

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕРСИИ ЭТАН-МЕТАНОВЫХ СМЕСЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРЯМОЙ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ТРУБЕ

@ Е.Е. Пескова, В.Н. Снытников

*e.e.peskova@mail.ru, snyt@catalysis.ru*

УДК 51-73

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2022-09-28.147.

В работе проведено численное моделирование конверсии этан-метановых смесей под воздействием лазерного излучения в осесимметричной трубе. Математическая модель представляет собой систему уравнений Навье-Стокса с учетом химических превращений углеводородов и поглощения лазерного излучения. Получены зависимости выходов продуктов конверсии при различных технологических параметрах.

*Ключевые слова:* уравнения Навье-Стокса, химическая кинетика, лазерное излучение, углеводороды

## **Numerical simulation of the conversion of ethane-methane mixtures under the influence of laser radiation in a straight axisymmetric pipe**

Numerical simulation of the conversion of ethane-methane mixtures under the influence of laser radiation in an axisymmetric tube is carried out. The mathematical model is a system of Navier-Stokes equations taking into account chemical transformations of hydrocarbons and absorption of laser radiation. The dependences of the yields of conversion products for various technological parameters are obtained.

*Keywords:* Navier-Stokes equations, chemical kinetics, laser radiation, hydrocarbons

Создание новых технологий для переработки легких углеводородов в ценные продукты остается актуальной современной задачей, которая решается с привлечением математического моделирования. В настоящей работе представлен алгоритм и результаты численного моделирования

---

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 21-19-00429).

Пескова Елизавета Евгеньевна, к.ф.-м.н., доцент, Национальный исследовательский Мордовский государственный университет (Саранск, Россия), старший научный сотрудник, Институт Катализа СО РАН (Новосибирск, Россия); Elizaveta Peskova (National Research Mordovian State University, Saransk, Russia; Boreskov Institute of Catalysis, Novosibirsk, Russia )

Снытников Валерий Николаевич, к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, Институт Катализа СО РАН (Новосибирск, Россия); Valeriy Snytnikov (Boreskov Institute of Catalysis, Novosibirsk, Russia)

лазерной конверсии этан-метановых смесей. Алгоритм реализован в осесимметричной постановке для дозвуковых течений многокомпонентной химически реагирующей газовой смеси при поглощении лазерного излучения в реакционном объеме. Проведены расчеты при различных технологических условиях для определения влияния лазерного излучения на конверсию углеводородов.

Газодинамические характеристики течения и концентрации компонент смеси рассчитаны на основе уравнений Навье-Стокса с учетом радикальных химических реакций. Разномасштабные физико-химические процессы в объеме требуют соответствующих шагов интегрирования по времени используемой системы уравнений. Для снижения вычислительной сложности алгоритма проведено расщепление по физическим процессам [1]. В программный код включен пакет RADAU5 для решения задач химии с большими системами ОДУ [2].

Основным результатом работы являются полученные распределения газодинамических параметров и концентраций продуктов в прямой осесимметричной трубе. Проведенный анализ результатов численного моделирования выявил диапазон параметров, в котором воздействие лазерного излучения на реакционную смесь проявляет свою высокую эффективность. В частности, большую практическую значимость имеет вывод о возможности снижения в разы массогабаритных характеристик химического реактора за счет уменьшения длины трубы пиролиза при использовании лазерного излучения.

### Литература

1. *Peskova E.E.* Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows // *Journal of Physics: Conference Series*, **2057**:012071 (2021).
2. *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. — Springer-Verlag, 1996.