

КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕАКЦИЙ, ПРОТЕКАЮЩИХ НА ПОВЕРХНОСТИ Pt-КАТАЛИЗАТОРА, НА ОКИСЛЕНИЕ МЕТАНА В УСЛОВИЯХ МАТРИЧНОЙ КОНВЕРСИИ

А. В. Озерский¹, А. В. Никитин², В. С. Арутюнов³

Аннотация: Один из способов расширения пределов горения богатых смесей углеводородов — это каталитическая активация исходной смеси. Комбинация предварительной каталитической активации и рекуперации тепла от уходящих продуктов горения может позволить создать компактные конвертеры углеводородных газов в синтез-газ с высокой производительностью. В данной работе проведено кинетическое моделирование матричной конверсии (МК) метана в присутствии Pt-катализатора при коэффициенте избытка окислителя α для исследуемой метановоздушной смеси около 0,25. Расчетная модель состояла из двух последовательных реакторов идеального вытеснения (РИВ). В первом реакторе рассматривалась кинетика гетерогенных процессов с использованием Honeycomb monolith — подтип РИВ, который позволяет рассчитывать микрокинетику каталитических процессов. Во втором реакторе рассматривались газофазные процессы МК. Получено согласие расчетных и экспериментальных результатов. Установлен маршрут каталитического образования CO_2 в условиях МК богатых метановоздушных смесей.

Ключевые слова: кинетика окисления; численное моделирование; детальный кинетический механизм

DOI: 10.30826/CE25180202

EDN: GTTFWS

Литература

1. Rostrup-Nielsen J. R. Syngas in perspective // Catal. Today, 2002. Vol. 71. P. 243–247. doi: 10.1016/S0920-5861(01)00454-0.
2. Крылов О. В. Каталитическая переработка природного газа (Итоги VII Международного симпозиума в Китае, Далянь, 6–10 июня 2004 г.) // Кинетика и катализ, 2005. Т. 46. № 1. С. 169–175.
3. Nikitin A., Ozersky A., Savchenko V., Sedov I., Shmelev V., Arutyunov V. 2019. Matrix conversion of natural gas to syngas: The main parameters of the process and possible applications // Chem. Eng. J., 2019. Vol. 377. Paper 120883. doi: 10.1016/j.cej.2019.01.162.
4. Шаповалова О. В., Синёв М. Ю., Шмелёв В. М., Арутюнов В. С. Оценка влияния катализатора на выход синтез-газа в объемной матричной горелке // Горение и взрыв, 2010. № 3. С. 49–53.
5. Шиянова К. А., Шаповалова О. В., Арутюнов В. С. Влияние катализаторов на матричную конверсию природного газа // Деловой ж. Neftegaz.RU, 2018. № 4(76). С. 96–100.
6. Арутюнов В. С., Шаповалова О. В., Шмелев В. М., Никитин А. В., Савченко В. И., Седов И. В., Тимофеев К. А. Способ получения синтез-газа. Патент РФ № 2644869, 2018.
7. Chou C. P., Chen J. Y., Evans G. H., Winters W. S. Numerical studies of methane catalytic combustion inside a monolith honeycomb reactor using multi-step surface reactions // Combust. Sci. Technol., 2000. Vol. 150. No. 1-6. P. 27–57. doi: 10.1080/00102200008952116.
8. Quiceno R., Perez-Ramirez J., Warnatz J., Deutschmann O. Modeling the high-temperature catalytic partial oxidation of methane over platinum gauze: Detailed gas-phase and surface chemistries coupled with 3D flow field simulations // Appl. Catal. A — Gen., 2006. Vol. 303. No. 2. P. 166–176. doi: 10.1016/j.apcata.2006.01.041.
9. Selvakumar K., Man Young K. Numerical investigation of catalytic combustion in a honeycomb monolith with lean methane and air premixtures over the platinum catalyst // Int. J. Therm. Sci., 2019. Vol. 138. P. 304–313. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2018.12.036.
10. Healy D., Donato N. S., Aul C. J., Petersen E. L., Zinner C. M., Bourque G., Curran H. J. Isobutane ignition delay time measurements at high pressure and detailed chemical kinetic modeling // Combust. Flame, 2010. Vol. 157. No. 8. P. 1540–1551. doi: 10.1016/j.combustflame.2010.01.011.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, alex.ozersky.1992@gmail.com

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, ni_kit_in@rambler.ru

³Федеральный 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

11. *Healy D., Kopp M. M., Polley N. L., Petersen E. L., Bourque G., Curran H. J.* Methane/*n*-butane ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations // *Energ. Fuel.*, 2010. Vol. 24. No. 3. P. 1617–1627. doi: 10.1021/ef901292j.
12. *Savchenko V. I., Nikitin A. V., Zimin Y. S., Ozerskii A. V., Sedov I. V., Arutyunov V. S.* Impact of post-flame processes on the hydrogen yield in partial oxidation of methane in the matrix reformer // *Chem. Eng. Res. Des.*, 2021. Vol. 175. No. 8. P. 250–258. doi: 10.1016/j.cherd.2021.09.009.

Поступила в редакцию 02.12.2024

После доработки 28.01.2025

Принята к публикации 04.02.2025