

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА И ВОДОРОДА ПРИ ПЛАЗМОСТРУЙНОМ ПИРОЛИЗЕ МЕТАНА^{*)}

Билера И.В., Лебедев Ю.А., Титов А.Ю., Эпштейн И.Л.

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 29, epstein@ips.ac.ru

Целью данной работы является проведение численного моделирования реакции конверсии метана в ацетилен в условиях плазмоструйного пиролиза и сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными [1, 2]. В плазмотроне, работающем на метане или водороде достигается температура в пределах 3000-8000 К. Затем струя высокоэнтальпийного газа попадает во вторую камеру (реактор), где встречается с потоками «холодного» метана. Состав горячего газа, выходящего из плазмотрона, определялся из термодинамического расчета для $p=1$ атм. Смешение газовых потоков из плазмотрона и подаваемого в реактор происходит в начале реактора и считается мгновенным. Для определения параметров полученной смеси использовалась система уравнений сохранения массы и энергии. Закалка продуктов реакции эффективно охлаждает реакционную смесь до температур, при которых химическими реакциями можно пренебречь. При расчете использовалась модель реактора идеального вытеснения, включающая в себя уравнения баланса массы для всех компонент и уравнение баланса энергии. За основу кинетической схемы нами были взят механизм пиролиза ацетилена Ванга и Френклаха [3]. Наряду с процессами с нейтральными частицами в кинетическую схему были включены процессы с заряженными частицами. Учитывались процессы ионизации и диссоциации прямым электронным ударом и реакции ионного обмена. Кроме того, на основе модели, разработанной в [4], учитывалось образование сажи. Эта модель включает в себя процессы зародышеобразования, поверхностный рост твердых частиц и их коагуляцию. Для образования и поверхностного роста зародышей использовалась полиароматическая модель.

В расчетах варьировались величины весовых потоков холодного и горячего газа. Результаты расчетов основных продуктов разложения метана (водорода и ацетилена) хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для продуктов диссоциации метана количество которых незначительно и самого метана наблюдается расхождение между расчётными и экспериментальными результатами при небольшой величине расхода холодного метана. Наши оценки показывают, что это различие может быть связано с предположением о мгновенном смешении потока плазмы и холодного метана. Проведен анализ основных процессов разложения метана и образования ацетилена, в случаях, когда в качестве плазмообразующего газа использовался либо водород, либо метан. Кроме газовых продуктов проводился расчет выхода сажи. Наименьший выход сажи получается при соотношении величины весовых потоков холодного и горячего газа равном единице. Максимальный выход ацетилена наблюдался при соотношении величины весовых потоков холодного и горячего газа равном 1.2 на временах около 10^{-3} с.

Работа выполнена в рамках государственной программы ИНХС РАН

Литература

- [1]. Козлов Г.И., Худяков Г.Н., Кобзев Ю.Н. Нефтехимия, 1967, 7, 224.
- [2]. Кобзев Ю.Н., Козлов Г.И., Худяков Г.Н. Химия высоких энергий, 1970, 4, 519.
- [3]. Wang H., Frenklach M. Combust. Flame, 1997, 110, 173.
- [4]. Epstein I.L., Lebedev Yu.A., Tatarinov A.V. Bilera I.V. A J. Phys. D: Appl. Phys., 2018, 51, 214007.

^{*)} [DOI – тезисы на английском](#)