

КОНВЕРСИЯ БОГАТЫХ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАГРЕТЫХ МЕТАНОКИСЛОРОДНЫХ СМЕСЕЙ В ПЛОСКОМ СТАБИЛИЗИРОВАННОМ ЛАМИНАРНОМ ПЛАМЕНИ

М. Г. Брюков¹, А. А. Беляев², К. Я. Трошин³, П. А. Власов⁴, В. С. Арутюнов⁵

Аннотация: Представлены результаты кинетического моделирования процесса конверсии в синтез-газ богатых предварительно нагретых метанокислородных смесей в плоском стабилизированном ламинарном пламени в области начальных температур 300–800 К, коэффициентов избытка горючего 2,4–3,2 и при давлении 1,5 атм. При начальной температуре 800 К определено оптимальное значение коэффициента избытка горючего $\varphi = 2,77$ (коэффициент избытка окислителя $\alpha = 0,361$), при котором достигается максимальная конверсия метана в водород 79,9% и конверсия в монооксид углерода близка к максимуму и равна 93,5%. При этом при практически полной конверсии метана (99,3%) его конверсия в диоксид углерода CO_2 всего 5,0%, а в воду — 19,6%. Данные результаты практически совпадают с экспериментальными результатами матричной конверсии метанокислородных смесей в синтез-газ, при которой аналогичный предварительный нагрев газовой смеси примерно до такой же температуры происходит за счет внутренней рекуперации тепла горячего синтез-газа. Полученные результаты свидетельствуют об адекватности представленного кинетического моделирования процессов газозофазной окислительной конверсии метана в синтез-газ.

Ключевые слова: метан; кислород; водород; синтез-газ; окислительная конверсия; кинетическое моделирование

DOI: 10.30826/CE25180102

EDN: XPXJSO

Литература

1. Aasberg-Petersen K., Dybkjær I., Ovesen C. V., Schjødt N. C., Sehested J., Thomsen S. G. Natural gas to synthesis gas — catalysts and catalytic processes // *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, 2011. Vol. 3. P. 423–459. doi: 10.1016/j.jngse.2011.03.004.
2. Dybkjær I., Aasberg-Petersen K. Synthesis gas technology large-scale applications // *Can. J. Chem. Eng.*, 2016. Vol. 94. P. 607–612. doi: 10.1002/cjce.22453.
3. Арутюнов В. С., Голубева И. А., Елисеев О. Л., Жагфаров Ф. Г. Технология переработки углеводородных газов. — М.: Изд-во Юрайт, 2020. 723 с.
4. Arutyunov V. S., Shmelev V. M., Lobanov I. N., Politenkova G. G. A generator of synthesis gas and hydrogen based on a radiation burner // *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2010. Vol. 44. P. 20–29.
5. Arutyunov V. S., Shmelev V. M., Sinev M. Yu., Shapovalova O. V. Syngas and hydrogen production in a volumetric radiation burners // *Chem. Eng. J.*, 2011. Vol. 176–177. P. 291–294. doi: 10.1016/j.cej.2011.03.084.
6. Арутюнов В. С., Савченко В. И., Седов И. В., Шмелев В. М., Никитин А. В., Фокин И. Г., Эксанов С. А., Шаповалова О. В., Тимофеев К. А. Новый тип конвертеров природного газа в синтез-газ на основе проницаемых объемных матриц // *Ж. прикладной химии*, 2016. Т. 89. № 11. С. 1450–1458. doi: 10.1134/S1070427216110124.
7. Nikitin A., Ozersky A., Savchenko V., Sedov I., Shmelev V., Arutyunov V. Matrix conversion of natural gas to syngas: The main parameters of the process and possible applications // *Chem. Eng. J.*, 2019. Vol. 377. Article 120883. doi: 10.1016/j.cej.2019.01.162.
8. Savchenko V. I., Nikitin A. V., Zimin Ya. S., Ozerskii A. V., Sedov I. V., Arutyunov V. S. Impact of post-flame processes on the hydrogen yield in matrix partial oxidation reformer // *Chem. Eng. Res. Des.*, 2021. Vol. 175. P. 250–258. doi: 10.1016/j.cherd.2021.09.009.
9. ANSYS Academic Research CFD. CHEMKIN-Pro 15112. — San Diego, CA, USA: Reaction Design. CK-TUT-10112-1112-UG-1, 2011.
10. NUIGMech1.1 High T version. — National University of Ireland Galway. 2020. <http://c3.nuigalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/>.
11. Baigmohammadi M., Patel V., Nagaraja S., Ramalingam A., Martinez S., Panigrahy S., Mohamed A., Somers K. P.,

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, mgbryukov@mail.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, troshin@chph.ras.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, shocktube@yandex.ru

⁵Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, v.arutyunov@mail.ru

- Burke U., Heufer K. A., Pekalski A., Curran H. J.* Comprehensive experimental and simulation study of the ignition delay time characteristics of binary blended methane, ethane, and ethylene over a wide range of temperature, pressure, equivalence ratio, and dilution // *Energ. Fuel.*, 2020. Vol. 34. P. 8808–8823.
12. *Abd El-Sabor Mohamed A., Panigrahy S., Sahu A. B., Bourque G., Curran H. J.* An experimental and modeling study of the auto-ignition of natural gas blends containing C₁–C₇ *n*-alkanes // *P. Combust. Inst.*, 2021. Vol. 38. No. 1. P. 365–373.
13. C₁–C₁₆ HT + Soot mechanism. Version 2003. CRECK Modeling Group, Politecnico di Milano. 2020. <https://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms/107-category-kinetic-mechanisms/411-mechanisms-1911-tot-ht-soot/>.
14. *Peipichestaku W., Frassoldati A., Parente A., Faravel- li T.* Kinetic modeling of soot formation in premixed burner-stabilized stagnation ethylene flames at heavily sooting condition // *Fuel*, 2018. Vol. 234. P. 199–206. doi: 10.1016/j.fuel.2018.07.022.

Поступила в редакцию 23.12.2024

После доработки 09.01.2025

Принята к публикации 16.01.2025