

Analizy numeryczne wielkoskalowych operacji jednostkowych przemysłu nawozów sztucznych: synteza amoniaku, utlenianie amoniaku i odkraplanie z wykorzystaniem modelowania przy użyciu obliczeniowej mechaniki płynów ze szczegółowymi kinetykami reakcji

Streszczenie

Pomimo ciągłego wzrostu światowej gospodarki, wiele fundamentalnych problemów pozostaje nierozwiązanych. Niedożywienie i brak bezpieczeństwa żywnościowego, obecnie dodatkowo nasilone przez światowe niestabilności polityczne oraz problemy związane ze środowiskiem naturalnym, wywierają presję na przemysł produkcji nawozów sztucznych, aby zwiększyć jego wydajność tak bardzo jak to możliwe. Istniejące technologie przemysłowe mają doskonały potencjał do ulepszeń, ponieważ ze względu na ich wielkoskalowy charakter, nawet niewielkie poprawki mogą znacznie zwiększyć wydajność oraz zredukować koszty operacyjne. Ponadto modyfikacja istniejących technologii jest tańsza i szybsza niż opracowywanie nowych, co jest niezwykle trudne w przypadku wielkoskalowych linii produkcyjnych. Obliczeniowa mechanika płynów (CFD – ang. computational fluid dynamics) ma świetny potencjał do wspierania prac eksperymentalnych oraz projektowych. Rozwiązywanie równań Naviera-Stokesa z wykorzystaniem odpowiednich modeli burzliwości przy użyciu metody objętości skończonych umożliwia symulację pola przepływu wewnątrz badanego urządzenia, które można rozbudować o modele transportu energii, koncentracji składników oraz kinetykę reakcji chemicznej.

Niniejsza praca skupia się na tworzeniu i stosowaniu modeli CFD kluczowych procesów przemysłu produkcji nawozów sztucznych: syntezy amoniaku metodą Habera-Boscha oraz utleniania amoniaku w procesie Ostwalda. Ostatni rozdział dedykowany jest usuwaniu kropeł za pomocą odkraplaczy płytowo-żaluzjowych. Jest to proces pomocniczy szeroko stosowany w wielu gałęziach przemysłu, wliczając produkcję nawozów sztucznych. Każda analiza zawiera szczegółowe informacje na temat metodologii, w tym geometrii, konfiguracji obliczeniowej, warunków brzegowych, parametrów procesowych oraz zastosowanych modeli takich jak model strefy porowatej lub fazy rozproszonej. Wyniki obejmują profile kluczowych parametrów, włączając w to wielkości niemierzalne eksperymentalnie takie jak szybkości reakcji chemicznych lub strefy depozycji cząstek. Wykorzystano nowatorskie zastosowania

modeli CFD, takie jak badanie wpływu wielkości cząstek katalizatora w złożu katalitycznym oraz śledzenie trajektorii i osadzania porwanych cząstek katalizatora w wyniku zjawiska degradacji siatki katalitycznej. Uzyskane modele CFD były podstawą do propozycji nowatorskich ulepszeń badanych systemów, takich jak alternatywne geometrie złoż katalizatora, siatek katalitycznych oraz kanałów drenażowych.

Znaczący wkład w tą rozprawę doktorską miała współpraca z firmą Yara Technology and Projects – Technology (Yara International ASA), zlokalizowaną w Porsgrunn, w Norwegii. Firma ta zaoferowała dostęp do danych geometrycznych oraz wyników eksperymentalnych pracy pilotażowego reaktora do syntezy amoniaku. Pozwoliło to stworzyć model CFD całego aparatu, w pełni odwzorowując zachodzący w nim proces. Otrzymane wyniki umożliwiły modyfikację modelu kinetyki reakcji, oraz uzyskanie modelu CFD o bardzo wysokiej dokładności. Walidacja uzyskanego modelu została przeprowadzona używając dwóch niezależnych eksperymentów. Model reaktora zapewnił szczegółowy wgląd w proces oraz dalsze wsparcie badań doświadczalnych, umożliwiając lepszą kontrolę nad geometrią aparatu oraz parametrami procesowymi. Firma Yara Technology and Projects zaoferowała także ogólne wsparcie w celu zapewnienia merytorycznej poprawności badań wchodzących w skład tej rozprawy, dotyczących syntezy oraz utleniania amoniaku.

Słowa kluczowe: synteza amoniaku, Proces Habera-Boscha, utlenianie amoniaku, Proces Ostwalda, reaktor chemiczny, odkraplacze płytowo-żaluzjowe, odkraplanie, obliczeniowa mechanika płynów, degradacja gazy katalitycznej, kataliza heterogeniczna, złoż katalityczne, przepływy wielofazowe