

Praca dyplomowa inżynierska

Opracowanie modelu matematycznego reaktora przepływowego do produkcji metanolu z zielonego wodoru

Autor: Anna Białczak

Nr albumu: 311947

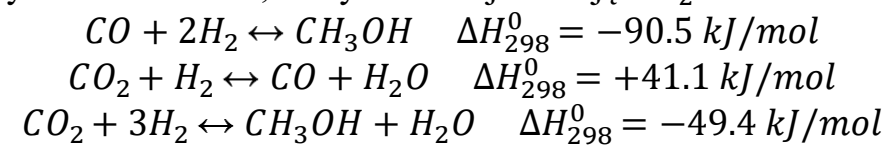
Promotor: dr inż. Michał Lewak

Rok akademicki: 2023/2024



Wprowadzenie

W związku z rozwojem infrastruktury i gospodarki wzrosła ilość odpadów, produktów ubocznych oraz dwutlenku węgla, co powoduje, że coraz częściej rozpatrywane są możliwości korzystania z odnawialnych źródeł energii. Jednym z rozwiązań jest wódór oraz metanol, które mają potencjał zostać bardzo ważnymi nośnikami energii. Dzięki tym składnikom można wytworzyć cykl produkcyjny przyjazny dla środowiska, który zredukuje emisję CO_2 .



Cel i zakres pracy

Celem niniejszej pracy była analiza publikacji związanych z tematyką zielonego wodoru oraz opracowanie modelu matematycznego reaktora przepływowego do produkcji metanolu. Wymagało to znajomości oprogramowania MATLAB, kinetyki procesu i nomenklatury z zakresu ekologii. Badano wpływ modyfikacji wartości wejściowych na zmienność otrzymywanych danych. Zakres pracy obejmuje:

- Analizę publikacji dotyczących zielonego wodoru;
- Zidentyfikowanie istotnych czynników, zależności między nimi a następnie przekształcenie ich w równania i algorytmy;
- Napisanie programów na podstawie reakcji opisujących proces otrzymywania metanolu;
- Przeprowadzenie symulacji numerycznych;

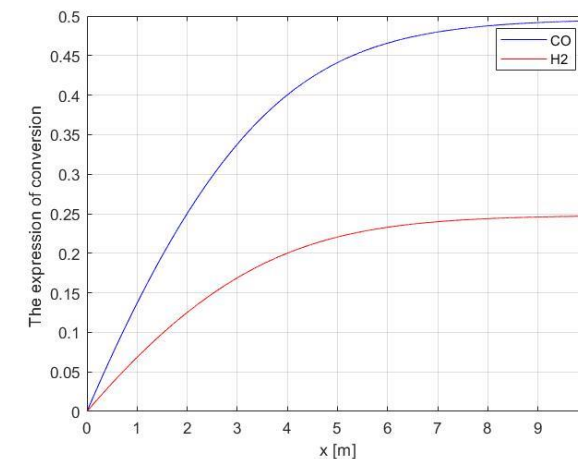
Modelowanie matematyczne

Model matematyczny został wykonany dla okresowego rurowego reaktora przepływowego z założeniem stanu ustalonego i braku akumulacji. Uzyskano równanie określające zmianę strumienia molowego składnika i od długości rury dla danej reakcji j :

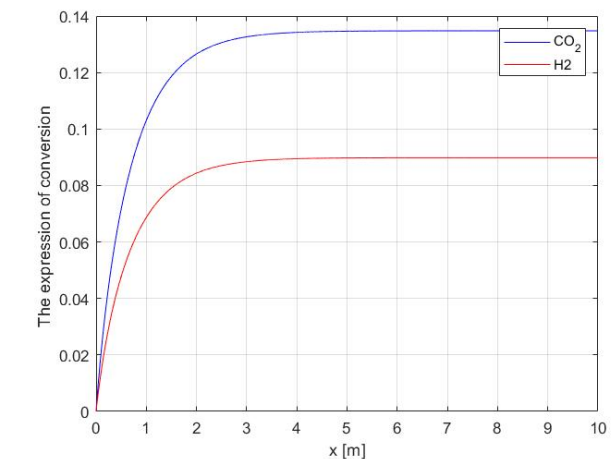
$$\frac{dF n_i}{dx} = v_i \cdot \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \rho_{cat} \cdot r_j \cdot \frac{\pi \cdot d_w^2}{4}$$

Wyniki symulacji

Wykonano symulacje umożliwiające przedstawienie graficznych funkcji zależności zmiany od długości reaktora: strumienia molowego substratów i produktów, ciśnień cząstkowych składników, selektywności i stopnia konwersji. W celu porównania działania modelu dla „zielonej” metody przeprowadzono symulacje, w których do układu dostarczano dwutlenek węgla zamiast tlenku węgla.



Rys. 1. Zależność stopnia konwersji składnika od długości reaktora w temperaturze 200°C i pod ciśnieniem 15 bar. Symulacja dla tlenku węgla.



Rys. 2. Zależność stopnia konwersji składnika od długości reaktora w temperaturze 200°C i pod ciśnieniem 15 bar. Symulacja dla dwutlenku węgla.

Symulacje przeprowadzono w zakresie temperaturowym 200-260 [°C] oraz zakresie ciśnieniowym 15-50 [bar]. Stopień konwersji w takich samych warunkach przyjmuje większą wartość dla tlenku węgla niż dla dwutlenku węgla. Wartość stopnia konwersji na końcu reaktora odpowiednio na Rysunku 1 oraz Rysunku 2 wynosi: 0,494 i 0,135. Zaobserwowano zmiany w otrzymywanych wartościach końcowych w zależności od warunków wejściowych.

Wnioski

Zwiększenie wartości ciśnienia w warunkach izotermicznych powodowało wzrost stopnia konwersji zarówno dla tlenku węgla jak i dwutlenku węgla. Natomiast wzrost temperatury ograniczał efektywność produkcji metanolu co zauważono porównując wartości stopnia konwersji dla takich samych wartości ciśnień w różnych temperaturach. W tym przedziale temperaturowym, dla którego przedstawiono model, wzrost temperatury może ograniczać konwersję reakcji i nie powodować jej wzrostu lub ją zmniejszać.

Bibliografia

Portha, Jean-François, Ksenia Parkhomenko, Kilian Kobl, Anne-Cécile Roger, Sofiane Arab, Jean-Marc Commenge, and Laurent Falk. "Kinetics of Methanol Synthesis from Carbon Dioxide Hydrogenation over Copper-Zinc Oxide Catalysts." *Industrial & Engineering Chemistry Research* 56.45 (2017): 13133-3145. Web.