

УДК 004.02

Моделирование процесса синтеза метил-трет-бутилового эфира*

Дубовцев Д. А.¹, Еникеева Л. В.^{2,3}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Новосибирский государственный университет²,

Уфимский государственный нефтяной технический университет³

В настоящий момент используются различные композиции автомобильных бензинов с пониженным содержанием аренов, в которых уменьшение суммарного количества ароматических углеводородов достигается добавлением кислородсодержащих соединений (оксигенатов) и углеводородных разбавителей. Широкое применение среди оксигенатов получил метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ). МТБЭ позволяет получать товарные бензины с высокой детонационной стойкостью и стабильностью, с уменьшенным нагарообразованием, пониженной токсичностью [1].

За основу для моделирования реактора синтеза МТБЭ была взята диффузионная модель реактора. В данной модели учитывается неравномерность распределения параметров процесса по всему объему, а также осевое перемешивание реагируемых сред. В реальном реакторе перемешивание происходит как в продольном, так и в радиальном направлениях, но учет этих типов диффузии сильно усложняет уравнения диффузионной модели [2], поэтому предполагается, что распределение концентрации равномерно в радиальном направлении, а диффузия происходит только вдоль оси реактора.

Математическая модель представляет собой дифференциальные уравнения в частных производных, при этом только некоторые из уравнений имеют аналитическое решение. В связи с этим возникает необходимость искать приближенные решения с использованием различных численных методов. Достаточно эффективным методом численного решения задач математического моделирования является метод конечных разностей или метод сеток, позволяющий сводить приближенное решение уравнений в частных производных к решению систем алгебраических уравнений. Системы алгебраических уравнений при этом формулируются для приближенных значений решения в некотором наборе точек в расчетной области [2].

Поставленная задача численного расчета процесса синтеза метил-трет-бутилового эфира решена с использованием метода конечных разностей.

Литература

1. Царева З. М., Орлова Е. А. Теоретические основы химтехнологии. Киев: Высшая школа, 1986. 271 с.
2. Kennedy J., Eberhart R. C. Particle swarm optimization, Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, 1995. pp. 1942–1948.
3. A. Tikhonov. Equations of mathematical physics. Nauka, Moscow, 1972. 256 с.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ проект №19-37-60014

MSC2020 35-04

Optimization of the synthesis process of methyl tert-butyl ether by developing a mathematical model

D. A. Dubovtsev¹, L. V. Enikeeva^{2,3}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Novosibirsk State University²,
Ufa State Petroleum Technological University³