

# Praca dyplomowa inżynierska

## Wykorzystanie metod numerycznych do opracowania wpływu warunków procesowych na proces produkcji metanolu przy użyciu gazu syntezowego

**Autor: Rafał Wiśniewski**

Nr albumu: 312439

Promotor: dr inż. Michał Lewak



Rok akademicki: 2023/2024

### Wprowadzenie

Metanol doskonale sprawdza się jako nośnik wodoru, który w dzisiejszych czasach znajduje zastosowanie w wielu obszarach. Proces produkcji metanolu jest niezwykle złożony, wymagający uwzględnienia szeregu istotnych czynników. W tym kontekście, istotną rolę odgrywają symulacje numeryczne, umożliwiające badanie procesu bez konieczności zużywania rzeczywistych surowców.

### Cel i zakres pracy

Celem pracy jest zbadanie wpływu warunków procesowych na proces syntezy metanolu poprzez wykonanie odpowiedniej ilości symulacji numerycznych. Do wykonania obliczeń wykorzystano program Matlab.

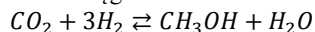
Zakres pracy obejmuje:

- przegląd literaturowy
- wykonanie symulacji procesu syntezy metanolu dla różnych parametrów procesowych
- analiza otrzymanych wyników i sformułowanie wniosków

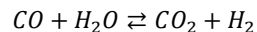
### Część teoretyczna

W tej części pracy zostały przedstawione metody wytwarzania gazu syntezowego, z uwzględnieniem metanu jako źródła. Następnie skupiono się na znaczeniu katalizatorów w kontekście procesu syntezy metanolu, przy uwzględnieniu różnic wynikających z obecności różnych domieszek. Przedstawiono również kilka modeli kinetycznych wykorzystywanych podczas symulacji numerycznych wraz z ich założeniami oraz główne reakcje występujące w tym procesie:

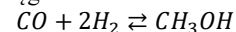
- Reakcja uwodorniania dwutlenku węgla



- Reakcja water-gas-shift



- Reakcja uwodorniania tlenku węgla



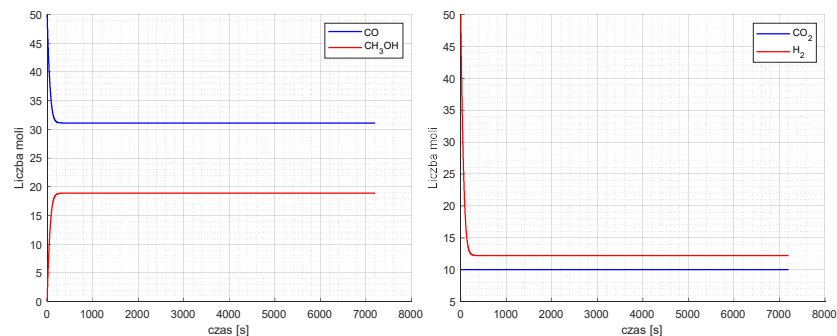
### Część obliczeniowa

W tej części zbadano jak zmieniają się stałe występujące w równaniach kinetycznych wraz ze wzrostem temperatury oraz wykonano symulacje wykorzystując model matematyczny reaktora o działaniu okresowym pracującego w warunkach izotermicznych zgodnie z artykułem [Portha i in., 2017].

$$\frac{dn_i}{dt} = v_i r_j \rho_{kat} V_{kat}$$

Gdzie  $i$  oznacza wybraną substancję ( $CO_2, H_2, CO, H_2O, CH_3OH$ )

W trakcie przeprowadzanych symulacji różne parametry, obejmujące zarówno ilość moli poszczególnych substratów i produktów, jak i stopień konwersji i selektywność dla różnych warunków prowadzenia procesu.



Rys. 1 Przykładowy wykres przedstawiający ilości moli poszczególnych produktów i substratów podczas procesu syntezy metanolu

### Wnioski

W wyniku analizy rezultatów przeprowadzonych symulacji, udało się sformułować adekwatne wnioski dotyczą wpływu warunków procesowych na proces syntezy metanolu. Potwierdzono, że modelowanie matematyczne pozwala na określenie warunków pracy reaktora. Warto jednak zaznaczyć, że symulacja nie jest w stanie pełni uwzględnić złożoności rzeczywistego procesu. Zaobserwowano, że zwiększenie stosunku ilości wodoru do ilości tlenku węgla skutkowało zwiększeniem ilości otrzymywanego metanolu.