

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ВУГЛЕВОДНЕВОГО ПАЛИВА НА КОБАЛЬТОВОМУ КАТАЛІЗАТОРІ ЗА СХЕМОЮ ФІШЕРА-ТРОПША

Захарчук Ю. М., Безносик Ю. О.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
zakharchuk.yu@gmail.com

На сьогоднішній день процесами отримання синтетичного рідкого палива з газів, які містять в собі суміш монооксиду вуглецю і водню, є процес Фишера-Тропша (ФТ-синтез). ФТ-синтез – альтернативне джерело отримання високо якісного палива не з нафти, а з вугілля або біомаси.

Дослідження кінетики ФТ-синтезу є досить важливим завданням, так як даний процес дуже чутливий до температурного режиму, та характеристик каталізатору. Також даний процес супроводжується багатьма побічними реакціями, які негативно впливають на швидкість та селективність реакції. ФТ-синтез є альтернативним джерелом отримання якісного палива не з нафти, а з вугілля або біомаси. Тому дослідження кінетики реакції Фишера-Тропша спрямовані на підвищення селективності і активності каталізаторів, визначення констант швидкості хімічних реакцій є актуальними.

Вибір каталізатору є одним з основних факторів, що впливають на якість і вихід продукту ФТ-синтезу. Для дослідів виготовлено два зразка кобальтових каталізаторів. Перший зразок каталізатору $\text{Co}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ містить наночистинки кобальту одного розміру. Другий зразок каталізатору $(\text{Co})/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ отриманий методом просочення носія розчином нітрату кобальту. Каталізатор отриманий методом просочення $(\text{Co})/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ виявив на порядок вищу активність в порівнянні з монодисперсним. Однак монодисперсний каталізатор показав високу селективність за нижчими вуглеводнями.

Метою даної роботи є розрахунок констант швидкості системи реакцій Фишера-Тропша в присутності гетерогенних каталізаторів на основі отриманих експериментальних даних. Це дає можливість перейти до моделювання і розрахунку промислових реакторів, як з нерухомим шаром каталізатора, так і реакторів більш складних конструкцій. Для вже діючих реакторів, за розробленими математичними моделями, можна перейти до оптимального керування.

Для досягнення поставленої мети в роботі були вирішені наступні задачі:

- проведено теоретичний аналіз математичної моделі кінетики ФТ-синтезу;
- проведено експериментальні дослідження процесу ФТ-синтезу;
- побудовано математичну модель кінетики гетерогенного каталітичного процесу Фишера-Тропша та схему розрахунку констант швидкості реакцій;
- проведено обробку отриманих експериментальних даних з використанням розробленого програмного продукту та розрахувати константи швидкості реакцій процесу Фишера-Тропша.

Для розрахунку кінетики процесу Фишера-Тропша та для знаходження констант швидкості реакцій, було створено програмний модуль, який розроблявся в середовищі MS Visual Studio 2017 на мові C# з використанням технологій .NET Framework v4.6. За допомогою розробленого програмного модуля було розраховано константи швидкості реакції процесу Фишера-Тропша. Проаналізувавши отримані дані, видно, що відносна похибка лежить в межах 2...3 %, що свідчить про адекватність запропонованої моделі розв'язку зворотної задачі хімічної кінетики. Тому можна засвідчити, що дану модель розрахунку констант швидкості можна використовувати для дослідження процесу Фишера-Тропша.