

УДК 544.47

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ CO₂-РИФОРМИНГА МЕТАНА С ОБРАТНОЙ РЕАКЦИЕЙ СДВИГА ВОДЯНОГО ГАЗА

© 2023 г. Ahmad Reza Rahimi^a, Habib AleEbrahim^a,
Morteza Sohrabi^a, Seyed Mohammad Mahdi Nouri^{b, *}

^aDepartment of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, 159145 Iran

^bChemical Engineering Department, Faculty of Petroleum and Petrochemical
Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran

*e-mail: m.nouri@hsu.ac.ir

Поступила в редакцию 25.12.2022 г.

После доработки 14.03.2023 г.

Принята к публикации 19.04.2023 г.

Синтез-газ является краеугольным камнем многих химических процессов для производства широкого спектра нефтехимических продуктов. В данной работе разработана математическая модель для исследования CO₂-риформинга метана в каталитическом реакторе с уплотненным слоем. Для моделирования установки риформинга разработана псевдооднородная двумерная математическая модель и методом конечных разностей решены полученные нелинейные уравнения в частных производных второго порядка. Предполагается, что в реакторе всегда протекает равновесная обратная реакция конверсии водяного газа для регулирования соотношения H₂/CO (≤ 1). Исследовано влияние рабочих условий, включая объемную плотность, пористость, температуру газа на входе и на стенках, диаметр реактора, общий молярный поток газа и отношение CH₄/CO₂ на входе, на производительность реактора. Кроме того, в исследовании изучалось влияние отношения H₂/CO (в диапазоне 0.7–1) на выход синтез-газа. Оценена валидность модели; найдено, что отклонение между результатами модели и экспериментальными данными является приемлемым.

Ключевые слова: моделирование, риформер, синтез-газ, псевдооднородная двумерная модель, парниковые газы, реакция сдвига водяного газа

DOI: 10.31857/S0453881123050088, **EDN:** TQXUYS

Mathematical Modeling of CO₂ Reforming of Methane with Reverse Water Gas Shift Reaction

Ahmad Reza Rahimi¹, Habib AleEbrahim¹, Morteza Sohrabi¹, and Seyed Mohammad Mahdi Nouri^{2, *}

¹*Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, 159145 Iran*

²*Chemical Engineering Department, Faculty of Petroleum and Petrochemical Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran*

**e-mail: m.nouri@hsu.ac.ir*

Synthesis gas is the cornerstone of many chemical processes for manufacturing a broad range of petrochemical products. In this work, a mathematical model was developed for investigation of the CO₂ reforming of methane in a catalytic packed bed reactor. To simulate the reformer, a pseudo homogenous two-dimensional mathematical model was developed and the resulting nonlinear second order partial differential equations were solved using the finite difference method. It was assumed that equilibrium reverse water gas shift reaction always takes place in the reactor to adjust H₂/CO ratio (≤ 1). The effect of operating conditions, including bulk density, porosity, inlet gas and wall temperature, reactor diameter, total molar flow of gas and inlet CH₄/CO₂ ratio on the reactor performance were investigated. Finally, the study investigated the effect of H₂/CO ratio on the outlet synthesis gas product at the range of 0.7–1. The validity of the model was investigated and the deviation between the model results and the experimental data was acceptable.

Keywords: simulation, reformer, synthesis gas, pseudo-homogeneous two-dimensional model, greenhouse gases, water gas shift reaction