y, Chung K, et al. Techno-economic analysis of advanced stripper configurations for post-combustion CO_2 capture amine processes. Energy, 2020, 206: 118164
79 Zhang W, Chen J, Luo X, et al. Modelling and process analysis of post-combustion carbon capture with the blend of 2-amino-2-methyl-1-propanol and piperazine. Int J Greenh Gas Control, 2017, 63: 37–46
80 Bu P, Qiu Y. Simulation, and comparative energy, exergy, economic, and environmental analyses of utilizing different solvents for post-combustion CO_2 capture from flue gases. Appl Therm Eng, 2025, 269: 125923
81 Dubois L, Thomas D. Comparison of various configurations of the absorption-regeneration process using different solvents for the post-combustion CO_2 capture applied to cement plant flue gases. Int J Greenh Gas Control, 2018, 69: 20–35
82 Jassim M S, Rochelle G, Eimer D, et al. Carbon dioxide absorption and desorption in aqueous monoethanolamine solutions in a rotating packed Bed. Ind Eng Chem Res, 2007, 46: 2823–2833
83 Lin C C, Chen B C. Carbon dioxide absorption in a cross-flow rotating packed bed. Chem Eng Res Des, 2011, 89: 1722–1729
84 Lin C C, Lin Y H, Tan C S. Evaluation of alkanolamine solutions for carbon dioxide removal in cross-flow rotating packed beds. J Hazard Mater, 2010, 175: 344–351
85 Qian Z, Xu L B, Li Z H, et al. Selective absorption of H_2S from a gas mixture with CO_2 by aqueous *N*-methyldiethanolamine in a rotating packed bed. Ind Eng Chem Res, 2010, 49: 6196–6203
86 Zhan J, Wang B, Zhang L, et al. Simultaneous absorption of H_2S and CO_2 into the MDEA + PZ aqueous solution in a rotating packed bed. Ind Eng Chem Res, 2020, 59: 8295–8303
87 Neumann K, Gladyszewski K, Groß K, et al. A guide on the industrial application of rotating packed beds. Chem Eng Res Des, 2018, 134: 443–462
88 Joel A S, Wang M, Ramshaw C, et al. Process analysis of intensified absorber for post-combustion CO_2 capture through modelling and simulation. Int J Greenh Gas Control, 2014, 21: 91–100
89 Joel A S, Wang M, Ramshaw C. Modelling and simulation of intensified absorber for post-combustion CO_2 capture using different mass transfer correlations. Appl Therm Eng, 2015, 74: 47–53
90 Joel A S, Wang M, Ramshaw C, et al. Modelling, simulation and analysis of intensified regenerator for solvent based carbon capture using

rotating packed bed technology. Appl Energy, 2017, 203: 11–25
91 Kang J L, Sun K, Wong D S H, et al. Modeling studies on absorption of CO_2 by monoethanolamine in rotating packed bed. Int J Greenh Gas Control, 2014, 25: 141–150
92 Borhani T N, Oko E, Wang M. Process modelling and analysis of intensified CO_2 capture using monoethanolamine (MEA) in rotating packed bed absorber. J Cleaner Production, 2018, 204: 1124–1142
93 Borhani T N, Oko E, Wang M. Process modelling, validation and analysis of rotating packed bed stripper in the context of intensified CO_2 capture with MEA. J Industrial Eng Chem, 2019, 75: 285–295
94 Oko E, Ramshaw C, Wang M. Study of intercooling for rotating packed bed absorbers in intensified solvent-based CO_2 capture process. Appl Energy, 2018, 223: 302–316
95 Otitoju O, Oko E, Wang M. Modelling, scale-up and techno-economic assessment of rotating packed bed absorber for CO_2 capture from a 250 MWe combined cycle gas turbine power plant. Appl Energy, 2023, 335: 120747
96 Rabiee R, Shams A, Shabanian J, et al. Compartmental modeling of CO_2 absorption in a rotating packed bed. Chem Eng Processing-Process Intensification, 2024, 206: 110075
97 Esmaeili A, Tamuzi A, Borhani T N, et al. Modeling of carbon dioxide absorption by solution of piperazine and methyldiethanolamine in a rotating packed bed. Chem Eng Sci, 2022, 248: 117118
98 Shukla C, Mishra P, Talati I, et al. Machine learning modeling and optimization for the performance study of carbon capture in a rotating packed bed absorber with monoethanolamine solvent. Process Integr Optim Sustain, 2026, 10: 523–547
99 Shukla C, Vakharia V, Mishra P, et al. Comparison of rate-based and machine learning modeling for CO_2 capture in a rotating packed bed absorber. Sustain Chem Clim Action, 2025, 7: 100157
100 Im D, Jung H, Lee J H. Modeling, simulation and optimization of the rotating packed bed (RPB) absorber and stripper for MEA-based carbon capture. Comput Chem Eng, 2020, 143: 107102
101 Agarwal L, Pavani V, Rao D P, et al. Process intensification in HiGee absorption and distillation: design procedure and applications. Ind Eng Chem Res, 2010, 49: 10046–10058
102 Jung H, Park N, Lee J H. Evaluating the efficiency and cost-effectiveness of RPB-based CO_2 capture: a comprehensive approach to simultaneous design and operating condition optimization. Appl Energy, 2024, 365: 123251
103 Gao F X, Song Y W, Liu Y, et al. Configurationscreening of combined stationary/rotating packed beds using MDEA/PZ mixture from a techno-economic perspective for enhanced CO_2 capture. Sep Purif Technol, 2026, 398: 138171
104 Yu C H, Chen M T, Chen H, et al. Effects of process configurations for combination of rotating packed bed and packed bed on CO_2 capture. Appl Energy, 2016, 175: 269–276
105 Thiels M, Wong D S H, Yu C H, et al. Modelling and design of carbon dioxide absorption in rotating packed bed and packed column. IFAC-PapersOnLine, 2016, 49: 895–900
106 Qian Z, Chen Q, Grossmann I E. Optimal synthesis of rotating packed bed reactor. Comput Chem Eng, 2017, 105: 152–160
107 Chamchan N, Chang J Y, Hsu H C, et al. Comparison of rotating packed bed and packed bed absorber in pilot plant and model simulation for CO_2 capture. J Taiwan Institute Chem Engineers, 2017, 73: 20–26
108 Pahlavan M, Shahsavand A, Panahi M. Design and simulation of rotating packed beds for an industrial acid gas enrichment process. Fuel, 2024, 361: 130696
109 Gao F, Liu Y, Zhai B, et al. Intensified plant-scale post-combustion CO_2 capture based on piperazine-activated methyldiethanolamine solution via cascaded stationary and rotating packed beds. J Cleaner Production, 2025, 504: 145359
110 Landau M V, Vidruk R, Herskowitz M. Sustainable production of green feed from carbon dioxide and hydrogen. ChemSusChem, 2014, 7: 785–794
111 Michailos S, Gibbins J. A modelling study of post-combustion capture plant process conditions to facilitate 95–99% CO_2 capture levels from gas turbine flue gases. Front Energy Res, 2022, 10: 866838
112 Akram M, Gheit A, Milkowski K, et al. Comparison of conventional and process intensified next generation RPB absorbers for decarbonisation of the steel industry. Fuel, 2025, 388: 134484
113 Jung H, Park N, Lee J H. Optimizing economic feasibility of CO_2 capture processes with rotating packed bed (RPB): strategies for scale and modularization. J Cleaner Production, 2024, 479: 143998
114 Shamsi M, Towfighi Darian J, Afkhamipour M. A process intensification approach for industrial plant decarbonization: scale-up, techno-economic, and environmental assessment. Results Eng, 2025, 28: 107153

Summary for “面向胺吸收法CO_2捕集的过程模拟及效益评价研究进展”

Progress in process simulation and comprehensive benefit evaluation for amine absorption-based CO_2 capture

Fanxiang Gao, Yawei Song, Zhixiong Lin, Jinwen Shi*, Maochang Liu, Dengwei Jing & Liejin Guo

State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China
* Corresponding author, E-mail: jinwen_shi@mail.xjtu.edu.cn

Amine-based absorption is the most commercially promising post-combustion CO_2 capture (PCC) technology for carbon emission reduction. However, its large footprint requirement and high demand for utility services have restricted it to the industrial demonstration and early commercialization stages. Process simulation, characterized by high efficiency, controllable cost, and manageable risk, is regarded as a pivotal tool to accelerate the full commercialization of amine-based PCC. From the perspective of process systems engineering (PSE), this review systematically summarizes the research progress of amine-based PCC technology, with a focus on process evolution, modeling principles, current research status of typical simulation models, and future development directions.

The review first reveals the evolutionary trend of process configurations, from conventional packed beds (PBs) using single amine solvents to advanced configurations such as rotating packed beds (RPBs) coupled with novel amine solvents. The development trajectory highlights a shift towards intensified mass transfer and reduced equipment footprints. The general modeling principles, including the two-film theory, solution-diffusion theory, and surface renewal theory, were expounded, and the existing models were classified into five primary types according to varying assumptions of heat-mass transfer and reaction kinetics. A detailed analysis of the current research prospects reveals the different progress between PCC simulation studies based on PB and RPB. The traditional PCC based on PBs boasts high technical maturity, with extensive studies conducted on steady-state process characteristics and techno-economic-environmental benefits. Nevertheless, most model validations rely heavily on laboratory-scale data, and there remains a paucity of reports on dynamic simulation and pilot-scale or industrial-scale validation cases. In contrast, the RPB-based intensified PCC exhibits significant potential in volume reduction and cost control due to its excellent mass transfer intensification capability. However, current research on intensified PCC mainly focuses on modeling and parameter analysis of small-scale RPB absorbers/stripers using monoethanolamine (MEA) solvent, leaving substantial research gaps in aspects such as process integration design and global optimization, alternative solvent development, and applicability assessment.

In conclusion, although amine-based PCC has seen considerable application in power and industrial sectors due to its maturity, stable capture efficiency, and flue gas adaptability, key challenges including high regeneration energy, solvent degradation, and corrosion persist as critical bottlenecks to its commercialization. Process simulation serves as a viable pathway to address these issues by enabling predictive performance analysis and optimization. The future of amine-based PCC lies in reducing spatial, material, energy, and cost requirements through optimal solvent selection combined with configuration improvements and process intensification. To accelerate the commercialization process of amine-based PCC and provide more solid technical support for achieving global carbon reduction goals, the review proposes several key research directions: (1) developing high-efficiency, low-energy consumption solvents; (2) achieving accurate prediction of key mass transfer and hydrodynamic parameters; (3) enhancing dynamic characteristic analysis; (4) advancing integrated process design and optimization; and (5) implementing holistic life-cycle benefit evaluations encompassing technical, economic, and environmental dimensions. This review underscores the pivotal role of process systems engineering in bridging these gaps and guiding the development of next-generation, cost-effective amine-based PCC technologies.

CO_2 capture, chemical absorption, process simulation, mass transfer intensification, benefit evaluation

doi: 10.1360/CSB-2026-0016