



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

Жалнин Р.В., Пескова Е.Е.,  
Стадниченко О.А., [Тишкин В.Ф.](#)

Моделирование течения  
многокомпонентного  
химически активного газа на  
примере пиролиза  
углеводородов

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Моделирование течения многокомпонентного химически активного газа на примере пиролиза углеводородов / Р.В.Жалнин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 101. 16 с. doi:[10.20948/prepr-2017-101](https://doi.org/10.20948/prepr-2017-101)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-101>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**Р.В. Жалнин, Е.Е. Пескова, О.А. Стадниченко,  
В.Ф. Тишкин**

**Моделирование течения  
многокомпонентного  
химически активного газа  
на примере пиролиза углеводородов**

**Москва — 2017**

***Р.В. Жалнин, Е.Е. Пескова, О.А. Стадниченко, В.Ф. Тишкин***

**Моделирование течения многокомпонентного химически активного газа на примере пиролиза углеводородов**

Настоящая работа посвящена математическому моделированию ламинарного течения многокомпонентной реагирующей смеси. Смесь представляет собой вязкий теплопроводный газ, в котором происходит химическая реакция термического разложения этана. В работе описаны математическая модель и численный алгоритм, разработанный с использованием схем повышенного порядка точности. Проведено сравнение вычислительных и экспериментальных данных по пиролизу этана в проточном реакторе.

**Ключевые слова:** уравнения Навье-Стокса, WENO схема, химическая кинетика, пиролиз этана

***Ruslan Viktorovich Zhalnin, Elizaveta Evgenievna Peskova, Ol'ga Alekseevna Stadnichenko, Vladimir Fedorovich Tishkin***

**Modeling the flow of multicomponent reactive gas by the example of hydrocarbons pyrolysis**

The article is devoted to mathematical modeling of the laminar flow of a multicomponent reactive mixture. The mixture is a viscous heat-conducting gas. There is a chemical reaction of the thermal decomposition of ethane. The article describes a mathematical model and a numerical algorithm with using high accuracy schemes. Computational and experimental data of ethane pyrolysis in a flowing reactor are compared.

**Key words:** Navier-Stokes equations, WENO scheme, chemical kinetics, pyrolysis of ethane

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 17-71-30014) и при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России, базовая часть госзадания 1.6958.2017/8.9. Работа Стадниченко О.А. выполнена в рамках государственного задания ФГБУН ИК СО РАН (проект № 0303-2016-0017).

## **Введение**

Бурное развитие химической промышленности обусловило широкий интерес к исследованию течений реагирующего газа. В настоящее время одним из основных подходов исследования является математическое моделирование. Проведение вычислительного эксперимента дает возможность детального исследования химически реагирующих потоков в зависимости от условий проведения реакции и избежать дорогостоящих экспериментальных исследований.

Одним из актуальных направлений химической промышленности является процесс термического пиролиза углеводородов, продуктами которого являются низшие олефины – этилен и пропилен, применяемые в производстве полиэтилена, полипропилена, этанола, ацетона, фенола, лаков, растворителей и другой продукции. В промышленности распространение получили процессы термического пиролиза в трубчатых печах. В Институте катализа имени Г.К. Борескова СО РАН проводятся работы по созданию и исследованию низкотемпературных установок пиролиза, в которых подвод энергии в зону реакции осуществляется за счет термического и лазерного излучения [1, 2]. Чтобы понять эффективность введения лазерного излучения, необходимо исследовать традиционный процесс пиролиза, происходящий при воздействии внешнего обогрева реакционной зоны.

Процессы пиролиза углеводородов, исследуемые в ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, характеризуются течениями, в которых скорость смеси много меньше скорости распространения звука в данной смеси. Данный факт приводит к использованию в качестве математической модели модификацию уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [3-5]. Для построения дискретной модели используется равномерная прямоугольная сетка. Аппроксимация конвективных членов уравнений Навье-Стокса осуществляется с использованием WENO схемы пятого порядка точности [6, 7]. Расчет уравнений химической кинетики выделяется в отдельный шаг, для их решения применяется схема второго порядка точности, основанная на специфическом виде химических задач [8].

Проведена серия расчетов для моделирования течения вязкого, теплопроводного, химически активного газа в проточном реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов. Проведено сравнение экспериментальных и расчетных данных по конверсии этана для различных температур нагревательных элементов.

## **Математическая модель**

Для описания дозвукового течения многокомпонентной реагирующей смеси в настоящей работе используется модификация уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [3-5]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_i + Q_i, \\
\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}, \\
\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}.
\end{aligned} \tag{1}$$

Давление  $p$  представляется в виде:

$$p(x, t) = p_0 + \pi(x, t).$$

Здесь  $p_0$  – термодинамическое давление, постоянное в области,  $\pi(x, t)$  – динамическая составляющая давления.

Система дополнена уравнением состояния и условием на дивергенцию вектора скорости [3]:

$$\begin{aligned}
p_0 &= \rho R T \sum_i \frac{Y_i}{M_{wi}}, \\
S \equiv \nabla \cdot \vec{v} &= \frac{1}{\rho C_p T} \left( \nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_i \rho D_{im} \nabla Y_i \nabla h_i \right) + \\
&+ \frac{1}{\rho} \sum_i \frac{M_w}{M_{wi}} (\nabla \cdot \rho D_{im} \nabla Y_i) + \frac{1}{\rho} \sum_i \left( \frac{M_w}{M_{wi}} - \frac{h_i}{C_p T} \right) Q_i.
\end{aligned} \tag{2}$$

Здесь  $\rho$  – плотность,  $\vec{v}$  – вектор скорости,  $Y_i$  – массовая доля  $i$ -ой компоненты,  $h$  – энтальпия смеси,  $T$  – температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $M_{wi}$  – молекулярная масса  $i$ -ой компоненты,  $Q_i$  – скорость образования или расхода  $i$ -ой компоненты,  $\vec{J}_i$  – вектор диффузионного потока  $i$ -ой компоненты,  $\bar{\bar{\tau}}$  – тензор вязких напряжений,  $\vec{q}$  – вектор потока тепла для смеси,  $C_p$  – теплоемкость смеси при постоянном давлении.

Тензор вязких напряжений определяется следующим образом:

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu \left( \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{v}) I,$$

здесь  $I$  – единичный тензор,  $\mu$  – коэффициент динамической вязкости смеси.

Вектор диффузионного потока компоненты и вектора потока тепла для смеси определяются с использованием модели средних по смеси значений [3]:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{im} \nabla Y_i,$$

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_i h_i \rho D_{im} \nabla Y_i.$$

Здесь  $D_{im}$  – средний по смеси коэффициент диффузии  $i$ -ой компоненты,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности смеси.

Средний по смеси коэффициент диффузии  $i$ -ой компоненты вычисляется через бинарные коэффициенты диффузии:

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j \neq i} X_j / D_{ji}}.$$

$X_i$  – мольная доля  $i$ -ой компоненты, коэффициент диффузии бинарной смеси определяется выражением [9]:

$$D_{ji} = 2.628 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{T^3 (M_i + M_j) / 2M_{wi} M_{wj}}}{p \sigma_{ji}^2 \Omega_D(T_D^*)},$$

где  $\sigma_{ji}$  – диаметр сечения соударений,  $\Omega_D(T_D^*)$  – момент от интеграла столкновений частиц сорта  $i$  и  $j$ .

Для расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности многокомпонентной смеси использовалась следующая формула:

$$k = \sum_i X_i k_i,$$

где  $k_i$  – коэффициент вязкости (теплопроводности)  $i$ -ой компоненты смеси. В настоящей работе используются температурные зависимости для коэффициентов вязкости и теплопроводности отдельных компонент смеси, предложенные в [1, 2].

Теплоемкость смеси при постоянном давлении определяется следующим образом:

$$C_p = \sum_i Y_i C_{pi}.$$

$C_{pi}$  – удельная теплоемкость  $i$ -ой компоненты при постоянном давлении, задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур.

Для нахождения энтальпии  $i$ -ой компоненты газовой смеси используется выражение:

$$h_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T) + h_i^0.$$

Здесь  $h_i^0$  – энтальпия образования компонента смеси при стандартной температуре  $T_0 = 298.15^\circ K$ .

Скорость образования или расхода  $i$ -ой компоненты определяется суммированием по скоростям всех  $N$  элементарных стадий реакции:

$$Q_i = M_{wi} \sum_n (v''_{in} - v'_{in}) w_n.$$

Здесь  $v''_{in}$ ,  $v'_{in}$  – стехиометрические коэффициенты  $i$ -ой компоненты в стадии реакции  $n$ ,  $w_n$  – скорость  $n$ -ой стадии:

$$w_n = k_n \prod_i (c_i)^{v'_{in}} - k_{-n} \prod_i (c_i)^{v''_{in}},$$

где  $c_i = \rho Y_i / M_{wi}$ ,  $k_n$ ,  $k_{-n}$  – константы скоростей прямой и обратной стадии реакции, которые вычисляются согласно выражениям Аррениуса [10].

В настоящей работе рассматривается кинетическая схема, в которой участвуют только прямые реакции. Константы скоростей определяются следующим образом:

$$k_n = A_n e^{-E_n/RT},$$

где  $A_n$  – предэкспоненциальный множитель,  $E_n$  – энергия активации.

## Вычислительный алгоритм

Используется процедура расщепления по физическим процессам [3], которая заключается в том, что учет химических превращений выделяется в отдельный шаг, на котором решается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = Q_i, \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_i Q_i h_i. \end{cases} \quad (3)$$

С учетом (3) в векторной форме систему уравнений (1) можно представить в виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = 0. \quad (4)$$

Векторы  $U$ ,  $F^{(1)}(U)$ ,  $F^{(2)}(U)$ ,  $H^{(1)}(U)$ ,  $H^{(2)}(U)$  имеют следующий вид:

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_i \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho h \end{pmatrix}, F^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u Y_i \\ \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho hu \end{pmatrix}, F^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} \rho v Y_i \\ \rho uv \\ \rho v^2 \\ \rho hv \end{pmatrix}, H^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} J_{ix} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ q_x \end{pmatrix}, H^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} J_{iy} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ q_y \end{pmatrix},$$

$$J_{ix} = \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, J_{iy} = \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y},$$

$$q_x = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{i=1}^M h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, q_y = \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{i=1}^M h_i \rho D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial y},$$

$$\tau_{xx} = \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right), \tau_{yy} = \mu \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right),$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right).$$

Здесь  $i = 1, \dots, M$ ,  $M$  – количество элементов в газовой смеси.

Для построения дискретной модели вводится сетка, равномерная по каждому направлению:

$$\omega_{\Delta} = \omega_{\Delta x} \times \omega_{\Delta y},$$

$$\omega_{\Delta x} = \left\{ \Delta_i, i = 1, \dots, N_x, \Delta_i = [x_{i-1}, x_i], |\Delta_i| = x_i - x_{i-1} = h_x, h_x N_x = L_x \right\},$$

$$\omega_{\Delta y} = \left\{ \Delta_j, j = 1, \dots, N_y, \Delta_j = [x_{j-1}, x_j], |\Delta_j| = x_j - x_{j-1} = h_j, h_j N_j = L_y \right\}.$$

где  $L_{x(y)}$  – размеры расчетной области вдоль осей  $\{x, y\}$ .

Все газодинамические параметры рассматриваются как интегральные средние в ячейках сетки.

Для решения уравнений химической кинетики используется схема, предложенная в [8]. Система дифференциальных уравнений, описывающая химические превращения в (3), представляется в виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = -c_i \varphi_i(\mathbf{c}) + \psi_i(\mathbf{c}), \mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M), c_i \geq 0, \varphi_i(\mathbf{c}) \geq 0, \psi_i(\mathbf{c}) \geq 0.$$

Решение данной системы находим простыми итерациями:

$$\hat{c}_i^{s+1} = \frac{c_i + \tau\psi_i(\bar{c}^s) \left( 1 + \frac{\tau\varphi_i(\bar{c}^s)}{2} \right)}{1 + \tau\varphi_i(\bar{c}^s) + \frac{(\tau\varphi_i(\bar{c}^s))^2}{2}}, \bar{c}^s = \frac{\mathbf{c} + \hat{\mathbf{c}}^s}{2}, \hat{\mathbf{c}}^0 = \mathbf{c}.$$

Здесь  $c_i$  – решение в исходный момент времени,  $\hat{c}_i$  – решение в новый момент времени.

Для решения системы выполняется две итерации, последующие итерации выполнять не следует: они не повышают порядок точности и ухудшают надежность схемы [8].

Для аппроксимации системы уравнений (4) используется дифференциально-разностная схема вида:

$$\frac{dU_{ij}}{dt} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{F}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{F}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} - \left( \frac{\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{H}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{H}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} \right) = 0.$$

Здесь  $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)}$ ,  $\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)}$  – дискретные потоки, отвечающие за конвективный перенос, которые рассчитываются по схеме Лакса-Фридрихса-Русанова [11, 12]:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left( \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r) + \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^l) - \alpha_1 (U_{i+1/2j}^r - U_{i+1/2j}^l) \right), \\ \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left( \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r) + \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^l) - \alpha_2 (U_{ij+1/2}^r - U_{ij+1/2}^l) \right). \end{aligned}$$

При вычислении дискретных потоков  $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)}$ ,  $\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)}$  полагается:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \max \left( \sqrt{(u_{i+1/2j}^r)^2 + (v_{i+1/2j}^r)^2}, \sqrt{(u_{i+1/2j}^l)^2 + (v_{i+1/2j}^l)^2} \right), \\ \alpha_2 &= \max \left( \sqrt{(u_{ij+1/2}^r)^2 + (v_{ij+1/2}^r)^2}, \sqrt{(u_{ij+1/2}^l)^2 + (v_{ij+1/2}^l)^2} \right). \end{aligned}$$

$U_{i+1/2j}^l$ ,  $U_{i+1/2j}^r$  – значения вектора  $U$  на грани между  $i$  и  $i+1$  ячейками слева и справа. Для их вычисления используется WENO схема пятого порядка точности [6, 7].

$\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}$ ,  $\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$  – потоки, отвечающие за диффузионный перенос и перенос тепла, для их расчета используется схема с центральными разностями.

Поскольку вычисленное таким образом предварительное поле скорости  $\vec{v}^*$  не удовлетворяет условию (2) на дивергенцию скорости [3], оно корректируется после вычисления динамической составляющей давления  $\pi$ :

$$\vec{v} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \pi.$$

Динамическая составляющая давления рассчитывается из уравнения Пуассона следующего вида [3]:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \pi = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{v}^* - S).$$

## Описание задачи пиролиза этана в проточном реакторе

Исследование течения газа с использованием построенного алгоритма проводится в проточном реакторе пиролиза этана, разработанного в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, схема которого представлена на рис. 1. Общая длина реактора **220 мм**, диаметр **21 мм**, длина нагревательных элементов **70 мм**.

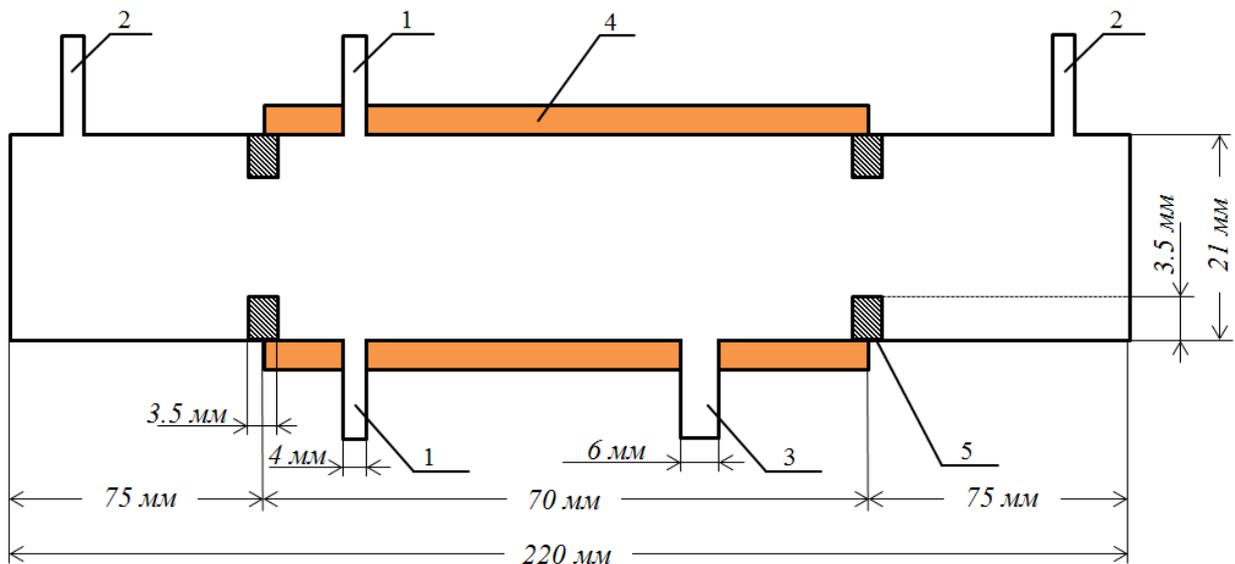


Рис. 1. Геометрия расчетной области

Рассматривается следующая постановка начальных и граничных условий. В начальный момент времени реактор заполнен метаном температуры  $T = 27^\circ \text{C}$ . Давление в области  $p = 101325 \text{ Па}$ . На вводах (1) и (2) определены условия втекания газового потока с расходом  $0.754 \text{ мг/с}$  и  $0.316 \text{ мг/с}$  соответственно. Через вводы (1) подается этан, температура  $T = 327^\circ \text{C}$ . Через вводы (2) подается метан, температура  $T = 27^\circ \text{C}$ . Выход продуктов пиролиза осуществляется через выход (3).

Для стенок реактора задаются условия:

- Температура нагревательных элементов (4)  $T = 642^\circ \text{C}$ .

- Температура торцевых стенок  $T = 27^\circ \text{C}$ .
- Температура корпуса вне нагревателя и торцевых стенок изменяется по линейному закону от  $642^\circ \text{C}$  к  $27^\circ \text{C}$  у торцевых стенок.

Исходя из начальных и граничных условий постановки задачи, разброс температур внутри реактора может составлять сотни градусов. В работах [1, 2] предлагается использовать температурные зависимости для теплоемкости, коэффициентов динамической вязкости, коэффициентов теплопроводности для компонент газовой смеси, которые позволяют проводить более точный расчет температурного поля. Параметры Леннард-Джонса, необходимые для расчета коэффициента диффузии также представлены в работах [1, 2].

При описании математической модели пиролиза этана с использованием упрощенных схем реакции, высокая конверсия этана достигается на более поздних временах, чем она наблюдается экспериментально [13]. При высоких температурах реакции в смеси появляются компоненты  $\text{C}_2\text{H}_2$  и  $\text{C}_3\text{H}_6$ , содержание которых составляет выше 1%, поэтому их также необходимо учитывать при выборе схемы реакции. В настоящей работе используется схема автокаталитического радикального механизма пиролиза этана (таблица 1), предложенная в [14], которая хорошо описывает пиролиз этана для его высоких конверсий.

Таблица 1

### Схема и кинетические параметры механизма пиролиза этана

№	Стадия	$\lg A_i, 1/\text{с}$ или $л / (\text{моль} \cdot \text{с})$	$E_i, \text{кДж} / \text{моль}$
1	$\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_3^\bullet + \text{CH}_3^\bullet$	16.0	360.0
2	$\text{CH}_3^\bullet + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_5^\bullet$	10.0	50.0
3	$\text{C}_2\text{H}_5^\bullet \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}^\bullet$	13.5	170.0
4	$\text{H}^\bullet + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5^\bullet$	11.0	40.0
5	$\text{H}^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5^\bullet$	10.4	8.4
6	$\text{CH}_3^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow n - \text{C}_3\text{H}_7^\bullet$	10.9	33.0
7	$n - \text{C}_3\text{H}_7^\bullet \rightarrow \text{CH}_3^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4$	13.9	137.0
8	$\text{C}_2\text{H}_5^\bullet + \text{C}_2\text{H}_5^\bullet \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_6$	10.0	8.4
9	$n - \text{C}_3\text{H}_7^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5^\bullet + \text{C}_3\text{H}_6$	7.4	27.6
10	$\text{CH}_3^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_3^\bullet$	8.6	35.0
11	$\text{CH}_3^\bullet + \text{C}_2\text{H}_3^\bullet \rightarrow \text{CH}_4 + \text{C}_2\text{H}_2$	9.95	3.2
12	$\text{C}_2\text{H}_3^\bullet + \text{H}^\bullet \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$	10.0	0.0
13	$\text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \bullet\text{C}_2\text{H}_4$	15.8	253.0

№	Стадия	$\lg A_i, 1/c$ или $л / (моль \cdot с)$	$E_i, кДж / моль$
14	$\cdot C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow CH_3 + n - C_3H_7$	14.7	216.0
15	$\cdot C_2H_4 \rightarrow C_2H_4$	5.38	0.0

## Результаты вычислительного эксперимента

В результате подачи в реакционную зону химически активного газа и нагрева стенок реактора происходит разложение этана на продукты пиролиза. Вследствие течения газа (рис. 2), диффузии и химических реакций происходит перераспределение компонент смеси по всему объему реактора. Распределение основных компонент смеси – этана, этилена, водорода, метана в продольном разрезе реактора представлены на рис. 2-6. Метан преимущественно наблюдается в буферных зонах за счет постоянной его подачи через вводы (2) и наличия диафрагм (5), которые препятствуют его интенсивному проникновению в реакционную зону (рис. 4). Целевые продукты пиролиза – этилен (рис. 5) и водород (рис. 6) преимущественно наблюдаются в правой части реакционной зоны и пристеночных областях нагревательных элементов. Этот факт объясняется тем, что температура газа (рис. 7) в этих областях максимальна, следовательно, химические реакции протекают наиболее интенсивно. Присутствие продуктов пиролиза в буферных зонах обусловлено диффузией газа.

Высокая температура в правой части реакционной зоны объясняется постоянным нагревом стенок реактора и удаленностью от областей вводов исходного газа, в которых газ не успевает прогреться за счет постоянной его подачи.

Максимальное значение плотности (рис. 8) наблюдается на вводах газовой смеси и у торцевых стенок, так как нагрев газа приводит к его разрежению. Это объясняется тем, что давление (рис. 9) внутри реактора равно атмосферному и по своим характеристикам газ близок к идеальному.

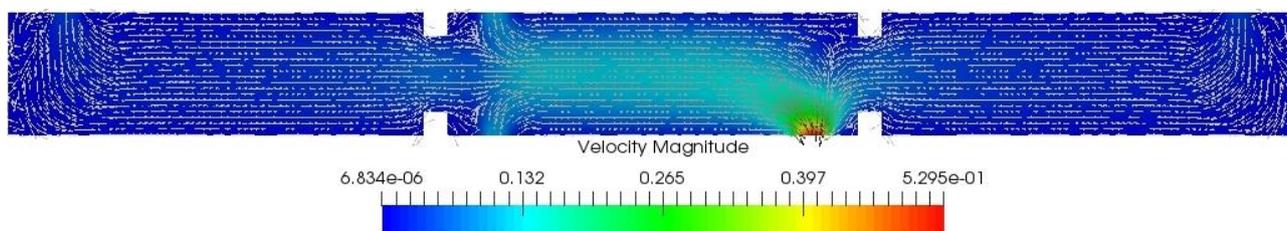


Рис. 2. Направление вектора скорости

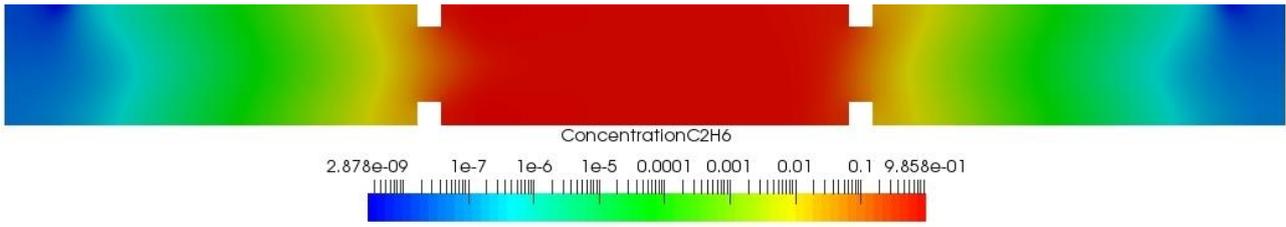


Рис. 3. Распределение массовой доли этана

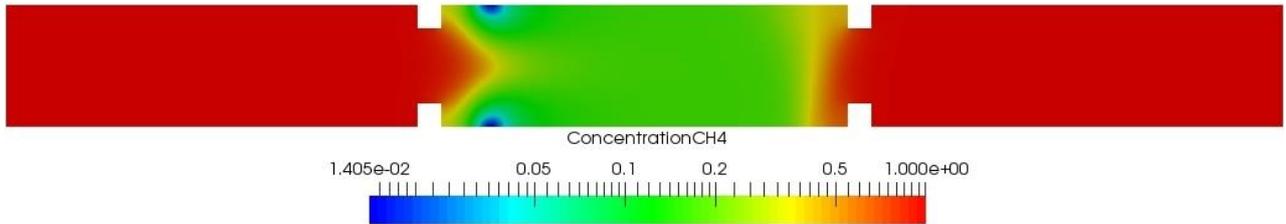


Рис. 4. Распределение массовой доли метана

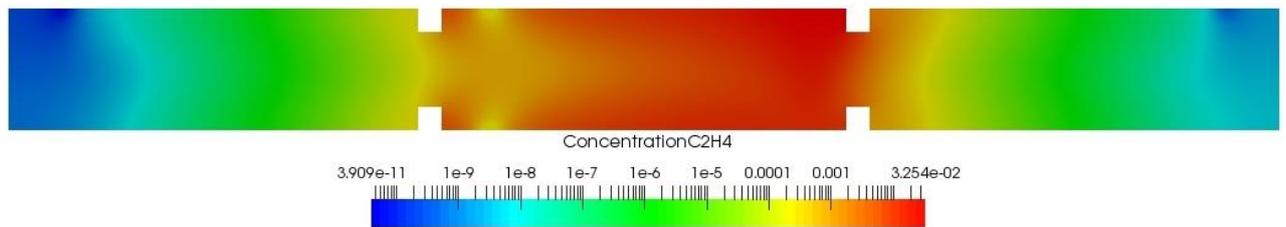


Рис. 5. Распределение массовой доли этилена

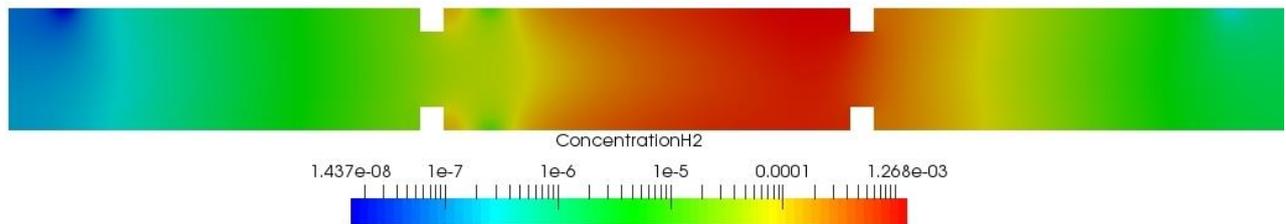


Рис. 6. Распределение массовой доли водорода

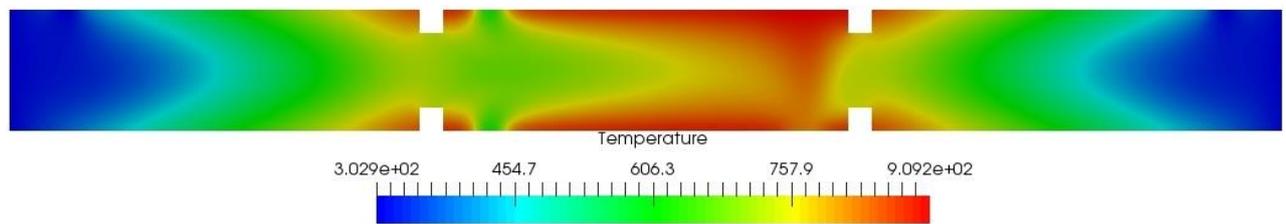


Рис. 7. Распределение температуры

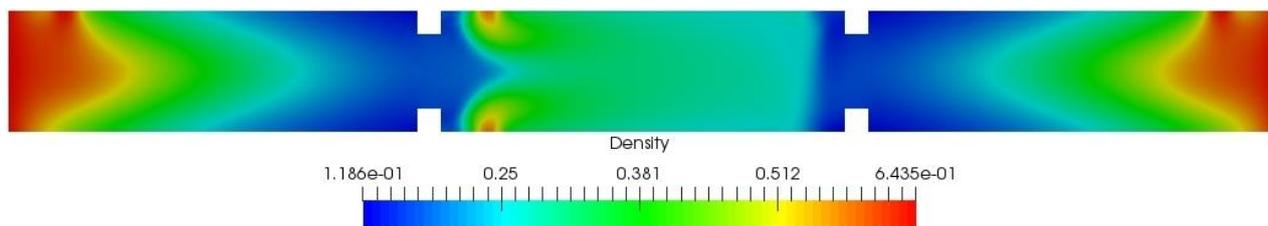


Рис. 8. Распределение плотности

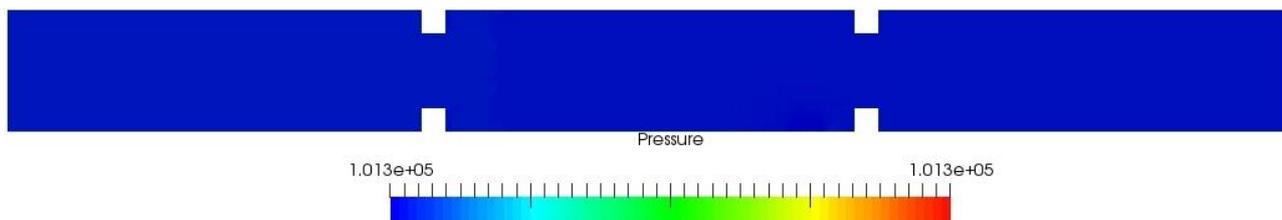


Рис. 9. Давление

Сравнение экспериментальных и расчетных данных проводилось по конверсии этана при различных пристеночных температурах. Была проведена серия расчетов для следующих температур:  $599^{\circ}\text{C}$ ,  $648^{\circ}\text{C}$ ,  $700^{\circ}\text{C}$ ,  $742^{\circ}\text{C}$ ,  $760^{\circ}\text{C}$ ,  $778^{\circ}\text{C}$ . На рис. 10 представлена зависимость экспериментальной и расчетной конверсии этана от температуры нагревательных элементов. При температуре  $648^{\circ}\text{C}$  конверсия этана составляет ниже 5%, при температуре  $760^{\circ}\text{C}$  возрастает до 48%. График зависимости демонстрирует хорошее совпадение экспериментальных данных и результатов расчетов на основе построенных численных алгоритмов.

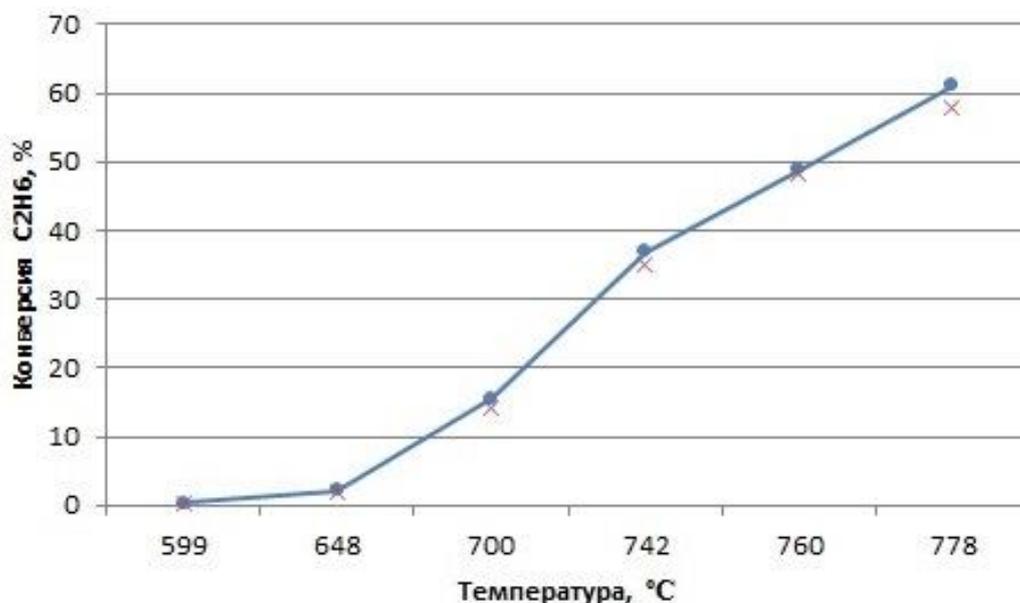


Рис. 10. Зависимость конверсии этана от пристеночной температуры. Данные экспериментов – точки, данные моделирования – крестики

## Заключение

В данной работе представлен численный алгоритм на основе схем повышенного порядка точности для моделирования динамики многокомпонентного газа с учетом процессов диффузии, вязкости, теплопроводности и химических реакций.

Проведено исследование дозвукового течения газа в проточном реакторе с внешним обогревом, предназначенном для термического пиролиза углеводородов. В качестве схемы реакции принята компактная кинетическая схема пиролиза этана. Получены распределения основных компонент газовой смеси и газодинамических параметров в продольном срезе реактора. Полученные картины соответствуют основным физико-химическим законам, протекающим в ходе реакции пиролиза этана с заданными начальными и граничными условиями. Проведено сравнение экспериментальных и расчетных данных по зависимости конверсии этана от пристеночной температуры. Полученные результаты демонстрируют высокую достоверность используемых алгоритмов.

Построенный алгоритм можно использовать для исследования дозвуковых течений газа. В частности, при исследовании пиролиза углеводородов возможно определение размеров реактора, температур нагревательных элементов, расхода и состава газовой смеси для максимального выхода целевых продуктов реакции.

## Библиографический список

1. Стадниченко О.А., Снытников В.Н., Снытников Вл.Н. Математическое моделирование потоков многокомпонентного газа с энергоемкими химическими процессами на примере пиролиза этана // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15, № 4. С. 658-668.  
URL: [https://elibrary.ru/download/elibrary\\_22668722\\_67610604.pdf](https://elibrary.ru/download/elibrary_22668722_67610604.pdf)
2. Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov Vl.N., Masyuk N.S. Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects // Chemical Engineering Research and Design. 2016. V. 109. P. 405-413. doi:10.1016/j.cherd.2016.02.008
3. Борисов В.Е., Якуш С.Е. Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16, вып. 2.  
URL: <http://chemphys.edu.ru/issues/2015-16-2/articles/544/>
4. Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L. A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations // Journal of Computational Physics. 1998. Vol. 142. Issue 1. P. 1-46. doi:10.1006/jcph.1998.5890

5. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // *Combustion Theory and Modelling*. 2000. Vol. 4. Issue 4. P. 535-556. doi:10.1088/1364-7830/4/4/309
6. Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // *ICASE Report 97-65*. 1997.
7. Жалнин Р.В., Змитренко Н.В., Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. Численное моделирование развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова с использованием схем высокого порядка точности // *Математическое моделирование*. 2007. Т. 19, № 20. С. 61-66. URL: <http://www.mathnet.ru/links/d0b632a5ba1bdf152f5ba8a4c2ea2ce1/mm1201.pdf>
8. Белов А.А., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Моделирование химической кинетики в газах // *Математическое моделирование*. 2016. Т. 28, № 8. С. 46-64. URL: <http://www.mathnet.ru/links/1774e7e4b0567aa710f631f78b17ecf4/mm3757.pdf>
9. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961. 929 с.
10. Штиллер В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. Москва: Мир, 2000. 176 с.
11. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 1961. Т. 1, № 2. P. 267-279.
12. Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation // *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1954. Vol. 7. Issue 1. P. 159-193. doi:10.1002/cpa.3160070112
13. Снытников В.Н., Мищенко Т.И., Снытников Вл.Н., Стояновская О.П., Пармон В.Н. Автокаталитическое газофазное дегидрирование этана в «бесстеночном» реакторе // *Кинетика и катализ*. 2010. Т. 51, № 1. С. 12-20. URL: [https://elibrary.ru/download/elibrary\\_13066531\\_29438607.pdf](https://elibrary.ru/download/elibrary_13066531_29438607.pdf)
14. Nurislamova L.F, Stoyanovskaya O.P., Stadnichenko O.A., Gubaidullin I.M., Snytnikov V.N., Novichkova A.V. Few-Step Kinetic Model of Gaseous Autocatalytic Ethane Pyrolysis and Its Evaluation by Means of Uncertainty and Sensitivity Analysis // *Chemical Product and Process Modeling*. 2014. Vol. 9. No. 2. P. 143-154. doi:10.1515/cppm-2014-0008

## Оглавление

Введение .....	3
Математическая модель.....	3
Вычислительный алгоритм .....	6
Описание задачи пиролиза этана в проточном реакторе .....	9
Результаты вычислительного эксперимента .....	11
Заключение.....	14
Библиографический список.....	14