

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ АВТОМАТИЗАЦІЇ ПРОЦЕСУ ДВОХЕТАПНОГО ТРИ-РИФОРМІНГУ МЕТАНУ

Вільбой М. О., Жученко А. І.

КПІ ім. Ігоря Сікорського, mvilboy@gmail.com

Три-риформінг метану – це складний каталітичний процес, який поєднує у одному реакційному просторі три основні реакції риформінгу: паровий риформінг, CO_2 -риформінг, та парціальне окислення метану. Цей процес дозволяє отримати в якості продукту цінний, у промисловому відношенні, синтез-газ – поєднання молекулярного водню і CO , і одночасно з цим утилізувати CO_2 . Поєднання цих факторів робить три-риформінг можливою останньою стадією на газових ТЕС, оскільки основним побічним продуктом роботи таких ТЕС є CO_2 . Інші два необхідних реагенти, метан та вода, також доступні у великій кількості на площадці будь-якої з таких електростанцій.

Двохетапний процес три-риформінгу метану запропонований для можливості застосування феномену консервативно збуреної рівноваги. Цей феномен, вперше відкритий Yablonsky у 2019 році [1] і в подальшому вивчений у деталях Trishch [2, 3], дозволяє підвищити продуктивність будь-якого оборотного хімічного процесу, у якому беруть участь дві або більше реакцій.

Якщо опустити описання всіх другорядних апаратів, то спрощена схема процесу двохетапного три-риформінгу виглядатиме так, як зображено на рисунку.

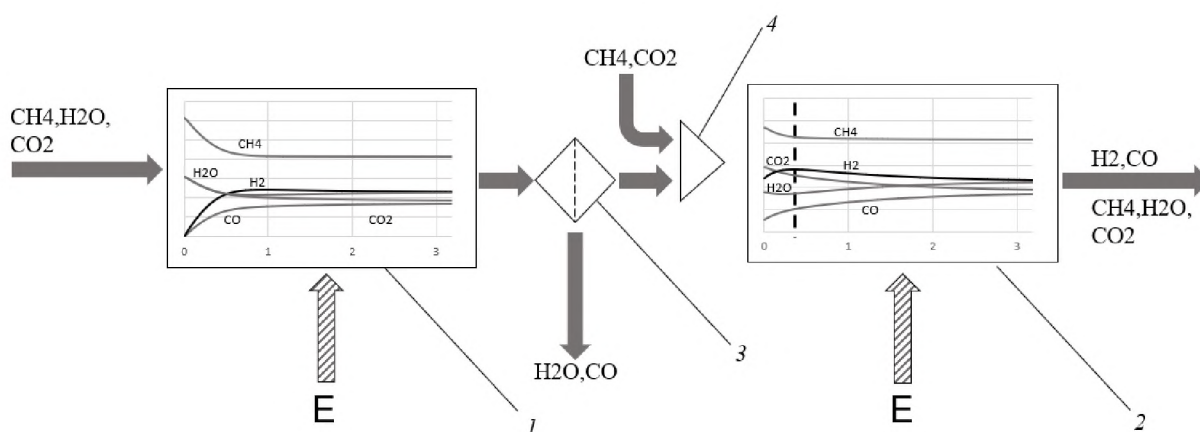


Схема процесу двохетапного три-риформінгу метану: 1 – перший етап (рівноважний реактор), 2 – другий етап (реактор зі збуренням), 3 – сепаратор, 4 – змішувач, E- енергетичні потоки. Цільовий продукт (H_2) виділено чорним кольором

Перший етап є типовим реактором три-риформінгу, який забезпечує перетворення реагентів (CH_4 , H_2O , CO_2) у суміш синтез-газу із залишками реагентів. Далі отримана суміш проходить через комбінацію сепаратора і змішувача, які разом забезпечують внесення збурень в концентрації компонентів. Після внесення збурень суміш потрапляє у другий етап, який також являє собою реактор три-риформінгу. В другому реакторі цільовий продукт, в даному випадку молекулярний водень,

проходить через точку надрівноваги, тобто точку максимуму, яка позначена штриховою лінією на рисунку.

Таким чином процес можна розділити на 3 основних об'єкти керування:

- рівноважний реактор;
- сепаратор + змішувач (секцій внесення збурень);
- реактор зі збуренням.

Рівноважний реактор є типовим реактором три-риформінгу. Існує багато підходів до управління таким реактором [4], однак всі вони зводяться до управління витратами реагентів, та стабілізації температурного режиму. Оптимальними умовами для даного етапу є співвідношення молярних витрат $\text{CH}_4:\text{H}_2\text{O}:\text{CO}_2 = 2:1:1$, температура 1023 K, тиск 10 атм.

Управління сепаратором та змішувачем має на меті отримання необхідного співвідношення речовин у вхідному потоці другого реактора. Задача полягає у наступному: залишити незмінною концентрацію одного з компонентів (H_2) при цьому змінивши концентрації всіх інших компонентів таким чином, щоб поелементний баланс було збережено. Тобто, концентрації CH_4 , H_2O , CO_2 , CO повинні змінитись, але кількість молей окремих елементів C, H та O у системі повинна залишитись незмінною [5].

Основною задачею управління третім об'єктом, реактором зі збуренням, є забезпечення такої загальної витрати на вході, щоб точка надрівноваги (на рисунку 1 позначена штриховою лінією) співпала з виходом із реактора. Таким чином вдасться забезпечити максимальну концентрацію цільового компоненту. Виходячи з такої постановки задачі, очевидно що знайти координату точки надрівноваги, по довжині реактора можливо лише за допомогою моделювання. Отже уставка витрати для цього об'єкта буде визначатись за моделлю, а управляючими впливами будуть співвідношення на сепараторі та змішувачі. Також важливо відмітити, що температура та тиск у другому реакторі повинні бути ідентичними таким у першому реакторі. Інакше буде порушено рівноважний склад та всі збурення, внесені на етапі сепаратора та змішувача, будуть мати неправильні величини.

1. G. S. Yablonsky, D. P. Branco, G. B. Marin and D. Constaes, Conservatively Perturbed Equilibrium (CPE) in chemical kinetics, Chem. Eng. Sci., (2019),
2. V. R. Trishch, Y. O. Beznosyk, G. S. Yablonsky and D. Constaes, Conservatively perturbed equilibrium in multi-route catalytic reactions, Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, (2023).
3. V. R. Trishch, Y. O. Beznosyk, D. Constaes and G. S. Yablonsky, Over-Equilibrium as a Result of Conservative-ly-Perturbed Equilibrium (Acyclic and Cyclic Mechanisms), Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, (2022).
4. Kyriakides, A.-S.; Voutetakis, S.; Papadopoulou, S.; Seferlis, P. Integrated Design and Control of Various Hydrogen Production Flowsheet Configurations via Membrane Based Methane Steam Reforming. *Membranes* 2019, 9.
5. M.O. Vilboi, V.R. Trishch, G.S. Yablonsky, D. Constaes. Modelling the CPE phenomenon for methane reforming. Current problems in catalysis conference, book of abstracts, p.119, 2023.