

Υπολογιστική Προσέγγιση Παραγωγής Υδρογόνου σε Αναμορφωτή Ατμού-Μεθανίου

Παναγάκος Γρηγόριος^{1,*}, Σημίρα Παπαδοπούλου^{1,2}, Σπυρίδων Βουτετάκης¹

1 Εργαστήριο Ανάπτυξης Ολοκληρωμένων Συστημάτων και Διεργασιών (ΕΑΝΟΣΥΣ), Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων (ΙΔΕΠ), Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης (ΕΚΕΤΑ), 57001, Θέρμη-Θεσσαλονίκη

2 Τμήμα Μηχανικών Αυτοματισμού, Αλεξάνδρειο Τεχνολογικό Εκπαιδευτικό Ίδρυμα Θεσσαλονίκης, 57400, Θεσσαλονίκη

* Τηλ: +30 2310498358, Fax: +30 2310498380, E-mail: gripanag@cperi.certh.gr

Περίληψη

Η μετακίνηση της ενεργειακής παραγωγής από τη χρήση ορυκτών καυσίμων σε βιώσιμες εναλλακτικές καθίσταται διαρκώς επιτακτικότερη λόγω της εξάντλησης των σχετικών αποθεμάτων και τη συσσώρευση πλειάδας αρνητικών επιπτώσεων στο περιβάλλον και το οικοσύστημα. Μεταξύ των λύσεων αυτών, οι ενεργειακές διατάξεις τροφοδοτούμενες με υδρογόνο αποκτούν στην πράξη διαρκώς ευρύτερο ρόλο και έλκουν συνεπώς μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον. Ταυτόχρονα, κύριες δραστηριότητες της χημικής βιομηχανίας επαφίενται στην παραγωγή υδρογόνου. Ο βιομηχανικά προτιμώμενος και περισσότερο χρησιμοποιούμενος τρόπος παραγωγής υδρογόνου, βασίζεται στην αναμόρφωση του μεθανίου.

Στον πυρήνα κάθε συστήματος αναμόρφωσης παρουσία ατμού, βρίσκεται η καταλυτική μετατροπή του μεθανίου μέσω της αντίδρασης μετατόπισης και ο διαχωρισμός του παραγόμενου υδρογόνου από τα υπόλοιπα συστατικά του αερίου μίγματος. Με την παρούσα εργασία προσομοιώνουμε τη λειτουργία ενός τέτοιου πραγματικού συστήματος το οποίο έχει κατασκευαστεί και βρίσκεται ήδη εν λειτουργία στο εργαστήριό ΑΝΟΣΥΣ του ΕΚΕΤΑ¹. Ο στόχος της συγκεκριμένης κυλινδρικής υλοποίησης είναι να διερευνήσει τη λειτουργία σε χαμηλότερες θερμοκρασίες από αυτές που συναντώνται σε συμβατικά συστήματα και ο διαχωρισμός του υδρογόνου να εδράζεται στην εκλεκτική διέλευσή του από μια κατάλληλα σχεδιασμένη και κατασκευασμένη μεμβράνη.

Με τη χρήση υπολογιστικής ρευστοδυναμικής και των κατάλληλων κινητικών μοντέλων^{2,3}, διερευνούμε το αναπτυσσόμενο ροϊκό και θερμοκρασιακό πεδίο αντιροής των αερίων εισαγωγής και απαγωγής του αντιδραστήρα. Με αυτή τη αξονοσυμμετρική τρισδιάστατη μοντελοποίηση επιδιώκουμε να επιτύχουμε τη συστηματική μελέτη διαφόρων συνθηκών λειτουργίας όπως της πίεσης και θερμοκρασίας του αντιδραστήρα και της ροής εισαγωγής του μεθανίου. Πρώτο βήμα στην προσπάθεια αυτή είναι η σύγκριση των υπολογιστικών με τα πειραματικά αποτελέσματα για τη επαλήθευση της ορθότητας της μεθόδου. Στη συνέχεια της τρέχουσας δραστηριότητας και στα πλαίσια της επιδιωκόμενης μαθηματικής βελτιστοποίησης με τη χρήση του μοντέλου, θέτουμε ως αντικειμενικές συναρτήσεις το βαθμό μετατροπής του μεθανίου και το βαθμό ανάκτησης υδρογόνου. Επιδιώξή μας είναι να παρουσιάσουμε κατ' αρχήν ανάλυση ευαισθησίας των συνθηκών λειτουργίας αλλά και των κύριων γεωμετρικών χαρακτηριστικών του αντιδραστήρα, επί των αντικειμενικών συναρτήσεων. Στη συνέχεια, το πρόβλημα βελτιστοποίησης μπορεί να αποτελέσει τη βάση για ένα ορθό σχεδιασμό ενός βιομηχανικού συστήματος.

Αναφορές

1. *Enhancement of pure hydrogen production through the use of a membrane reactor*, Alexios Spyridon Kyriakides, Laura Rodríguez-García, Spyridon Voutetakis, Dimitris Ipsakis, Panos Seferlis, Simira Papadopoulou, *International Journal of Hydrogen Energy* xxx (2014) 1-12
2. *Methane Steam Reforming, Methanation and Water-Gas Shift: I. Intrinsic Kinetics*, Jianguo Xu, Gilbert F. Froment, *AIChE Journal*, 1989 Vol.35.No.1, 88-96
3. *Modeling and simulation of methane steam reforming in a thermally coupled membrane reactor*, Keyur S. Patel, Aydin K.Sunol, *International Journal of Hydrogen Energy* 32, (2007), 2344-2358