

Praca dyplomowa inżynierska

Modelowanie kinetyki reakcji suchego reformingu metanu



Autor: Jacek Smółka

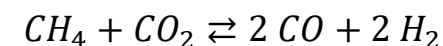
Nr albumu: 298064

Promotor: dr hab. inż. Robert Cherbański, prof. PW

Rok akademicki: 2021/2022

Wprowadzenie

Przedmiotem pracy jest reakcja suchego reformingu metanu (ang. *dry reforming of methane*, DRM). Jest to katalityczna endotermiczna reakcja odwracalna metanu z ditlenkiem węgla, której produktami są wodór i tlenek węgla. Mechanizm reakcji DRM jest bardziej złożony, niż ten wynikający z poniższego równania reakcji, ponieważ równoległe z DRM zachodzi wiele innych reakcji.



Suchy reforming metanu jest reakcją heterogeniczną, którą prowadzi się w układzie dwufazowym złożonym z reagentów gazowych i katalizatora stałego.

Cel i zakres pracy

Praca ma charakter obliczeniowy i dotyczy modelowania matematycznego DRM. Celem obliczeń było określenie wpływu warunków procesowych na osiągnięty w reaktorze stan równowagi chemicznej. Analizowany był wpływ temperatury prowadzenia reakcji, ciśnienia w reaktorze oraz składu strumienia gazowego zasilającego reaktor. Zakres pracy obejmuje:

- Przedstawienie informacji o DRM i jego zastosowaniach, a także informacji o innych sposobach reformingu metanu.
- Przybliżenie mechanizmu katalizy DRM i mechanizmu dezaktywacji katalizatora.
- Zdefiniowanie modelu matematycznego i jego implementacja w programie MatLab.
- Wykonanie obliczeń oraz ich zebranie i opracowanie.

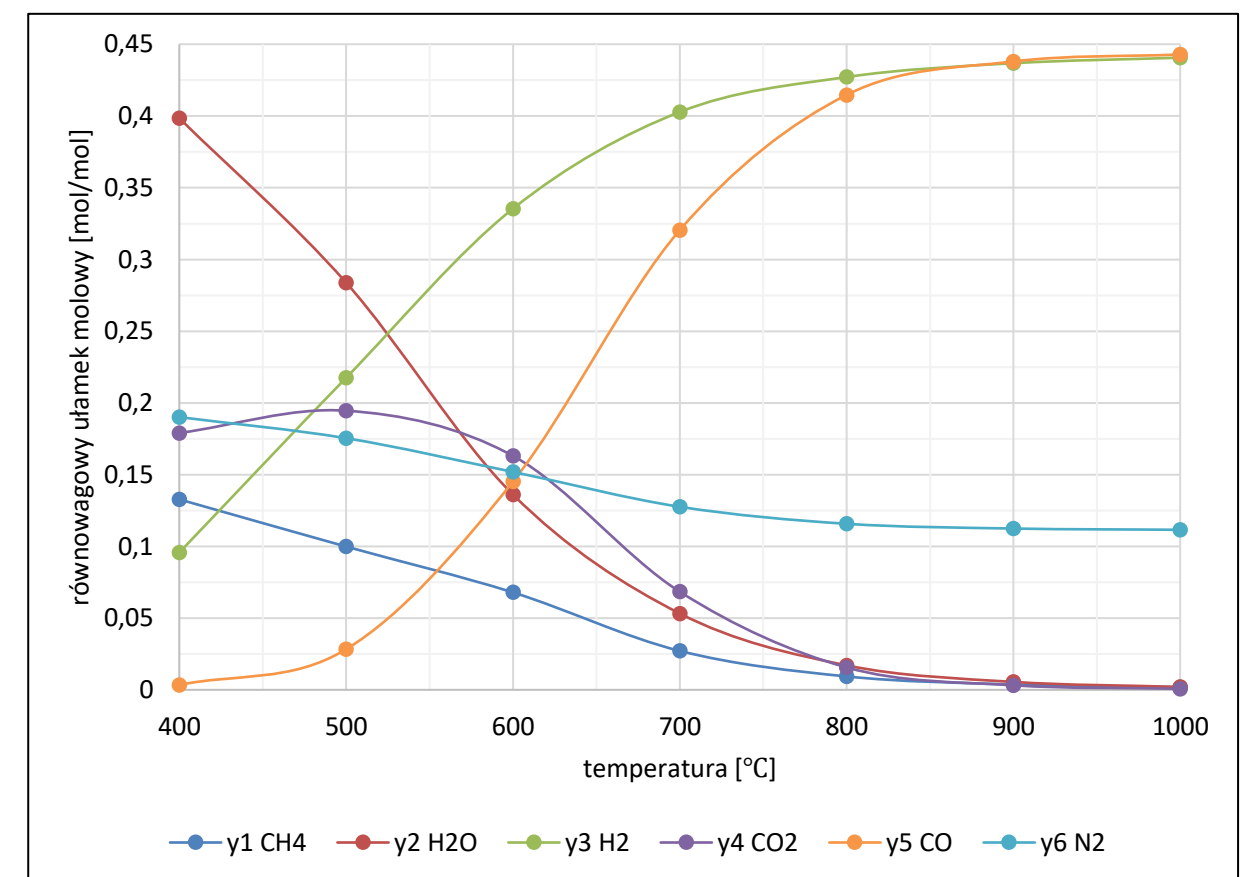
Część teoretyczna

W wyniku DRM powstaje mieszanina wodoru i tlenku węgla zwana gazem syntezowym, który stanowi kluczowy półprodukt w przemyśle chemicznym. DRM ma również znaczenie dla ochrony środowiska, ponieważ utylizuje aż dwa gazy cieplarniane. Znaczącym problemem DRM jest dezaktywacja katalizatora, która spowodowana jest głównie spiekaniem oraz odkładaniem się na jego powierzchni węgla w postaci stałej.

Model matematyczny

Do obliczeń wykorzystany został model reaktora rurowego z przepływem tłokowym z nieruchomym złożem katalizatora, przez które przepływa strumień gazu. Model kinetyczny zachodzących reakcji został zaczerpnięty z literatury. Dla stosowanego modelu reaktora zdefiniowane zostały bilanse molowe składników mieszaniny gazowej tworzące układ równań różniczkowych. Powstały układ równań różniczkowych całkowany był przy użyciu funkcji bibliotecznej programu MatLab o nazwie ode45.

Przykładowe wyniki obliczeń



Rysunek 1. Wykres wartości równowagowych ułamków molowych dla badań wpływu temperatury

Wnioski

Przeprowadzona analiza wyników obliczeń pozwoliła zaproponować optymalne warunki prowadzenia reakcji DRM. Wyniki wskazują, że DRM należy prowadzić w wysokich temperaturach. W zakresie temperatur 900 – 1000 °C osiągnięta jest konwersja substratów bliska jedności, a głównymi składnikami mieszaniny równowagowej są wodór i tlenek węgla. Na podstawie analizy wpływu ciśnienia można stwierdzić, że wskazane jest jak najniższe ciśnienie w reaktorze. Kompromis między wydajnością DRM a kosztami inwestycyjnymi można osiągnąć, prowadząc reakcję pod ciśnieniem atmosferycznym. Obliczenia wykazały również, że optymalne jest zasilanie reaktora mieszaniną metanu i ditlenku węgla w stosunku równomolowym.