ИЗУЧЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РЕАКТОРА СИНТЕЗА МТБЭ НА ОСНОВЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

@ Д.А. Дубовцев, Л.В. Еникеева

dubovcev2@yandex.ru, leniza.enikeeva@yandex.ru

УДК 517.518

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.68.

Исследование термодинамических характеристик реакторов является важнейшей задачей при моделировании системы. Рассматривается температурная зависимость константы равновесия реактора синтеза МТБЭ, а также энтальпия реакции.

Ключевые слова: математика, дифференциальные уравнения, МТБЭ

Study of changes in the thermodynamic parameters of the MTBE synthesis reactor based on a mathematical model

The study of the thermodynamic characteristics of reactors is the most important task in modeling the system. The temperature dependence of the equilibrium constant of the MTBE synthesis reactor, as well as the enthalpy of the reaction, is considered.

Keywords: mathematics, differential equations, mtbe.

Метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ) — эффективный нетоксичный высокооктановый компонент. Применение МТБЭ позволяет производить высокооктановый бензин на основе широкой гаммы базового бензина. Для производства МТБЭ используется реактор адиабатического типа. Моделирование реактора является актуальной задачей, решение которой позволяет составить адекватную математическую модель процесса, описывающую изменение термодинамических характеристик системы [2]. Температурная зависимость константы равновесия приведена в [1]:

$$\ln K_p = I_k - I_H/RT + (a/R)\ln T + (b/2R)T + (c/6R)T^2 + (d/12R)T^3 \quad (1)$$

где I_n и I_k - константы интегрирования уравнений Кирхгофа и Вант-Хоффа соответственно. Параметры a , b , c и d могут быть выведены из молярной теплоемкости соединений, участвующих в реакции в форме

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 19-37-60014).

Дубовцев Дмитрий Александрович, аспирант, УФИЦ РАН ИНК (Уфа, Россия); Dmitry Dubovtsev (Institute of Petrochemistry and Catalysis, Ufa, Russia)

Еникеева Лениза Васимовна, к.ф.-м.н., доцент, Новосибирский государственный университет (Новосибирск, Россия); Leniza Enikeeva (Novosibirsk State University, Russia)

$$C_{pi} = a_i + b_i + c_i T^2 + d_i T^3, \quad (2)$$

и $\ln$ можно рассчитать по зависимости изменения энтальпии реакции от температуры [1]:

$$\Delta H_0 = I + aT + (b/2)T^2 + (c/3)T^3 + (d/4)T^4 \quad (3)$$

Изменения энтальпии и свободной энергии реакции были рассчитаны на основе литературных данных при 298 К, которые составили $\Delta H_0 = -14,4$ ккал/моль-1 и $\Delta G_0 = -3,44$ ккал/моль-1. Из них были получены уравнения для температурной зависимости константы равновесия и изменения энтальпии реакции [1]:

$$\ln K_p = -2,18 + 6970T^{-1} + 3,102 \ln T + (8,432 \cdot 10^{-3})T - (3,155 \cdot 10^{-6})T^2 + (2,332 \cdot 10^{-9})T^3 \quad (4)$$

$$\Delta H_0 = -13800 + 6,142T + (1,670 \cdot 10^{-2})T^2 - (1,250 \cdot 10^{-5})T^3 + (1,485 \cdot 10^{-9})T^4 \quad (5)$$

Литература

1. *Izquierdo J.F.* Константы равновесия для жидкофазного синтеза метил-трет-бутилового эфира // J. Chem. Eng. Date, **123**:3 (2009), 339-343.
2. *Царева З.М., Орлова Е.А.* Теоретические основы химтехнологии. — Высшая школа: Киев, 1986.