

Praca dyplomowa inżynierska

CFD modelling of ammonia oxidation on platinum catalyst



Autor: Małgorzata Wróbel

Nr albumu: 289337

Promotor: prof. uczelni dr hab. inż. Łukasz Makowski

Rok akademicki: 2020/2021

Wprowadzenie

Ze względu na rosnące światowe zapotrzebowanie na kwas azotowy, stanowiąca ważny etap jego produkcji, katalityczna reakcja utleniania amoniaku pozostaje jedną z najważniejszych w przemyśle chemicznym. Reakcja ta zachodzi z wydzielaniem ciepła w obecności katalizatora platynowego domieszkowanego rodem. Warunki prowadzenia reakcji i reżim przepływu determinują otrzymaną ilość pożądanego tlenku azotu i decydują o wystąpieniu reakcji ubocznych. Agresywne środowisko wewnątrz reaktora służącego do spalania amoniaku w połączeniu z wysoką temperaturą wywołuje naprężenia w katalizatorze, które w końcu prowadzą do jego degradacji. Z tego względu problem ten stanowi od wielu lat obszar badań w przemyśle nawozowym.

Cel i zakres pracy

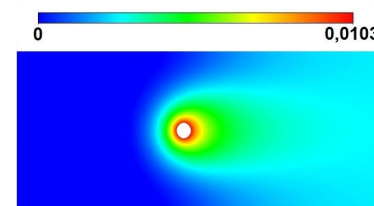
Cel pracy stanowiło zbadanie wpływu warunków (czasu kontaktu, temperatury, ciśnienia, prędkości gazu) na wydajność stechiometrycznej reakcji utleniania amoniaku do tlenku azotu oraz odnalezienie zależności między geometrią (średnicą) włókna a wydajnością tej reakcji. Cel zrealizowano z wykorzystaniem metod obliczeniowej mechaniki płynów (CFD), oferowanych przez oprogramowanie ANSYS Fluent. Zakres prac obejmował opracowanie części teoretycznej, modelowanie matematyczne z wykorzystaniem oprogramowania CFD i metod numerycznych oraz dyskusję wyników i porównanie ich z danymi literaturowymi.

Część teoretyczna i modelowanie matematyczne

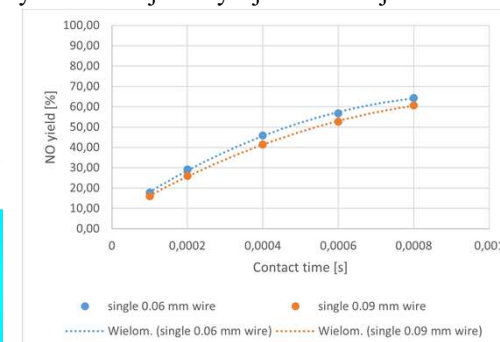
W niniejszej części przedstawiono współczesne i historyczne mechanizmy utleniania amoniaku na katalizatorze platynowym. Kolejno rozważono wpływ różnych czynników na wydajność i selektywność reakcji utleniania amoniaku do tlenku azotu. Szczegółowo opisano przyczyny i przebieg degradacji katalizatora, a także wpływ jego geometrii na transport masy i ciepła. Zaprezentowano matematyczne podstawy modelowania obliczeniowej mechaniki płynów z użyciem oprogramowania ANSYS Fluent, a także implementację geometrii, siatki i przygotowanie ustawień Solvera do symulacji. Symulacje przeprowadzono z włóknami o średnicy 0,06 i 0,09 mm, przy pięciu różnych czasach kontaktu gazu z katalizatorem.

Wyniki

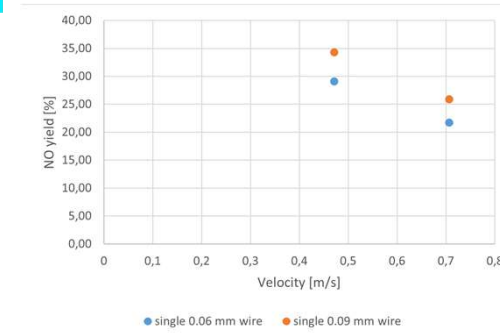
Wyniki wskazują na podobieństwo i zależność między kształtem profili prędkości i temperatury, a kształtem konturów ułamka masowego tlenku azotu, zatem wymiana masy i ciepła w układzie są ściśle powiązane. Wykonano dodatkowe symulacje testowe, aby sprawdzić postawioną w trakcie opracowywania wyników hipotezę. Ponieważ zastosowany na ściankach domeny warunek brzegowy symetrii tworzy oczka z równolegle ustawionych włókien, to przepływający płyn przyspiesza w powstałych zwężeniach. Oczka są mniejsze w przypadku włókna 0,09 mm, a zatem rzeczywisty czas kontaktu z włóknem skraca się, co sprawia, że w przypadku włókna 0,09 mm otrzymano mniejsze wydajności reakcji.



Rys. 1. Przestrzenny rozkład ułamka masowego tlenku azotu [-]



Rys. 2. Wykres wydajności przebiegu reakcji w funkcji czasu kontaktu



Rys. 3. Wykres wydajności przebiegu reakcji w funkcji prędkości płynu

Wnioski

Dobór nawet najprostszej kinetyki reakcji w symulacji CFD pozwala na modelowanie najważniejszych parametrów procesu utleniania amoniaku i na zbadanie zależności między wymiarami włókna katalitycznego a wymianą ciepła i masy oraz wydajnością reakcji. Tak daleko idące uproszczenie powoduje jednak, że otrzymane wyniki różnią się znacznie od danych literaturowych bazujących na eksperymentach. Dane te zazwyczaj uwzględniają występowanie reakcji konkurencyjnych. Symulacje testowe pokazały, że dzięki większej powierzchni kontaktu w przypadku zastosowaniu włókna o średnicy 0,09 mm otrzymuje się większe wydajności reakcji niż przy wyborze włókna o średnicy 0,06 mm. Jest to jednak bardzo mała różnica w porównaniu do różnicy mas obu włókien. Ponieważ platyna jest drogim materiałem, w przemyśle stosuje się różnego rodzaju rozwiązania, mające na celu maksymalizację wydajności reakcji przy minimalizacji kosztów całkowitych.