

УДК 519.63

Численное исследование пиролиза этана в цилиндрическом реакторе при воздействии лазерного излучения

Панов А.В.¹, Орехова В.Н.¹

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет¹

Аннотация: В работе представлены результаты численного моделирования процесса пиролиза этана в цилиндрическом реакторе под воздействием лазерного излучения. Математическая модель основана на системе уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха в цилиндрической системе координат и дополнена кинетической схемой пиролиза этана и уравнением переноса лазерного излучения с учётом поглощения этиленом. Проведена серия вычислительных экспериментов при различных температурах стенок. Показано, что лазерное излучение позволяет снизить температуру стенок на 100 – 150°C для осуществления пиролиза этана. Установлено, что при умеренных температурах стенок 1073 К и наличии лазерного излучения достигается накопление этилена как целевого продукта.

Ключевые слова: математическое моделирование, пиролиз этана, лазерное излучение.

В современной нефтехимии процесс пиролиза углеводородов является одним из основных способов получения низших олефинов, в частности, этилена. Повышение эффективности и селективности этого процесса остаётся важной научно-технической задачей. Одним из перспективных подходов является использование лазерного излучения для инициирования и интенсификации химических реакций, что позволяет снизить энергозатраты и требования к материалу установок. В связи с этим актуальным является построение адекватных математических моделей и разработка численных алгоритмов для исследования реагирующих течений в трубчатых реакторах с учётом сложной химической кинетики и энерговклада от лазерного излучения.

В настоящей работе проведено численное исследование воздействия лазерного излучения на процесс пиролиза этана в реакторе цилиндрической формы.

В основе модели лежит система уравнений, описывающая дозвуковое течение многокомпонентного сжимаемого вязкого теплопроводного газа в цилиндрической системе координат [1]. Уравнения получены из системы Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [2] и включают систему обыкновенных дифференциальных уравнений, учитывающих химические реакции и дифференциальное уравнение для переноса лазерного излучения, поглощаемого этиленом. Химическая кинетика описывается схемой пиролиза этана, включающей 15 элементарных стадий и 12 компонентов газовой смеси [3]. Для каждой стадии используется уравнение Аррениуса. Поглощение лазерного излучения моделируется с учётом насыщения и зависимости коэффициента поглощения от концентрации этилена и температуры газа.

Проведена серия расчётов для реактора длиной 220 мм и диаметром 20 мм. Рассмотрены два режима: высокотемпературный (температура стенки 1173 К, температура входящего этана 1073 К) и умеренно-температурный (температура стенки 1073 К, температура входящего этана 923 К). В обоих случаях на входе задавался поток

этана 60 л/ч и лазерное излучение мощностью 20 Вт.

Показано, что в обоих режимах лазерное излучение практически полностью поглощается этиленом к выходу из реактора, что приводит к локальному разогреву газовой смеси до температур выше 1300 К, что превышает температуру стенок (рис. 1). При высоких температурах наблюдается полное превращение этана с преимущественным образованием метана и ацетилена, что соответствует кинетике высокотемпературного пиролиза. В умеренном режиме конверсия этана неполная, а основными продуктами являются этилен (рис. 2) и водород. Полученные пространственные распределения полей температуры, скорости и массовых долей компонентов качественно и количественно согласуются с известными закономерностями процесса.

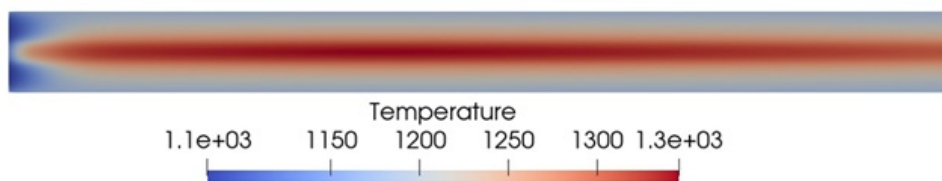


Рис. 1. Распределение температуры

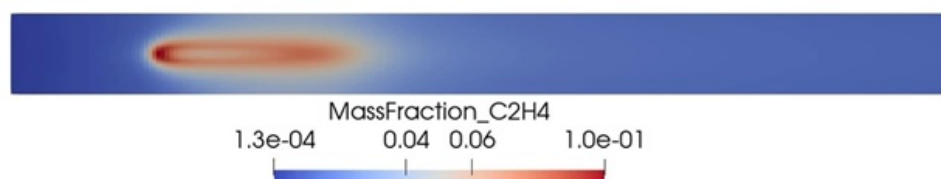


Рис. 2. Распределение этилена

Таким образом, в работе показано, что использование лазерного излучения позволяет эффективно инициировать реакцию при температурах стенок около 1000 К, что ниже традиционно используемых значений, и способствует накоплению целевого продукта – этилена. Результаты работы могут быть полезны при проектировании реакторов лазерной термохимии и выборе оптимальных режимов их эксплуатации.

Литература

1. Мустайкин М.С., Пескова Е.Е. Параллельный алгоритм для численного исследования дозвуковых реагирующих течений в цилиндрической системе координат // Параллельные вычислительные технологии: труды XIX Международной научной конференции. 2025. С. 212-215.
2. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. 2000. Vol. 4, No. 4. P. 535-556.
3. 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. P. 143-154.

MSC 65M08

Numerical study of ethane pyrolysis in a cylindrical reactor under laser radiation

A.V. Panov¹, V.N. Orekhova¹

National Research Mordovia State University

Abstract: The paper presents the results of numerical simulation of the process of ethane pyrolysis in a cylindrical reactor under the influence of laser radiation. The mathematical model is based on the Navier-Stokes system of equations in the approximation of small Mach numbers in a cylindrical coordinate system and is complemented by the kinetic scheme of ethane pyrolysis and the equation of laser radiation transfer taking into account ethylene absorption. A series of computational experiments was carried out at different wall temperatures. It is shown that laser radiation makes it possible to reduce the wall temperature by 100 – 150°C for the pyrolysis of ethane. It was found that at moderate wall temperatures of 1073 K and the presence of laser radiation, the accumulation of ethylene as a target product is achieved.

Keywords: mathematical modeling, ethane pyrolysis, laser radiation.