

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ ΕΤΕΡΟΓΕΝΩΝ ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΩΝ ΑΝΤΙΔΡΑΣΕΩΝ ΓΙΑ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΚΥΚΛΙΚΗΣ ΟΙΚΟΝΟΜΙΑΣ

Μ. Συρίγου^{1,2*}, Δ.Α. Δημητράκης², Α.Γ. Κωνσταντόπουλος^{1,2}

¹Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

²Εθνικό Κέντρο Έρευνας και Τεχνολογικής Ανάπτυξης «ΕΚΕΤΑ», Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

(*msyrigou@cperi.certh.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία αναπτύσσονται υπολογιστικά μοντέλα που περιγράφουν χημικούς αντιδραστήρες για εφαρμογές κυκλικής οικονομίας (ηλιοθερμοχημική διάσπαση του νερού και αξιοποίηση του διοξειδίου του άνθρακα προς παραγωγή μεθανόλης) και επιτρέπουν την παραμετρική ανάλυση με σκοπό την αύξηση της απόδοσης των διεργασιών. Οι κινητικές των συγκεκριμένων ετερογενών καταλυτικών αντιδράσεων περιγράφονται από το μοντέλο Langmuir-Hinshelwood, προσαρμόζοντας τις τιμές των παραμέτρων στα πειραματικά δεδομένα. Έπειτα, οι κινητικές εκφράσεις ενσωματώνονται στο ολοκληρωμένο μοντέλο, στο οποίο λαμβάνεται υπόψη ο τύπος του αντιδραστήρα (σταθερής κλίνης ή δομημένος αντιδραστήρας) και επιλύονται τα ισοζύγια μάζας των εμπλεκόμενων χημικών ειδών (Εξ.1) και ενέργειας (Εξ.2). Στην περίπτωση του δομημένου αντιδραστήρα, ο οποίος προσεγγίζεται ως πορώδες μέσο, οι 2 εξισώσεις μεταφοράς θερμότητας αντιστοιχούν στη στερεή (Εξ.3) και στη ρευστή φάση (Εξ.4). Ταυτόχρονα επιλύεται η εξίσωση για τον υπολογισμό της πτώση πίεσης μέσα στους αντιδραστήρες (Εξ.5). Τα μοντέλα έχουν επαληθευτεί από τις πειραματικές μετρήσεις και περιγράφουν επιτυχώς τόσο την ηλιοθερμοχημική διάσπαση του νερού όσο και την παραγωγή μεθανόλης (Σχήματα 1-4).

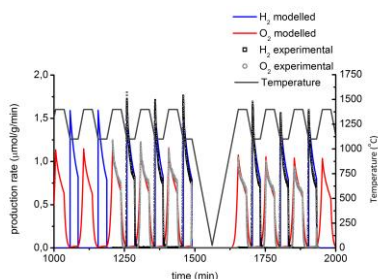
$$\frac{dF_i}{dW} = -\frac{r_i}{F_i} \quad \text{Εξ.1}$$

$$\rho_s c_{p_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = k_s \nabla^2 T_s + q_s \quad \text{Εξ.2}$$

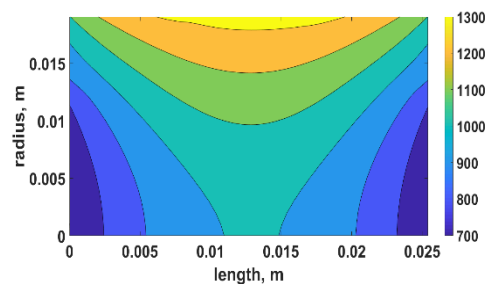
$$(1 - \varepsilon) \rho_s c_{p_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1 - \varepsilon) k_s \nabla^2 T_s + h_v (T_f - T_s) + (1 - \varepsilon) q_s \quad \text{Εξ.3}$$

$$\varepsilon \rho_f c_{p_f} \left(\frac{\partial T_f}{\partial t} + u \cdot \nabla T_f \right) = \varepsilon k_f \nabla^2 T_f - h_v (T_f - T_s) + \varepsilon q_f \quad \text{Εξ.4}$$

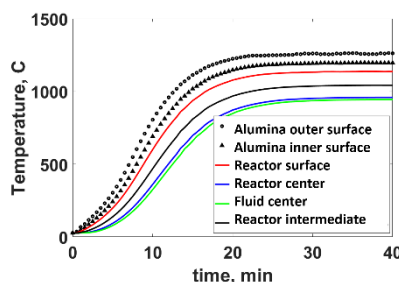
$$\frac{dy}{dW} = -\frac{\alpha}{2y} \frac{F_T}{F_{T_0}} \quad \text{Εξ.5}$$



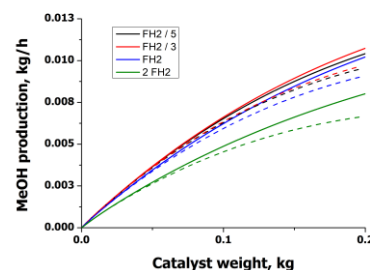
Σχήμα 1. Παραγωγή υδρογόνου-οξυγόνου πολλαπλών κύκλων ηλιοθερμοχημικής διάσπασης νερού



Σχήμα 2. Θερμοκρασιακή κατανομή στερεής φάσης πορώδους μέσου σε μόνιμη κατάσταση



Σχήμα 3. Εξέλιξη θερμοκρασίας σε διάφορα σημεία του αντιδραστήρα σε δυναμική λειτουργία



Σχήμα 4. Παραγωγή μεθανόλης σε σχέση με το βάρος του καταλύτη