

W XX wieku ropa naftowa pełniła niezwykle istotną funkcję, będąc siłą napędową dla rozwoju społeczeństwa i globalnej ekonomii. W dzisiejszym świecie, szybkie zmiany w gospodarce wymuszają wzrost zapotrzebowania na inne, łatwo dostępne oraz tańsze źródła energii. Dlatego koniecznym jest rozwój alternatywnych technologii energetycznych oraz innowacyjnych rozwiązań dla potrzeb wzrastającego popytu na energię. Jednym z najważniejszych wyzwań stojących przed współczesną nauką. Jednym z nowych źródeł energii, rozwijanych w kontekście alternatywy dla ropy naftowej jest gaz ziemny. Jednakże, w celu zapewnienia pełnej efektywności, łatwości transportu oraz wkomponowania w zapotrzebowania systemu energetycznego koniecznym jest odpowiednie przetwarzanie paliwa. Najpopularniejszym metodą chemicznej konwersji metanu, będącym jednym z głównych składników gazu ziemnego jest technologia reformingu parowego. Produktem tego typu konwersji jest gaz syntezowy, składający się głównie z tlenku węgla oraz wodoru, nazywanego paliwem przyszłości.

Systemami, które mogą wykorzystywać efektywnie potencjał wodoru oraz gazu ziemnego są wysokotemperaturowe ogniwa paliwowe typu SOFC. Ogniwa typu SOFC pozwalają na bezpośrednią konwersję surowca chemicznego w energię elektryczną, co zapewnia zwiększenie wydajności procesu. Ogniwa SOFC charakteryzują się wysokimi temperaturami pracy, mimo to dzięki pracy z wykorzystaniem wielu typów paliwa oraz potencjałem do przyłączenia do sieci gazowej. Jednakże w celu pełnego wykorzystania tych możliwości niezbędne są badania dotyczące przemysłowego zasilania innymi paliwami niż wodór. W obecnej chwili większość systemów SOFC bazuje na zewnętrznych systemach wstępnego reformingu paliwa. Jednakże wysokie temperatury pracy ogniw SOFC mogą być wykorzystane bezpośrednio w celu dostarczenia ciepła dla podtrzymania reakcji reformingu węgla w gwałtownych warunkach. Co więcej, reakcje reformingu mogą zachodzić bezpośrednio na anodzie ogniwa paliwowego, jako katalizatory nikielowe są odpowiednie zarówno dla reakcji reformingu parowego metanu jak i dla reakcji elektrochemicznych charakterystycznych dla ogniw SOFC. Projektowanie i optymalizacja ogniwa paliwowego SOFC z układem reformingu wymaga jednak wiedzy o procesach zachodzących w badanym systemie. Z tego względu konieczny jest pełny matematyczny opis zjawisk fizycznych ze szczególnym naciskiem na opis procesu reformingu, będący jednym z czynników determinujących działanie całego systemu.

Proces reformingu parowego metanu był szeroko badany dla zastosowań przemysłowych. Jednakże w danych literaturowych nie ma zgodnie z tym co do opisu mechanizmu zjawiska. Dodatkowo, dotychczasowe badania koncentrowały się na katalizatorach przemysłowych, które znacząco różniły się od katalizatorów dedykowanych dla ogniw paliwowych SOFC. Z tego względu badania kinetyki procesu reformingu parowego metanu są niezwykle istotnym zagadnieniem. Opis matematyczny procesu ma znaczący wpływ na zachowanie i działanie modelu numerycznego układu ogniw paliwowych typu SOFC. Planowane badania mają na celu wyjaśnienie rozbieżności pomiędzy sprzecznymi danymi literaturowymi dotyczącymi kinetyki procesu reformingu parowego metanu. Zapewnią one wiarygodny opis przebiegu reakcji dla celów wykorzystania w modelowaniu ogniw paliwowych typu SOFC.

Jednym z najważniejszych celów projektu, oprócz dostarczenia rzetelnego opisu zjawiska reformingu parowego metanu, jest stworzenie formalnej metodologii matematycznej dla obiektywnej weryfikacji i oceny proponowanych modeli matematycznych. Powyższe zadania mogą być spełnione przy wykorzystaniu pomocy Uogólnionej Ortogonalnej Metody Najmniejszych Kwadratów (Generalized Least Squares; metoda GLS). Algorytm GLS pozwoli na wyznaczenia najbardziej prawdopodobnych wartości empirycznych parametrów definiujących szybkość reakcji reformingu oraz umożliwi obiektywną weryfikację przygotowanych modeli matematycznych.

Ortogonalna Metoda najmniejszych kwadratów została wprowadzona przez Legendre'a (1805) i początkowo była wykorzystywana głównie w obliczeniach geodezyjnych, a następnie znalazła zastosowanie w astronomii oraz innych naukach fizycznych. Stanowi ona ponadto podstawy teorii błędów oraz jest nazywana siłą napędową współczesnej analizy statystycznej. Jednym z najciekawszych zastosowań metody najmniejszych kwadratów było jej wykorzystanie do odkrycia pulsarów w układach binarnych, za które Hulse oraz Taylor zostali uhonorowani Nagrodą Nobla w dziedzinie fizyki (1993).

Dotychczas nie pokazano pełnego zastosowania Ortogonalnej Metody Najmniejszych kwadratów w analizie zjawiska reformingu parowego metanu, jak również w analizie całej klasy problemów dotyczących modelowania kinetyki procesów katalitycznych. Wstępne badania wykazują duży potencjał zastosowanej metody, która dzięki wykorzystaniu interdyscyplinarnych technik teoretycznej matematyki, inżynierii chemicznej oraz problematyki transportu ciepła i masy pozwala na znaczny popraw uzyskiwanych rezultatów oraz oszacowanie ich niepewności.

Wszystkie zaproponowane analizy numeryczne będą oparte o badania eksperymentalne z wykorzystaniem komercyjnych oraz syntezowanych katalizatorów, w szczególności katalizatora Ni/YSZ, będącego popularnym materiałem dla wysokotemperaturowych ogniw paliwowych typu SOFC. Syntezy materiału katalitycznego uwzględnia warunki syntezy dla ogniw SOFC włączając w to wysokotemperaturowe wypalanie materiału anodowego w temperaturze 1400°C. Badania eksperymentalne kinetyki procesu reformingu parowego metanu zostaną przeprowadzone w reaktorze o przepływie tłokowym (plug-flow reactor PFR) dla sproszkowanych katalizatorów o średnicy ~1µm, co pozwoli na eliminację wpływu zjawisk transportu ciepła i masy. Przeprowadzone pomiary eksperymentalne wraz z oznaczonymi niepewnościami pomiarowymi będą zastosowane do wyznaczenia wpływu błędów aparatury na wartości finalnych rezultatów oraz ich minimalizacji.