

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРА СИНТЕЗА МЕТАНОЛА ИЗ СИНТЕЗ-ГАЗА Осипова А.Г.<sup>1</sup>, Маткулова Л.Ф.<sup>2</sup>, Мусина А.Р.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Осипова Анна Григорьевна – магистрант;

<sup>2</sup>Маткулова Ляйсан Фиратовна – магистрант;

<sup>3</sup>Мусина Алена Рудольфовна – магистрант,

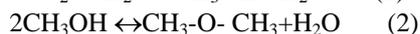
кафедра газохимии и моделирования химико-технологических процессов,  
Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
г. Уфа

**Аннотация:** в статье анализируется метод получения метанола из синтез-газа, используя адиабатический реактор идеального вытеснения. В целях оптимизации процесса проводилось изменение температуры синтез-газа по длине реактора. Было установлено, что с помощью разработанной программы, задавшись требуемым объемом реактора можно узнать степень конверсии, также как и задавшись необходимой конверсией определить объем реактора. Для обеспечения более высокой степени конверсии может быть использована последующая цепь реакторов.

**Ключевые слова:** синтез-газ, метанол, реактор идеального вытеснения, конверсия, объем.

Метанол – одно из важнейших веществ в современной химической и нефтехимической промышленности. Основная часть производимого в мире метилового спирта, около 60%, отправляется на дальнейшую химическую переработку, разделяющуюся на три направления: производства формальдегида, кислот и метилтретбутилового эфира. Метанол также используется в качестве ингибитора гидратообразования при добыче и транспортировке нефти и газа [3].

Метанол получают из синтез-газа по следующей реакции (1). Кроме этого, возможно протекание вторичных реакций (2), (3), (4).



Реакции протекают с выделением тепла и уменьшением объема, но различаются величиной теплового эффекта и степенью контракции. Поэтому, хотя с увеличением давления и понижением температуры для всех этих реакций степень превращения возрастает, в наибольшей степени повышение давления влияет на равновесие основной реакции синтеза, для которой степень контракции максимальна и составляет 3:1. В то же время, понижение температуры ниже некоторого предела нецелесообразно, так как при низких температурах скорость процесса синтеза настолько мала, что не существует катализатора, который в этих условиях мог бы существенно ускорить достижение высокой степени превращения сырья.

Синтез метанола под давлением сопровождается образованием побочных продуктов, влияние которых на скорость образования метанола учесть весьма трудно. В то же время побочные продукты - вода, сложные эфиры, высшие спирты, альдегиды, кетоны, кислоты, углеводороды и другие влияют на хемосорбцию исходных и промежуточных продуктов, образование активированных комплексов и в итоге - на кинетику образования метанола. Эти факторы являются одними из основных причин разнообразия применяемых лимитирующих стадий и получаемых кинетических закономерностей, поскольку условия исследований процесса практически всегда в чем-то отличались друг от друга [3].

Реакцию образования метанола из синтез-газа можно описать, приняв ряд допущений: газовая смесь является идеальным газом, основную реакцию можно описать как элементарную реакцию третьего порядка, реакция необратима, а также ряд других.

Теплоемкости основных веществ, участвующих в химических превращениях [1, 2]:

$$c_{p\text{CO}} = 27.113 + 0.655 \cdot 10^{-2} \cdot T_{in} - 0.1 \cdot 10^{-5} \cdot T_{in}^2 \quad (5)$$

$$c_{p\text{H}_2} = 26.113 + 0.435 \cdot 10^{-2} \cdot T_{in} - 0.033 \cdot 10^{-5} \cdot T_{in}^2 \quad (6)$$

$$c_{p\text{CH}_3\text{OH}} = 19.038 + 9.145 \cdot 10^{-2} \cdot T_{in} - 1.218 \cdot 10^{-5} \cdot T_{in}^2 - 8.034 \cdot 10^{-9} \cdot T_{in}^3 \quad (7)$$

Уравнение скорости реакции:

$$r = k \cdot C_{\text{co}} \cdot C_{\text{H}_2}^2 \quad (8)$$

Для моделирования работы реактора была составлена программа расчета в специальной среде математического моделирования Matlab.

Программа определяет необходимое значение объема смеси для достижения определенного значения конверсии и наоборот. В результате работы программы в качестве примера для объема реакционной смеси 500 литров было получено значение конверсии 41%.

#### ***Список литературы***

1. *Умергалин Т.Г.* Математическое моделирование основных химико-технологических процессов. Уфа: Издательство УГНТУ, 2001. 61 с.
2. *Умергалин Т.Г., Исакова З.М.* Компьютерное моделирование и оптимизация производственных технологических установок: Известия ЮФУ. Технические науки, 2005. № 1 (45). 43-44 с.
3. *Кравцов А.В., Попок Е.В., Юрьев Е.М.* Математическое моделирование процесса синтеза метанола с помощью квантово-химических методов расчета. Т. 320. № 3 изд. Уфа: Известия Томского политехнического университета, 2012. 73 – 78 с.