Науч. рук. доц. А.И. Юсевич

(кафедра нефтегазопереработки и нефтехимии, БГТУ)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ СИНТЕЗ-ГАЗА ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА АММИАКА В СРЕДЕ UNISIM DESIGN

UniSim Design – это система моделирования промышленных процессов с доступным интерфейсом, которая позволяет создавать статические и динамические модели действующих и строящихся установок и осуществлять поиск направлений совершенствования технологических процессов. Объектом моделирования являлся процесс получения синтез-газа (азотоводородной смеси) для производства аммиака. В основе процесса лежат следующие химические реакции:

$$CH_4 + H_2O = CO + 3H_2$$
 (1)

$$CH_4 + 2H_2O = CO_2 + 4H_2$$
 (2)

$$CH_4 + 2O_2 = CO_2 + 2H_2O$$
 (3)

$$CO + H_2O = CO_2 + H_2$$
 (4)

Конверсию метана ведут в две стадии [1]. В трубчатом реакторе происходит взаимодействие метана с водяным паром (при мольном отношении 1:3,0), причем остаточное содержание метана в конвертированном газе должно быть около 8–10%. В шахтном реакторе проводят вторую стадию — парокислородную конверсию  $CH_4$ . При этом весь кислород реагирует в свободном объеме аппарата с метаном. Выделяемое тепло используют для проведения эндотермической реакции паровой конверсии на первой стадии. Количество воздуха, подаваемого в шахтный реактор, подбирают из расчета получения технологического газа с отношением ( $CO+H_2$ ) :  $N_2=3,05-3,1$ . Окончательная переработка технологического газа включает два последовательных аппарата конверсии монооксида углерода.

Целью моделирования являлось исследование влияния различных факторов: расхода водяного пара в реактор риформинга, расхода воздушного потока в шахтный реактор, температуры в реакторе риформинга на производительность и эффективность работы установки. Известно [2], что большой избыток водяного пара имеет ряд недостатков: большой объемный расход реакционной смеси, что требует больших затрат на оборудование; часть подводимого тепла к реактору риформинга фактически потребляется для нагрева избыточного водяного пара, а это отрицательно влияет на эффективность всего процесса.

При разработке модели процесса в среде UniSim Design использовался термодинамический пакет Пенг-Робинсон. Реактор риформинга смоделирован как равновесный реактор и содержит набор реакций, включающий реакции 1, 2. Шахтный реактор представлен последовательностью конверсионного (реакция 3 со 100% степенью конверсии кислорода) и равновесного (реакции 1, 2) реакторов. Два конвертера реализованы как два последовательных равновесных реактора, в которых протекает реакция 4 при разных температурах.

С использованием полученной модели было исследовано влияние такого параметра, как соотношение водяного пара и метана на производительность установки, выход синтезгаза относительно метана и соотношение H:N в конвертированном газе. Уменьшение избытка водяного пара с 2,6 до 1,6 дает значительный эффект. При сохранении общего объемного
расхода (за счет увеличения расхода метана при снижении расхода водяного пара) увеличивается производительность установки по синтез-газу на 30% и снижаются энергетические
затраты. При этом на 13% снижается равновесная степень конверсии метана в первом реакторе, но увеличение на 35% подачи воздуха в шахтный реактор позволяет обеспечить концентрацию СН₄ в конвертированном газе в пределах нормы (≤0,05 об. %). В результате удается получить соотношение водород;азот в синтез-газе, близкое к стехиометрическому (3:1).

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. Семенов, В.П. Производство аммиака / В.П. Семенов. Москва: Химия, 1985. 368 с.
- 2. Process for producing ammonia synthesis gas: patent EP2404869A1, МПК C01B3/02; C01B3/38; C01B3/48; C01B3/50; C01B3/56 / E.Filippi, F. Baratto, S. Panza, R. Ostuni; заявитель Ammonia Casale S.A. CA 2800285; заявл. 12.05.2011; опубл. 12.01.2012.