

Μοντελοποίηση και υπολογιστική μελέτη λειτουργίας ηλεκτροχημικού αντιδραστήρα παραγωγής χλωρίου με συστοιχίες διπολικών ηλεκτροδίων

Βασίλης Θεοχάρης¹, Δημήτρης Κουτσαύτης², Ελένη Κορωνάκη³, Γιώργος Πάσχος³, Ανδρέας Μπουντουβής³, Αντώνης Καραντώνης¹

¹Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

²ERMA FIRST E.S.K. Engineering Solutions S.A.

³Τομέας Ανάλυσης, Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

Το έρμα των πλοίων (Ballast Water), στην ναυσιπλοΐα, αποτελεί σημαντικό παράγοντα ευστάθειας και σωστής πρόωσης των πλοίων. Τα πλοία γεμίζουν τις δεξαμενές τους με νερό από το λιμάνι αναχώρησης (ή/και κατά την διάρκεια του ταξιδιού τους) και το απορρίπτουν στο λιμάνι προορισμού. Η εισαγωγή των περιεχόμενων θαλάσσιων μικροοργανισμών του έρματος σε νέο θαλάσσιο οικοσύστημα αποτελεί ένα από τα μεγαλύτερα οικολογικά προβλήματα. Μια από τις εν πλω μεθόδους επεξεργασίας του έρματος είναι η παραγωγή χλωρίου με ηλεκτρόλυση για την απολύμανση του.

Σκοπός της εργασίας είναι η μοντελοποίηση ηλεκτροχημικού αντιδραστήρα για την εν πλω απολύμανση του έρματος μέσω του εμπορικού λογισμικού COMSOL. Ο αντιδραστήρας αποτελείται από ηλεκτρόδια τροφοδοσίας και από μία συστοιχία παράλληλων διπολικών ηλεκτροδίων σε παράλληλη διάταξη. Η παροχή του έρματος στον αντιδραστήρα θεωρείται συνεχής ενώ οι συνθήκες εντός αυτού μόνιμες. Σε κάθε διπολικό ηλεκτρόδιο λαμβάνουν χώρα τρεις κύριες ηλεκτροχημικές αντιδράσεις, η παραγωγή χλωρίνης (Cl_2), η παραγωγή αερίου οξυγόνου (O_2) και η παραγωγή αερίου υδρογόνου (H_2). Ειδικότερα:

- Στην άνοδο λαμβάνεται υπόψη η αντίδραση οξειδωσης των ιόντων χλωρίου προς χλωρίνη, σύμφωνα με τον μηχανισμό Volmer – Tafel.
- Η χλωρίνη υδρολύεται προς υποχλωριώδες οξύ στο υδατικό διάλυμα
- Το υποχλωριώδες οξύ διίσταται σε υποχλωριώδη ιόντα και πρωτόνια
- Στην άνοδο πραγματοποιείται επίσης η ηλεκτρόλυση του νερού προς οξυγόνο.
- Στην κάθοδο λαμβάνεται υπόψη η αναγωγή του νερού προς υδρογόνο

Η υπολογιστική μελέτη βασίζεται στην λύση ενός προβλήματος κατανομής του ρεύματος, με συνοριακές συνθήκες, τόσο στα ηλεκτρόδια τροφοδοσίας όσο και στα διπολικά ηλεκτρόδια, τις κατάλληλες ηλεκτροκινητικές εξισώσεις που περιγράφουν τις ηλεκτροχημικές αντιδράσεις σε αυτά. Ως παράμετροι του προβλήματος θεωρούνται οι συνθήκες λειτουργίας και η γεωμετρία του αντιδραστήρα.

Τέλος, οι τιμές που προκύπτουν από την μοντελοποίηση συγκρίνονται με μετρήσεις που έχουν ληφθεί κατά την λειτουργία του αντιδραστήρα και προτείνονται συνθήκες λειτουργίας και γεωμετρικές διαμορφώσεις που βελτιστοποιούν την απόδοση του.