

Procesy katalityczne pozostają głównym sposobem unieszkodliwiania groźnych zanieczyszczeń powietrza, np. składników spalin samochodowych i emisji przemysłowych. Przez wiele lat dominowały w przemyśle reaktory wypełnione ziarnami (kulkami, tabletkami) katalizatora. Opory przepływu przez reaktor były znaczne (a więc duże zużycie energii na tłoczenie gazu), opory dyfuzji w dużych ziarnach powodowały niepełne wykorzystanie katalizatora, lecz konstrukcja była prosta i sprawdzona. W latach 80. reaktor monolityczny (czyli np. katalizator samochodowy) zapoczątkował rewolucję w dziedzinie reaktorów katalitycznych. Opory przepływu w długich, prostych kanalikach były małe, a katalizator – naniesiony cienką warstwą na ściankach kanałów – dobrze wykorzystany. Wadą jest jednak słaby transport masy i ciepła do powierzchni kanału – co jest istotne dla szybkich reakcji chemicznych. Ponadto, czołowe powierzchnie ścianek kanałów monolitu stawiają znaczny opór przepływającym gazom, powodują zawirowania i strefy stagnacji, które znacznie pogarszają transport masy, a tym samym wydajność reaktora.

Wiele organizmów żywych przyjmuje opływowe kształty dla minimalizacji oporów przepływu, na przykład ptaki i ryby. Wzorują się na nich takie twory myśli inżynierskiej, jak samoloty, samochody, okręty. Wokół opływowych przedmiotów płyn (powietrze lub woda) przepływa łagodnie, w sposób uwarstwiony, nie tworząc wirów, tym samym zmniejszając zużycie energii. Przyroda wytworzyła takie rozwiązania w ciągu milionów lat ewolucji, ludzkość zaadaptowała je w oparciu o wiedzę w wielu swoich dziełach. Jednak pewne obszary techniki, w tym także inżynieria katalitycznych reaktorów chemicznych, wykazują duży konserwatyzm.

Celem projektu jest opracowanie nowej generacji wypełnień katalitycznych, opartych na koncepcji skrzydła samolotu i nazwanych strukturami „skrzydełkowymi” lub „opływowymi”. **Zasadniczą innowacją jest ukształtowanie ścianek krótkich kanałów tych struktur na podobieństwo skrzydła samolotu.** Proponowane struktury są podobne do krótkich monolitów, jednak zasadniczej zmianie ulegnie kształt ściany kanału z prostopadłościennego na opływowy. Taka geometria, wnioskując z wyników obliczeń (komputerowa dynamika płynów, tzw. CFD), może znacząco zmniejszyć opór czołowy struktur, a tym samym opór przepływu przez reaktor. Jednocześnie, w porównaniu do tradycyjnych monolitów, transport ciepła i masy zostanie poważnie zintensyfikowany. Proponowane struktury umożliwią łatwe sterowanie intensywnością transportu. W poprzednich badaniach udowodniono, że intensywność transportu ciepła i masy można regulować - wyłącznie dla krótkich kanałów - poprzez zmianę ich długości; taka regulacja nie jest możliwa dla tradycyjnych monolitów o długich kanałach (np. tzw. katalizatorów samochodowych).

W pierwszym etapie zaprojektowana zostanie trójwymiarowa geometria struktur opływowych, a następnie, metodą modelowania CFD, zostaną wyznaczone jej opory przepływu oraz współczynniki transportu ciepła i masy. Struktury będą „wydrukowane” w systemie 3D z proszku metalowego, np. techniką stapiania laserowego. Kształt i wymiary "wydruku" będą skontrolowane tomografią komputerową. Kolejnym etapem będzie przeprowadzenie eksperymentów dla zweryfikowania wartości współczynników transportowych wyznaczonych z CFD. Symulacje CFD i doświadczenia będą wykonane dla co najmniej 3 geometrii przekroju kanału (np. koła, kwadratu) i 2-3 długości każdego z nich (np. 5 i 10 mm). Opory przepływu i transport ciepła będą badane w reaktorze doświadczalnym; metalowe struktury będą ogrzewane przepływającym przez nie prądem. Temperatury gazu i struktur będą mierzone termoparami, a opory przepływu mikromanometrem.

Opływowe struktury reaktora są projektem innowacyjnym. Struktury tego typu nie zostały dotąd opisane w literaturze. Zaproponowana koncepcja reaktorów katalitycznych może wywrzeć duży wpływ na ich projektowanie i zastosowanie. Poprzednia podobna innowacja – reaktor monolityczny – spowodowała gwałtowny rozwój procesów katalitycznych. Wypełnienie opływowe może być podobnym punktem zwrotnym. Obliczenia CFD wykazały, że struktury skrzydełkowe mogą istotnie poprawić relację między oporami przepływu a zjawiskami transportu ciepła i masy. Właściwości transportowe struktur mogą być dostosowane do szybkości reakcji, tak, aby niewystarczający transport masy do powierzchni katalizatora nie ograniczał wydajności reakcji. Wraz z technikami drukowania przestrzennego 3D możliwe będzie zaprojektowanie, dla wybranego procesu, wypełnień katalitycznych „skrojonych na miarę”. Zapewnią one lepszą wydajność, oszczędność energii na tłoczenie gazu przez reaktor, mniejszą ilość zużytego katalizatora, mniejsze wymiary i masę reaktora, co jest szczególnie ważne dla dopalania spalin samochodowych.

Zaproponowana innowacyjna koncepcja reaktora oraz procedura optymalizacyjna powinny doprowadzić do istotnych oszczędności w katalitycznych procesach ochrony środowiska i przynieść efekty ekonomiczne oraz społeczne. Oszczędności skutkować mogą istotną poprawą jakości powietrza (w konsekwencji zdrowia publicznego), a także lepszą konkurencją (przyspieszonym rozwojem gospodarki).

Na obecnym, wstępnym etapie projekt ma niewątpliwie charakter badań podstawowych. Jednak przyszłe perspektywy wdrożeniowe są obiecujące, zwłaszcza w obszarze motoryzacji (dopalenie spalin) i w przemyśle chemicznym. Z tego względu jest planowane uzyskanie patentu na wypełnienie, początkowo polskiego, docelowo międzynarodowego (zwłaszcza Unia Europejska, USA i Japonia).