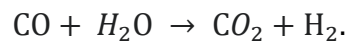


6^ο Εργαστήριο Σχεδιασμού Χημικών Βιομηχανιών και Διεργασιών

Τίτλος: “Μονάδα παραγωγής υδρογόνου μέσω αντίδρασης μετατόπισης υδαταερίου (water-gas shift reaction)”

Το υδρογόνο είναι μια από τις πιο ελπιδοφόρες πηγές ενέργειας. Το υδρογόνο είναι μια ευνοϊκή πηγή ενέργειας επειδή μπορεί να καεί, παρόμοια με τη βενζίνη και το φυσικό αέριο, ή να μετατραπεί σε ηλεκτρική ενέργεια σε μια κυψέλη καυσίμου χωρίς εκπομπές άνθρακα στο σημείο χρήσης. Η αντίδραση μετατόπισης υδάτινου αερίου είναι ένα σημαντικό μέρος της διαδικασίας αναμόρφωσης του μεθανίου με ατμό (Steam Methane Reforming - SMR), τα καυσαέρια μετά τη μεθανοποίηση έχουν μονοξείδιο του άνθρακα και μεγάλο μέρος του μη μετατρεπόμενου ατμού. Η μέθοδος παραγωγής υδρογόνου μέσω αντίδρασης μετατόπισης υδαταερίου (WGSR) αυξάνει την απόδοση υδρογόνου που παράγεται με αντίδραση μονοξειδίου του άνθρακα με τον εναπομείναντα ατμό. Η αντίδραση μετατόπισης υδαταερίου περιγράφει την αντίδραση μονοξειδίου του άνθρακα και υδρατμών προς σχηματισμό διοξειδίου του άνθρακα και υδρογόνου βάσει της παρακάτω αντίδρασης:



Αυτή η διαδικασία είναι σημαντική για δύο λόγους, πρώτον, αυξάνει την απόδοση. Δεύτερον, μετατρέπει το CO σε CO₂, επομένως αποφεύγεται η εκπομπή δηλητηριωδών αερίων CO. Το WGSR χωρίζεται σε δύο μέρη, το High Temperature Shift (HTS) με παράγοντα μετατροπής 80% και το Low Temperature Shift (LTS) με παράγοντα μετατροπής 100%. Το ρεύμα αερίων από την διαδικασία της SMR εισέρχεται στον αντιδραστήρα HTS που λειτουργεί στα 500-700K, όπου μετατρέπει τον εναπομείναντα ατμό κατά 35%, και στη συνέχεια η ροή ψύχεται στα 400K. Αργότερα, το ψυχρό ρεύμα μεταφέρεται στον αντιδραστήρα LTS ο οποίος λειτουργεί στα 300-400K για την αύξηση της απόδοσης H₂ κατά 2-3%. Η έξοδος του ατμού ψύχεται και αποστέλλεται σε έναν διαχωριστή, όπου ο υπόλοιπος ατμός συμπυκνώνεται στο νερό και το αέριο του προϊόντος απομακρύνεται.

1. Δημιουργούμε μια νέα προσομοίωση: **File -> New Steady-state simulation.**
2. Από την καρτέλα «**Compounds**» προσθέτουμε τα εξής στοιχεία-αντιδραστήρια:
 - Methane

- Oxygen
 - Nitrogen
 - Water
 - Hydrogen
 - Carbon monoxide
 - Carbon dioxide
3. Από την καρτέλα «**Property Packages**» επιλέγουμε την εξίσωση επίλυσης «**Peng-Robinson**».
4. Από την καρτέλα «**System of Units**» επιλέγουμε «**SI**» και θέτουμε:
- Temperature = K
 - Mass flow rate = Kg/s
 - Pressure = Pa
 - Molar flow rate = mol/s
5. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:
- Name = WSGR-HTS.
 - Description = Reaction for HTS.
 - Στο **Include** επιλέγουμε μόνο **Water, Hydrogen, Carbon monoxide, Carbon dioxide**.
 - Στο **BC** (βασικό στοιχείο) επιλέγουμε μόνο το **Water, Carbon monoxide**.
 - Ορίζουμε τους **στοιχειομετρικούς συντελεστές** ως εξής:
 - **Water** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon monoxide** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon dioxide** = 1 (προϊόν).
 - **Hydrogen** = 1 (προϊόν).
 - **Nitrogen** = 0.
 - **Oxygen** = 0.
 - **Methane** = 0.
 - **Phase** = Vapor.
 - Στο **Conversion** θέτουμε την τιμή ίση με 80.
6. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» και πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Chemical Reactions**» και επιλέγουμε «**Add Reaction**» - > «**Conversion**» θέτοντας:

- Name = WSGR-LTS.
 - Description = Reaction for LTS.
 - Στο **Include** επιλέγουμε μόνο **Water, Hydrogen, Carbon monoxide, Carbon dioxide**.
 - Στο **BC** (βασικό στοιχείο) επιλέγουμε μόνο το **Water, Carbon monoxide**.
 - Ορίζουμε τους **στοιχειομετρικούς συντελεστές** ως εξής:
 - **Water** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon monoxide** = -1 (αντιδρών).
 - **Carbon dioxide** = 1 (προϊόν).
 - **Hydrogen** = 1 (προϊόν).
 - **Nitrogen** = 0.
 - **Oxygen** = 0.
 - **Methane** = 0.
 - **Phase** = Vapor.
 - Στο **Conversion** θέτουμε την τιμή ίση με 100.
7. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Reaction Sets**» και επιλέγουμε «**Add New Reaction Set**» θέτοντας:
- Name = HTS
 - Description = HTS Reactor
 - Στα Reactions κρατάμε μόνο το WSGR-HTS
8. Από το βασικό μενού επιλέγουμε «**Settings**» πηγαίνουμε στην καρτέλα «**Reactions**» και έπειτα οδηγούμαστε στην καρτέλα «**Reaction Sets**» και επιλέγουμε «**Add New Reaction Set**» θέτοντας:
- Name = LTS
 - Description = LTS Reactor
 - Στα Reactions κρατάμε μόνο το WSGR-LTS
9. Εισάγουμε ένα «**Material Stream**» και θέτουμε ως «**Stream Conditions**» (όπως προέκυψαν από μια διαδικασία Steam Methane Reforming (SMR)):
- Object = feed_SMR
 - Pressure = 405300 Pa
 - Temperature = 617.15 K
 - Mass Flow = 0.085 kg/s (Molar flow = 4.709 mol/s)

και ως «**Compound Amounts**»:

- Methane = 0.016
- Oxygen = 0.007
- Nitrogen = 0.28
- Water = 0.25
- Hydrogen = 0.32
- Carbon monoxide = 0.077
- Carbon dioxide = 0.05

10. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» με παραμέτρους:

- Object = Cooler-1
- Inlet stream = feed_SMR
- Outlet Stream = cool_outlet-1
- Energy stream = cool_power-1
- Calculation type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 589.15 K (316 °C)

11. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» με παραμέτρους:

- Object = HTS-Reactor
- Inlet stream = cool_outlet
- Outlet Stream 1 = top-1
- Outlet Stream 2 = bottom-1
- Reaction Set = HTS
- Energy stream = HTS_power

12. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» με παραμέτρους:

- Object = Cooler-2
- Inlet stream = top-1
- Outlet Stream = cool_outlet-2
- Energy stream = cool_power-2
- Calculation type = Outlet Temperature

- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 417.15 K (144 °C)

13. Από την καρτέλα «**Reactors**» εισάγουμε έναν «**Conversion Reactor**» με παραμέτρους:

- Object = LTS-Reactor
- Inlet stream = cool_outlet-2
- Outlet Stream 1 = top-2
- Outlet Stream 2 = bottom-2
- Reaction Set = LTS
- Energy stream = LTS_power

14. Από την καρτέλα «**Exchangers**» εισάγουμε «**Cooler**» με παραμέτρους:

- Object = Cooler-3
- Inlet stream = top-2
- Outlet Stream = cool_outlet-3
- Energy stream = cool_power-3
- Calculation type = Outlet Temperature
- Pressure drop = 0
- Efficiency = 100%
- Outlet Temperature = 333.15 K (60 °C)

15. Από την καρτέλα «**Separators/Tanks**» εισάγουμε «**Gas-Liquid Separator**» με παραμέτρους:

- Object = Separator
- Inlet stream = cool_outlet-3
- Vapor Stream = hydrogen
- Light Liquid Stream = water
- Outlet Pressure Calculation = Inlet Maximum
- Override Sep Temperature = 298.15 K (25 °C)
- Energy Stream = sep_power

16. Εισάγουμε «**Master Property Table**» με τις ροές ρεύματος:

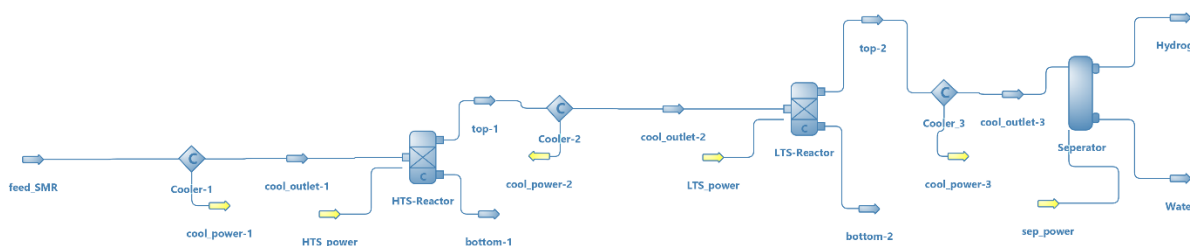
- feed_SMR,

- top-1,
- top-2,
- cool_outlet-1,
- cool_outlet-2,
- cool_outlet-3,
- water,
- hydrogen

και με τις εξής παραμέτρους:

- Temperature, Pressure, Mass flow, Molar flow.

Τι παρατηρείτε;



Flows, compositions of different streams of H ₂ production plant design								
Object	feed_SMR	cool_outlet-1	top-1	cool_outlet-2	top-2	cool_outlet-3	Hydrogen	Water
Temperature	617.15	589.15	698.15	471.15	473.15	333.15	298.15	298.15
Pressure	405300	405300	405300	405300	405300	405300	405300	405300
Mass Flow	0.0849569	0.0849569	0.0849569	0.0849569	0.0849569	0.0849569	0.0713816	0.0135753
Molar Flow	4.709	4.709	4.70899	4.70899	4.70899	4.70899	3.95579	0.753199
Volumetric Flow	0.0596153	0.0569006	0.0674763	0.0454712	0.0456655	0.0280951	0.0241482	1.3627E-05
Molecular Weight (Mixture)	18.0414	18.0414	18.0414	18.0414	18.0414	18.0414	18.0448	18.0235
Molecular Weight (Overall Liquid)	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	18.0221	NaN	18.0235

Σχήμα 1. Το διάγραμμα ροής της 6^{ης} εργαστηριακής άσκησης.

Αναφορές

[1] Stepić, R., Wick, C. R., Strobel, V., Berger, D., Vučemilović-Alagić, N., Haumann, M., ... & Smith, D. M. (2019). Mechanism of the Water–Gas Shift Reaction Catalyzed by Efficient Ruthenium-Based Catalysts: A Computational and Experimental Study. *Angewandte Chemie International Edition*, 58(3), 741-745.