

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ РЕАКТОРА СИНТЕЗА МЕТАНОЛА

УДК 547.261:66.011

Р.Г. Хасанов, к. т. н., Филиал ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (УГНТУ) в г. Салавате (Салават, Республика Башкортостан, РФ), ugntu.khas@yandex.ru

Р.А. Махмутов, к. т. н., Филиал ФГБОУ ВПО «УГНТУ» в г. Салавате

Б.С. Жирнов, д. т. н., проф., Филиал ФГБОУ ВПО «УГНТУ» в г. Салавате

Д.О. Ефимович, ООО «Газпром добыча Ямбург» (Новый Уренгой, РФ), efimovich\_1991@mail.ru

В статье представлены результаты исследования в области моделирования работы реактора синтеза метилового спирта. Предложено использовать низконапорный газ нефтегазоконденсатных месторождений (НГКМ) для получения метанола. Рассмотрена зависимость температуры в слое катализатора, степени превращения исходного сырья и оптимального температурного профиля от высоты слоя катализатора. Кроме того, изучена зависимость выхода метанола по высоте слоя катализатора при различном содержании инертных газов в исходной смеси. Проанализирована зависимость температуры в зоне реакции по высоте слоя катализатора от различного содержания инертных газов в исходной смеси. Выявлено, что увеличение количества инертных газов в исходной смеси приводит к снижению выхода метанола, поэтому предложено для поддержания необходимой температуры в реакторе с получением заданного количества метанола регулировать содержание инертных компонентов в исходной смеси.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** МЕТАНОЛ, НИЗКОНАПОРНЫЙ ГАЗ, ИНЕРТНЫЙ ГАЗ, МОДЕЛИРОВАНИЕ, РЕАКТОР СИНТЕЗА МЕТАНОЛА.

Одна из важнейших задач современной науки и промышленности – создание процессов, которые позволят сохранить невозобновляемое энергетическое углеводородное сырье: газ, нефть и конденсат. Между тем в мире менее 10 % нефти идет на химическую переработку, а 90 % перерабатываются на топливо и сжигаются [1].

Еще более пессимистична статистика по природному и попутному нефтяному газу. Значительное количество попутного нефтяного газа (ПНГ) из-за отсутствия экономически эффективных технологий переработки до сих пор просто сжигается в факелах в целом ряде нефтедобывающих регионов.

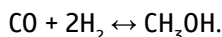
Одним из вариантов использования низконапорного газа НГКМ является получение метанола.

Метанол – один из важнейших по значению и масштабам производства продукт, вырабатываемый химической промышленностью. Интенсивное развитие

производства метанола обуславливается постоянно расширяющимися многообразными сферами его применения [2].

Получение метанола описывается реакцией (1) [3].

Математическое описание адиабатической зоны реактора с аксиальным ходом газа представляет собой систему двух дифференциальных уравнений материального и теплового балансов [4] (2), где  $x$  – мольная доля образовавшегося метанола;  $H$  – высота слоя катализатора, м;  $S$  – сечение слоя катализатора, м<sup>2</sup>;  $k$  – константа скорости прямой реакции;  $\varepsilon_0$  – порозность слоя катализатора;  $T_3$  – температура газа



$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dH} &= \frac{3600 \cdot 22,4 S k (1 - \varepsilon_0) \Phi(x, T_3)}{G} \\ \frac{dT_3}{dH} &= \frac{Q_p - \sum_{i=1}^n [y_i (a_{0i} T_3 + a_{1i} T_3^2 + a_{2i} T_3^3)]}{\sum_{i=1}^n [(C_i + v_i x) (a_{0i} + 2a_{1i} T_3 + 3a_{2i} T_3^2)]} \frac{dx}{dH} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

в слое катализатора;  $K$ ;  $G$  – расход газа на входе в катализатор, м<sup>3</sup>/ч;  $Q_p$  – теплота реакции, ккал/моль;  $v_i$  – стехиометрические коэффициенты уравнения (1);  $a_{ji}$  – коэффициенты в уравнении теплоемкости;  $C$  – теплоемкость;  $\Phi(x, T_3)$  – функция, определяемая по уравнению:

$$\Phi(x, T_3) = \left( \frac{f_{\text{CO}}^{0,5} f_{\text{H}_2}}{f_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0,66}} - \frac{f_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0,34}}{f_{\text{CO}}^{0,5} f_{\text{H}_2} K_f} \right), \quad (3)$$

где  $f$  с соответствующим индексом – фугитивность компонента, определяющаяся по закону Рауля;  $K_f$  – константа равновесия прямой реакции.

Значения коэффициентов  $a_{ji}$  для различных компонентов приведены в таблице.

**Khasanov R.G., Ph.D.**, affiliated branch of the State Educational Establishment of Higher Professional Education «Ufa State Oil Technical University» in Salavat town (Salavat, Republic of Bashkortostan, RF),  
ugntu.khas@yandex.ru

**Makhmutov R.A., Ph.D.**, affiliated branch of the State Educational Establishment of Higher Professional Education «Ufa State Oil Technical University» in Salavat town

**Zhirnov B.S.**, Doctor of Engineering Science, affiliated branch of the State Educational Establishment of Higher Professional Education «Ufa State Oil Technical University» in Salavat town

**Yefimovich D.O.**, Gazprom dobycha Yamburg LLC (Novy Urengoy, RF)

### Simulation foroperation of the methanol synthesis reactor

The article presents the study results in the field of the simulation of the operation of a methyl alcohol synthesis reactor. It is proposed to use a low-pressure gas of oil and gas condensate fields to produce methanol. The dependence of the temperature in the catalyst bed, the degree of conversion of the feedstock and the optimum temperature profile, depending on the height of the catalyst bed, is considered. In addition, the dependence of the methanol yield on the height of the catalyst bed was studied for different contents of inert gases in the initial mixture. The dependence of the temperature in the reaction zone on the height of the catalyst bed was analyzed at the different content of inert gases in the initial mixture. It was found that an increase of inert gases in the starting mixture leads to a decrease in the methanol yield, so it is proposed to control the content of the inert components in the initial mixture in order to maintain the desired temperature in the reactor to obtain a predetermined amount of methanol.

**KEY WORDS:** METHANOL, LOW PRESSURE GAS, INERT GAS, SIMULATION, METHANOL SYNTHESIS REACTOR.

Тепловой эффект реакции определяется по формуле:

$$Q_p = 0,0177T^2 - 15,14T + 26885. \quad (4)$$

Количество холодного байпаса  $G_H$  рассчитывается по уравнению (5), где  $T_0$  – температура холодного байпаса, К;  $T_1$  – температура газа после смешения, К.

Степень превращения после смешения рассчитывается как:

$$x^1 = \frac{G_H}{(G + G_H)}. \quad (6)$$

Математическое описание теплообменника для охлаждения газа на выходе из слоя катализатора представляет собой систему двух дифференциальных уравнений (7), где  $T_4$  – температура нагреваемого газового потока, К;  $m^1$  – число трубок;  $K^{111}$  – коэффициент теплопередачи между потоками газа;  $H_1$  – длина теплообменника, м;  $G_1, G_2$  – расходы газовых потоков.

Расчет системы «теплообменник – ступени реактора синтеза метанола – байпасные потоки» проводится с использованием уравнений (2), (5), (7) в следующей последовательности: предварительно задается температура  $T_3$

Значения коэффициентов  $a_{ji}$

	Метан	Водород	CO	Метанол
$a(0,i)$	6,89	7,12	8,92	26,6
$a(1,i)$	0,0032	-0,0002	-0,0068	-0,0433
$a(2,i)$	$1,00 \cdot 10^{-5}$	$1,00 \cdot 10^{-7}$	$7,00 \cdot 10^{-6}$	$4,00 \cdot 10^{-5}$

на входе в теплообменник; интегрированием системы уравнений (7) определяется температура на входе в слой катализатора; рассчитывается температура на входе в первую ступень с учетом ввода байпасного потока по уравнениям (2) из условия максимума степени конверсии на выходе со ступени; рассчитываются последовательно остальные ступени. Полученная температура  $T_3$  на выходе из слоя катализатора должна совпадать с предварительно принятой температурой с заданной точностью [5].

На рис. 1, 2 представлен расчет температуры в слое катализатора, степени превращения исходного сырья и оптимального температурного профиля в зависимости от высоты слоя катализатора и соотношения  $H_2:CO$  в исходном сырье (содержание в исходном газе инертных – 15 %, метанола – 4 %).

Изменение соотношения  $H_2:CO$  в пределах от 2:1 до 4:1 приводит к незначительному изменению температурного профиля и степени превращения исходного сырья, а следовательно, и выхода метанола. Как правило, на практике

$$G_H = G \frac{\sum_{i=1}^n [(C_i^0 + v_i x)(a_{0i}(T_3 - T_1) + a_{1i}(T_3^2 - T_1^2) + a_{2i}(T_3^3 - T_1^3))]}{\sum_{i=1}^n [C_i^0(a_{0i}(T_1 - T_0) + a_{1i}(T_1^2 - T_0^2) + a_{2i}(T_1^3 - T_0^3))]} \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{dT_4}{dH_1} &= - \frac{22,4m^1 K^{111} (T_3 - T_4)}{G_1 \sum_{i=1}^n [(C_i^0 + v_i x)(a_{0i} + 2a_{1i}T_4 + 3a_{2i}T_4^2)]} \\ \frac{dT_3}{dH_1} &= - \frac{22,4m^1 K^{111} (T_3 - T_4)}{G_2 \sum_{i=1}^n [(C_i^0 + v_i x)(a_{0i} + 2a_{1i}T_3 + 3a_{2i}T_3^2)]} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

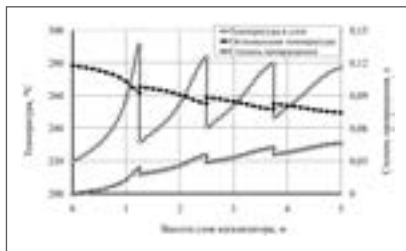


Рис. 1. Зависимость температуры в слое катализатора, степени превращения исходного сырья и оптимального температурного профиля от высоты слоя катализатора при отношении  $H_2:CO = 2:1$

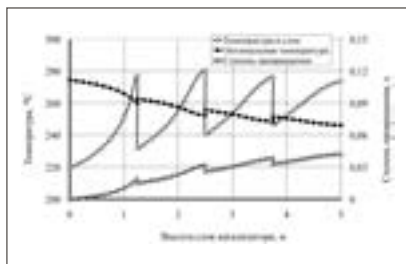


Рис. 2. Зависимость температуры в слое катализатора, степени превращения исходного сырья и оптимального температурного профиля от высоты слоя катализатора при отношении  $H_2:CO = 4:1$

это соотношение поддерживают в пределах от 3:1 и выше для исключения возможности резкого повышения температуры внутри частичек катализатора, которое может привести как к снижению активности катализатора, так и к его разрушению [6].

На рис. 3 показана зависимость выхода метанола по высоте слоя катализатора. Расчет проводился при давлении 5 МПа, содержании в исходной смеси 4 % метанола и при различном содержании инертных компонентов.

Увеличение количества инертных газов в исходной смеси приводит к снижению выхода метанола. Однако при содержании инертных в смеси на уровне 0–10 % выход метанола практически не меняется. Значительное снижение выхода метилового спирта наблюдается начиная с содержания инертных 20 % и более.

Таким образом, незначительное содержание инертных примесей (до 10 %) практически не сказывается на выходе метанола.

На рис. 4 показана зависимость температуры в зоне реакции по высоте слоя катализатора. Расчет проводили при давлении 5 МПа, содержание в исходной смеси метанола 4 % и при различном содержании инертных компонентов.

Увеличение количества инертных газов в исходной смеси способствует снижению температуры в зоне реакции, что вполне объяснимо, поскольку с увеличением содержания инертных компонентов доля реакций синтеза метанола в объеме реактора падает, соответственно, выделяется

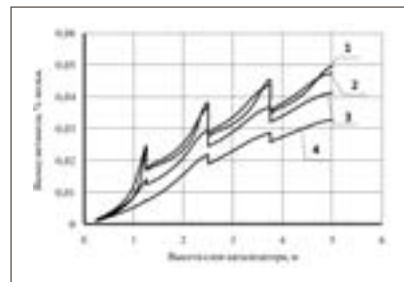


Рис. 3. Зависимость выхода метанола по высоте слоя катализатора при различном содержании инертных газов в исходной смеси: 1 – 0 %; 2 – 10 %; 3 – 20 %; 4 – 30 %

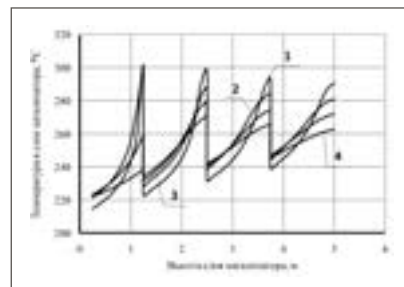


Рис. 4. Зависимость температуры в зоне реакции по высоте слоя катализатора при различном содержании инертных газов в исходной смеси: 1 – 0 %; 2 – 10 %; 3 – 20 %; 4 – 30 %

меньшее количество тепла на единицу объема реактора.

Таким образом, регулируя содержание инертных компонентов в исходной смеси, можно поддерживать необходимую температуру в реакторе с получением заданного количества метанола. ■

#### ЛИТЕРАТУРА

- Хасанов Р.Г., Жирнов Б.С., Махмутов Р.А. Оптимизация технологии малотоннажного процесса синтеза метанола. Саарбрюккен: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014. 116 с.
- Махмутов Р.А., Сазонов И.В. Моделирование промышленного реактора синтеза метанола // Вестник Северо-Кавказского гос. техн. ун-та. 2009. № 3. С. 36–38.
- Хасанов Р.Г., Жирнов Б.С., Муртазин Ф.Р., Махмутов Р.А. Использование нормального закона распределения для описания равновесного состава продуктов синтеза метанола // Газовая промышленность. 2012. № 6. С. 41–43.
- Булкатов А.Н. Современные технологии производства метанола и проблемы экологической безопасности // Нефтепереработка и нефтехимия. 2008. № 6. С. 28–32.
- Юнусов Р.Р., Шевкунов С.Н., Дедовец С.А. и др. Экологические аспекты малотоннажного производства метанола в газодобывающих районах Крайнего Севера // Газовая промышленность. 2007. № 12. С. 52–54.
- Юнусов Р.Р., Шевкунов С.Н., Дедовец С.А. и др. Малотоннажные установки по производству метанола в газодобывающих районах Крайнего Севера // Газохимия. 2008. Вып. 1. С. 58–61.

#### REFERENCES

- Khasanov R.G., Zhirnov B.S., Makhmutov R.A. Optimization of Low-Tonnage Methanol Synthesis Technology. Saarbrücken, LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014, 116 p. (In Russian)
- Makhmutov R.A., Sazonov I.V. Simulation of Industrial Reactor for Synthesis of Methanol. Vestnik Severo-Kavkazskogo Gos. Tech. Universiteta = Bulletin of the North Caucasus State Technical University, 2009, No. 3, P. 36–38. (In Russian)
- Khasanov R.G., Zhirnov B.S., Murtazin F.R., Makhmutov R.A. Use of the Normal Distribution Law to Describe the Equilibrium Composition of Methanol Synthesis Products. Gazovaya Promyshlennost' = Gas Industry, 2012, No. 6, P. 41–43. (In Russian)
- Bulkatov A.N. Modern methanol production technologies and environmental safety problems. Neftepererabotka i neftekhimiya = Petroleum Refining and Petroleum Chemistry, 2008, No. 6, P. 28–32. (In Russian)
- Yunusov R.R., Shevkunov S.N., Dedovets S.A., et al. Ecological Aspects of Low-Burden Methanol Production in Gas-Producing Areas of the Far North. Gazovaya Promyshlennost' = Gas Industry, 2007, No. 12, P. 52–54. (In Russian)
- Yunusov R.R., Shevkunov S.N., Dedovets S.A., et al. Low-Tonnage Facilities for Methanol Production in Gas Producing Areas of the Far North. Gazokhimiya = Gas Chemistry, 2008, Issue 1, P. 58–61. (In Russian)