

ТЕРМОКИНЕТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ И ГОРЕНИИ МЕТАНА*

А. А. Беляев¹, А. В. Арутюнов², В. С. Арутюнов³, Б. В. Лидский⁴, А. В. Никитин⁵,
В. С. Посвянский⁶

Аннотация: С помощью компьютерного моделирования кинетики окисления метана в реакторе идеального смешения показана возможность осциллирующих режимов процесса. Колебательный характер процесса связан как с его кинетикой, так и с процессами выделения и отвода тепла и реагирующих веществ. При этом колебания возникают лишь в сравнительно небольшом диапазоне параметров, характеризующих свойства системы, но могут сопровождаться существенным изменением выхода продуктов.

Ключевые слова: термокинетические колебания; окисление и горение метана; компьютерное моделирование

Литература

1. Арутюнов В. С. Окислительная конверсия природного газа. — М.: КРАСАНД, 2011. 640 с.
2. Arutyunov V. Direct methane to methanol: Foundations and prospects of the process. — Amsterdam, The Netherlands: Elsevier B.V., 2014. 309 p.
3. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. 502 с.
4. Gray B. F., Griffiths J. F., Foulds G. A., Charlton B. G., Walker G. S. The relevance of thermokinetic interactions and numerical modeling to the homogeneous partial oxidation of methane // *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1994. Vol. 33. P. 1126–1135.
5. De Joannon M., Sabia P., Tregrossi A., Cavaliere A. Dynamic behavior of methane oxidation in premixed flow reactor // *Combust. Sci. Technol.*, 2004. Vol. 176. P. 769–783.
6. Chemkin Software RD01400-C01-004-001A. Theory manual. June 2004. https://ay14-15.moodle.wisc.edu/prod/pluginfile.php/119333/mod_resource/content/1/CHEMKIN_Theory.pdf.
7. Вильямс Ф. А. Теория горения / Пер. с англ. — М.: Наука, 1971. 615 с. (*Williams F. A. Combustion theory.* — Addison-Wesley Publishing Co., 1965. 447 p.)
8. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Пер. с англ. — М.: Физматлит, 2006. 352 с. (*Warnatz J., Maas U., Dibble R. W. Combustion. Physical and chemical fundamentals, modeling and simulations, experiments, pollutant formation.* — Springer, 2001. 352 p.)

Поступила в редакцию 29.12.16

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Государственного контракта № 14.607.21.0131. Уникальный идентификатор ПНИЭР RFMEF160715X0131.

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

²Факультет вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, aarutyunow@gmail.com

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, arutyunov@chph.ras.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, fishgoit@mail.ru

⁵Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, ni_kit_in@rambler.ru

⁶Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vsposv@chph.ras.ru