

УДК 661.961.61:547.211

## Численное исследование процесса плазмохимического пиролиза метана\*

К.В. Тюльков<sup>1</sup>, И.Н. Боровик<sup>1</sup>, А.П. Биндиман<sup>1</sup>, Р.Я. Мукамбетов<sup>1</sup>,  
С.Г. Ребров<sup>2</sup>, Л.С. Яновский<sup>3,4</sup>, В.М. Ежов<sup>3</sup>, М.А. Ильина<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет)

<sup>2</sup> АО ГНЦ «Центр Келдыша»

<sup>3</sup> Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН

<sup>4</sup> Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН

## Numerical investigation of the plasma chemical pyrolysis of methane

K.V. Tyulkov<sup>1</sup>, I.N. Borovik<sup>1</sup>, A.P. Bindiman<sup>1</sup>, R.Ya. Mukambetov<sup>1</sup>,  
S.G. Rebrov<sup>2</sup>, L.S. Yanovskiy<sup>3,4</sup>, V.M. Ezhov<sup>3</sup>, M.A. Ilina<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Moscow Aviation Institute (National Research University)

<sup>2</sup> Keldysh Research Center

<sup>3</sup> Federal Research Center of Problem Chemical Physics and Medicine Chemistry Russia Academy of Science

<sup>4</sup> Institute of Thermophysics Russian Academy of Science

Задача получения дешевого водородного топлива для энергетических установок из различного сырья привлекает внимание исследователей всего мира. Наиболее дешевым способом получения водорода из углеводородного сырья является плазмохимический пиролиз. Рассмотрены вопросы моделирования рабочего процесса в установке получения водорода из метана путем его конверсии при плазмохимическом пиролизе. Предложена математическая модель для описания процесса пиролиза метана, разработанная с учетом сажеобразования. Проведено моделирование процесса пиролиза и течения продуктов пиролиза в реакторе. Выполнено сравнение расчетных и экспериментальных данных по химическому составу продуктов пиролиза. Определены факторы, влияющие на повышение выхода полезных продуктов. С помощью моделирования установлена приведенная мощность, равная 7,8 кВт·ч/кг, обеспечивающая максимальный выход ацетилена в продуктах пиролиза и близкий к максимальному выход водорода. Получение максимально возможного выхода водорода на моделируемой установке потребует повышения приведенной мощности в 3 раза (21,8 кВт·ч/кг), что является экономически нецелесообразным.

EDN: ADZWNG, <https://elibrary/adzwng>

**Ключевые слова:** электродуговой плазмотрон, пиролиз метана, скорость химической реакции

Currently, a lot of attention from researchers around the world is being paid to the problem of obtaining cheap hydrogen fuel for power plants from various raw materials. The cheapest way to produce hydrogen from hydrocarbon raw materials is plasma chemical pyrolysis. The article is devoted to the problem of modeling the workflow in a plant for producing hydrogen from methane by its conversion during plasmochimical pyrolysis. The proposed

\* Исследования проведены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, Соглашение от 24.04.2024 № 075-15-2024-543.

mathematical model for describing the process of methane pyrolysis has been developed taking into account soot formation. The pyrolysis process and the flow of pyrolysis products in the reactor are modeled. The calculation results are compared with the experimental data obtained on the chemical composition of pyrolysis products. The factors influencing the increase in the yield of useful products have been identified. The simulation has established the value of the reduced power equal to 7.8 kWh/kg, which ensures the maximum yield of acetylene in pyrolysis products and close to the maximum yield of hydrogen. Obtaining the maximum possible hydrogen yield in the simulated installation will require a 3-times increase in the reduced power (up to 21.8 kWh/kg), which is economically impractical.

EDN: ADZWNG, <https://elibrary/adzwnng>

**Keywords:** electric arc plasma torch, pyrolysis of methane, rate of chemical reaction

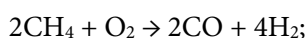
Многие зарубежные и российские исследователи уделяют большое внимание задаче получения водорода и ценных продуктов пиролиза из метана с помощью плазмохимических установок на основе плазмотронов разного типа [1–8]. Это связано с тем, что ценные продукты (ацетилен и сажа), получаемые при пиролизе метана, можно использовать в машиностроении и химической промышленности, а применение водородного топлива в энергетических установках и двигателях позволит снизить поступление углекислого газа в атмосферу, что уменьшит экологический вред от использования ископаемого топлива.

В работах [9–13], посвященных обзорному исследованию различных методов получения водорода из метана, установлено, что применение плазмохимического метода обеспечивает наименьшие удельные затраты при производстве водорода.

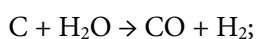
Следует отметить важность эффективного и простого метода получения еще одного промышленного газа при плазмохимическом методе — ацетилена, необходимого для сварки, резки, термообработки металлов, а также для синтеза органических соединений. В работах [1, 3] показано, что при плазменном пиролизе метана можно энергетически эффективно получать ацетилен. Сажа также является ценным продуктом пиролиза метана, применяемым при производстве резины, красок и углеродных материалов.

Существуют различные методы получения водорода. В промышленных масштабах водород получают следующими методами [14]:

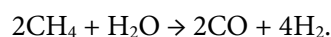
- неполным сжиганием и каталитическим окислением углеводородов



- газификацией угля

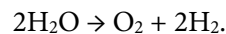


- паровой конверсией углеводородов



Эти методы можно отнести к так называемым грязным методам получения водорода. Появление в продуктах оксида углерода наносит вред экологии. В качестве промежуточного продукта образуется  $\text{CO}_2$ , который необходимо утилизировать для сохранения концепции с использованием водорода и его смесей — уменьшения выделения парниковых газов и борьбы с изменением климата.

Самым экологичным является метод получения водорода путем электролиза воды:



Этот метод не требует сложных технологий и прост в использовании, однако он наиболее энергозатратный.

Пиролиз метана позволяет получить водород, совмещая простоту химических методов и чистоту методов на основе электролиза:



Основные способы для пиролиза метана — электрокрекинг [15, 16] и пиролиз в струе [17]. При электрокрекинге газ проходит через дуговой канал плазмотрона, основные плазмохимические процессы происходят в области электрической дуги и зонах ее шунтирования.

При пиролизе в плазменной струе (рис. 1) задействован плазменный реактор, состоящий из плазмотрона, камеры смешения, реакционной зоны и закалочного устройства. Реакции осуществляются в струе плазмы, служащей высокотемпературным теплоносителем. Эффективность взаимодействия во многом зависит от организации смешения и теплообмена реагентов с потоком плазмы. Горячий газ из плазмотрона попадает в реактор, где происходит процесс пиролиза при смешении

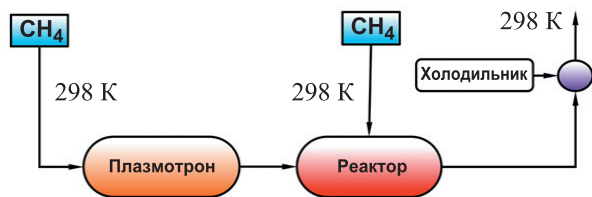


Рис. 1. Схема получения продуктов пиролиза в плазмотроне

плазмы и холодного газа, подаваемого в реактор. В зависимости от режимов работы установки продукты реакции, их массовая доля и температура могут иметь разные значения.

Следует отметить, что в зависимости от режимов работы плазмотрона, характеризующих расход, скорость подачи газов и температуру дуги, происходит перераспределение массового баланса продуктов пиролиза с уменьшением количества водорода и увеличением доли ацетилена [18].

Цель работы — численное исследование влияния подведенной энергии и массового расхода метана через плазмотрон и реактор на эффективность плазмохимического пиролиза с учетом сажеобразования.

Для верификации полученных результатов использованы данные экспериментального исследования на установке АО ГНЦ «Центр Келдыша» (рис. 2), позволяющей путем варьирования режимов работы плазмотрона постоянного тока с электрической мощностью  $N_{эл} = 35 \dots 55$  кВт и реактора моделировать влияние основных факторов на процесс пиролиза метана и выход основных продуктов.

**Математическая модель рабочего процесса в установке плазменного пиролиза.** Моделирование течения и тепломассообмена в плазмотроне и реакторе выполнено в программном комплексе Ansys Fluent [19] путем решения трехмерных уравнений Навье — Стокса с применением модели турбулентности SST, модели химических превращений EDC и модели сажеобразования Теснера — Снегиревой.

**Моделирование химических превращений.** Исследование физико-химических процессов, происходящих в газовой смеси метана и продуктов пиролиза плазмотрона малой мощности, выполнено численными методами вычислительной гидрогазодинамики многокомпонентной смеси с химическими реакциями. Для описания химических реакций распада углеводородов в плазменной дуге использованы подход с их конечными скоростями и редуцированная схема химической кинетики на основе кинетической схемы (механизма) GRI-MECH 3.0 [20]. Эта схема позволяет с достаточно хорошей точностью моделировать химические превращения в камерах сгорания метана и реакторах его крекинга. [7]

В качестве схемы химической кинетики выбран детализированный механизм пиролиза (созданный на основе GRI-MECH 3.0 путем исключения реакций с участием кислорода и азота), 256 реакций и 16 реагирующих компонентов:  $H_2$ ,  $H$ ,  $C$ ,  $CH$ ,  $CH_2$ ,  $CH_2(S)$ ,  $CH_3$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_3$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_5$ ,  $C_2H_6$ ,  $C_3H_7$ ,  $C_3H_8$ .

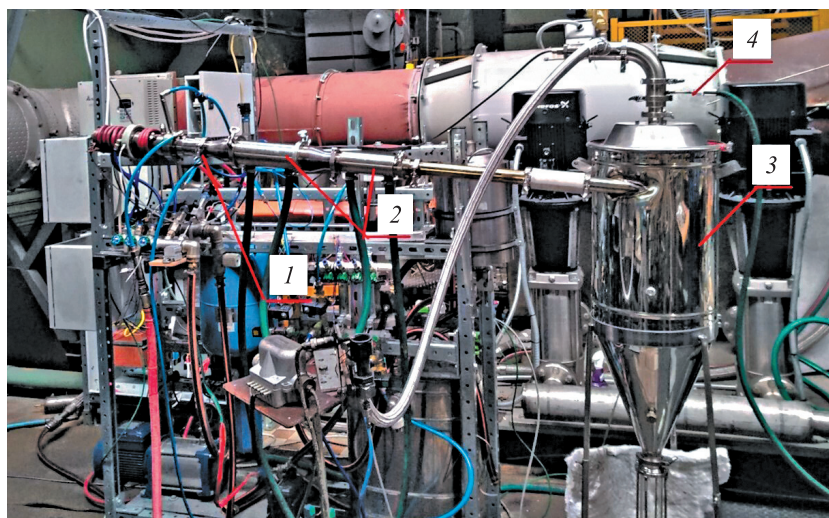


Рис. 2. Схема плазмохимической установки с циклоном: 1 — плазмотрон с реактором; 2 — закалочные устройства; 3 — циклон для сбора сажи; 4 — забор продуктов пиролиза на анализ после циклона

Для описания химического процесса пиролиза метана использована усовершенствованная модель горения Магнуссена — EDC (Eddy Dissipation Concept — концептуальная модель диссипации турбулентного вихря), учитывающая влияние поправки на ускоренное перемешивание турбулентных слоев на характерных микромасштабах, описанных далее.

Модель EDC является расширением модели диссипации вихря (Eddy Dissipation Model — EDM), которая позволяет учитывать взаимное влияние турбулентности на химические реакции, т. е. использовать детальные химические механизмы при моделировании турбулентных течений с химическими реакциями [21, 22].

Реакции объединяются численно с помощью алгоритма ISAT [23], который может ускорить выполнение химических расчетов в 100–1000 раз, обеспечивая существенное сокращение времени.

Уравнение сохранения для среднего значения массовой доли  $i$ -го компонента представляет собой обобщенное уравнение для скаляра

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla(\rho \mathbf{v} Y_i) = -\nabla J_i + S_i + R_i.$$

Здесь  $t$  — время;  $\rho$  — плотность смеси газов;  $Y_i$  — массовая доля  $i$ -го компонента;  $\mathbf{v}$  — скорость течения;  $J_i$  — диффузионный член, отвечающий за массовую диффузию компонента;  $S_i$  — источниковый член добавления–расхода компонента в фазовых превращениях;  $R_i$  — источниковый член добавления–расхода компонента в химических превращениях при применении модели EDC,

$$R_i = \frac{\rho \xi_*^2}{\tau_* [1 - \xi_*^3]} (Y_i^* - Y_i),$$

где  $\xi_*$  и  $\xi_*^3$  — линейная и объемная доля мелких масштабов тонких турбулентных структур;  $Y_i^*$  — мелкомасштабная массовая доля  $i$ -го компонента после реакции в течение времени  $\tau_*$ .

#### Математическая модель образования сажи.

В качестве модели сажеобразования выбрана двухпараметрическая модель Теснера — Снегиревой, с двумя уравнениями для массовых долей частиц сажи  $Y_s$  и радикалов-зародышей сажи  $X_n$  [24]. Чтобы описать скорость образования частиц сажи, Теснер модифицировал известные зависимости Н.Н. Семенова для цепного разветвленного процесса с квадратичными обрывами [25] следующим образом:

$$\tilde{S}_{nf} = \frac{dC_n}{dt} = n_0 + (f - g)C_n - g_0 C_n C_s, \quad (1)$$

где  $C_n$  — нормализованная штучная концентрация радикалов-зародышей;  $n_0$  — скорость их самопроизвольного зарождения;  $f$  и  $g$  — коэффициенты линейного разветвления и обрыва;  $g_0$  — коэффициент захвата радикалов-зародышей частицами сажи;  $C_s$  — концентрация частиц сажи.

В уравнении (1) вместо квадрата концентрации частиц  $C_n^2$ , использованного в зависимости Н.Н. Семенова, введено произведение концентраций частиц сажи и ее радикалов-зародышей  $C_n C_s$ , которое отражает гибель частиц сажи на ее поверхности.

Уравнение (1), описывающее изменение концентрации радикалов-зародышей во времени, не позволяет связать процесс с результатами эксперимента, записанного в виде зависимости концентрации частиц сажи от времени [26]. Здесь необходимы дополнительные предположения, дающие возможность составить аналогичное уравнение для роста количества частиц сажи  $dC_s/dt = \tilde{S}_{sf}$ . Они сводятся к следующему: скорость образования частиц сажи определяется как процессом взаимодействия радикалов-зародышей с исходными молекулами углеводорода, так и процессом их захвата частицами сажи, который тормозит образование новых частиц.

Тогда скорость образования частиц сажи можно представить как

$$\tilde{S}_{sf} = m_p (a - b C_s) C_n, \quad (2)$$

где  $m_p$  — масса средней частицы;  $a$  и  $b$  — коэффициенты;  $b C_s$  — величина, характеризующая захват радикалов-зародышей поверхностью частиц сажи.

Используя функциональные зависимости (1) и (2), получаем зависимость  $\tilde{S}_{sf} = f(t)$ . Так как у этой зависимости есть максимум, взаимосвязь  $a$  и  $b$  можно выразить с помощью формулы  $a = b C_{s \max}$ , где  $C_{s \max}$  — максимальная концентрация частиц сажи. Тогда величина  $1/a$  будет характеризовать период индукции сажеобразования.

Масса средней частицы определяется выражением

$$m_p = \rho_s \pi d^3 / 6,$$

где  $\rho_s$  — плотность сажи;  $d$  — диаметр частицы сажи.

Диаметр частицы можно выбрать, исходя из данных по микроструктуре сажи, и с помощью изображения электронного микроскопа измерить диаметры исходных частиц «шариков» (которые видны на микрофотографии), из которых состоит нарост сажи.

В эксперименте частицу сажи измеряли электронным микроскопом. Размер исходных частиц «шариков» составлял 20... 30 нм. В математической модели диаметр частиц сажи принят равным 25 нм.

Вводя предположение о том, что образование зародышей происходит при пиролизе мономеров углеводородов, запишем уравнение, которое описывает скорость зарождения радикалов-зародышей в экспоненциальном виде, подобно зависимости Аррениуса для скорости химической реакции от температуры  $T$ :

$$n_0 = a_0 C_f e^{-\frac{E}{RT}},$$

где  $a_0$  — предэкспоненциальный множитель, показывающий частоту колебаний атомов в молекуле на один килограмм горючего;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Концентрацию горючего в смеси рассчитываем как

$$C_f = f_c \rho Y_f,$$

где  $f_c$  — углеродный коэффициент (т. е. отношение атомов углерода к атомам всей молекулы углеводорода), для метана  $f_c = 12/16$  (коэффициент  $f_c$  можно не включать в это выражение, а учесть его в предэкспоненциальном множителе);  $Y_f$  — массовая доля горючего.

Нормализованную штучную концентрацию радикалов-зародышей определяем по выражению

$$C_n = \rho N_A X_n, \quad 1/\text{м}^3,$$

а концентрацию частиц сажи

$$C_s = \rho \frac{Y_s}{m_p}, \quad 1/\text{м}^3,$$

где  $N_A$  — число Авогадро.

Чтобы использовать модель сажеобразования Теснера в связанной постановке с многомерными уравнениями гидрогазодинамики и горения, введем два дифференциальных уравнения по двум параметрам уравнения переноса (равновесия в конечных объемах):

- для концентрации радикалов-зародышей

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{X}_n)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{X}_n) = \\ & = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{X}_n}{\partial x_j} \right] + \tilde{S}_{nf} + \tilde{S}_{nc}; \end{aligned}$$

- для концентрации частиц сажи

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_s) = \\ & = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \left( \bar{\mu} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j} \right] + \tilde{S}_{sf} + \tilde{S}_{sc}, \end{aligned}$$

где  $\bar{\rho}$  — плотность смеси газов;  $\tilde{X}_n$  — концентрация частиц,  $\text{кг}^{-1}$ ;  $x_j$  — координата евклидова пространства;  $\tilde{u}_j$  — проекция скорости в трех координатах;  $\bar{\mu}$  — молекулярная вязкость;  $\mu_t$  — турбулентная вязкость;  $\sigma_k$  — турбулентное число Прандтля для сажеобразования;  $\tilde{Y}_s$  — массовая доля сажи;  $\tilde{S}_{nc}$  — скорость исчезновения радикалов-зародышей;  $\tilde{S}_{sc}$  — скорость выгорания частиц сажи.

Правые части этих уравнений содержат нестационарный и конвективный члены, а левые — диффузионный и источниковые. Последние состоят из скоростей образования и исчезновения радикалов-зародышей и скоростей роста и выгорания частиц сажи.

Успешную реализацию модели Теснера для турбулентных течений осуществил Магнуссен [27]. В его модели скорость выгорания частиц сажи выбирается минимальной из двух зависимостей, описывающих скорость турбулентной реакции горения:

$$\tilde{S}_{sc} = \min_p(R_1, R_2); \quad (3)$$

$$R_1 = A \rho Y_s \frac{\varepsilon}{k}; \quad (4)$$

$$R_2 = A \rho \left( \frac{Y_{ox}}{\nu_s} \right) \left( \frac{Y_s \nu_s}{Y_s \nu_s + Y_f \nu_f} \right) \frac{\varepsilon}{k}, \quad (5)$$

где  $A$  — константа;  $\varepsilon$  — скорость диссипации турбулентности;  $k$  — турбулентная кинетическая энергия;  $Y_{ox}$  и  $Y_f$  — массовые доли окислителя и горючего;  $\nu_s$  и  $\nu_f$  — массовые стехиометрические коэффициенты сажи и горючего.

По формуле (3) выбираем минимальную из скоростей выгорания сажи, используя выражения (4) и (5).

Скорость исчезновения радикалов-зародышей

$$\tilde{S}_{nc} = \tilde{S}_{sc} \left( \frac{X_N}{Y_s} \right).$$

Для решения уравнений описанной математической модели выбран решатель разделенного типа (Segregated, также называемый Pressure based), который отдельно решает уравнения компонентов скорости и давления, и метод связи этих компонентов по схеме Couple. Последний работает совместно с методом неполной факторизации дискретной системы линейных уравнений с многосеточным ускорителем (MG или (A)MG — (Algebraic) Multigrid — алгебраический многосеточный) [28, 29]. Для аппроксимации потоковых составляющих использованы метод Рай — Чоу и уравнения второго порядка для всех компонентов (Second order Upwind). Шаг по времени в процессе счета  $\Delta t = 3 \cdot 10^{-4}$  с.

#### Описание методики численного исследования.

Для получения прогнозных значений теплофизических параметров и состава смеси продуктов пиролиза проведено численное исследование на электродуговом плазмотроне с полыми электродами при мощности  $N_{эл} = 35 \dots 55$  кВт.

Экспериментальная установка (рис. 3) содержала цилиндрический участок — плазмотрон, где формировалась электрическая газоразрядная дуга (участок с подачей газа  $G_2$ ), и реактор с участком разбавления рабочего тела (метана)  $G_3$ . Здесь  $G_1$  — расход метана через затыльник (технологический);  $G_2$  — расход метана через тангенциальный вход в завихритель плазмотрона (четыре отверстия диаметром 1 мм);  $G_3$  — расход метана через две форсунки реактора диаметром 1,5 мм. Первичный газ поступал в затыльник и тангенциальные каналы, и на этом участке поддерживалась электрическая

дуга. Дополнительный метан с расходом  $G_3$  подавался в реактор. На выходе из реактора проводился отбор газа для исследования состава смеси продуктов сгорания методом газовой хроматографии.

#### Описание сеточной модели расчетной области и методики расчета.

Расчетная область представляла собой половинную модель проточной части экспериментальной установки. Дискретизация расчетной области проведена конечными элементами с шестью гранями (гексаэдрами). Сходимость по разрешению сетки достигнута при 1 млн элементов. Расчет выполнен в стационарной постановке. Тепловая мощность подавалась как источник энергии через область, выделенную на рис. 3 желтым цветом.

Численно исследованы следующие режимы работы экспериментальной установки: расход газа через реактор  $G_3 = 0,1; 0,6$  и  $1,1$  г/с, расход через плазмотрон  $G_2 = 0,7; 0,9; 1,10$  г/с, мощность  $N_{эл} = 35, 45$  и  $55$  кВт. Число расчетов составило 27. В затыльник газ не подавался.

**Результаты расчетов.** С помощью проведенных расчетов получены интегральные и распределенные теплофизические параметры рабочего процесса, а также распределение массовых долей компонентов смеси в продуктах пиролиза по длине канала.

Распределение полной температуры в плазмотроне при пиролизе метана с мощностью  $N_{эл} = 35$  кВт приведено на рис. 4.

Распределения средней массовой доли водорода, сажи, ацетилена, этилена и метана по длине канала показаны на рис. 5, а-д.

Значения массовой доли основных компонентов смеси в продуктах пиролиза и температуры на выходе из реактора при мощности  $N_{эл} = 35$  кВт, полученные путем расчета и экс-

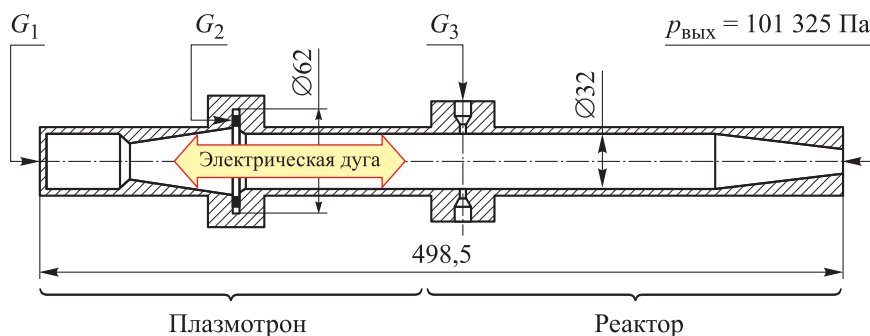


Рис. 3. Схема расчета процессов в экспериментальной установке

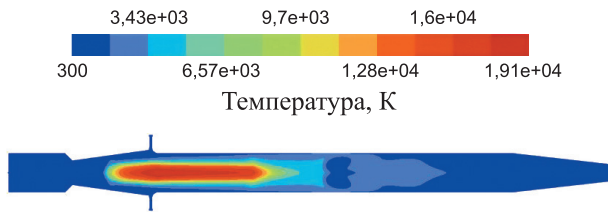


Рис. 4. Распределение полной температуры, К, в плазматроне при пиролизе метана с мощностью  $N_{эл} = 35$  кВт

перимента при одинаковых граничных условиях, приведены в таблице.

Зависимости массовой доли компонентов смеси в продуктах пиролиза в проточной части экспериментальной установки от температуры в выходном сечении, полученные путем расчета и эксперимента, приведены на рис. 6. Там же показана зависимость приведенной мощности

(мощности на единицу расхода метана), потребляемой установкой плазменного пиролиза, от температуры в выходном сечении.

**Обсуждение результатов моделирования.** Анализ результатов моделирования показал, что после достижения определенной температуры химические процессы существенно замедляются, и состав смеси становится почти неизменным. Это свидетельствует о том, что при таком режиме работы установки половина длины реактора является излишней и ее можно уменьшить. Сравнение расчетных и экспериментальных данных (рис. 6) выявило хорошую сходимость, что позволяет использовать расчетные данные для прогнозирования результатов пиролиза при различных условиях работы.

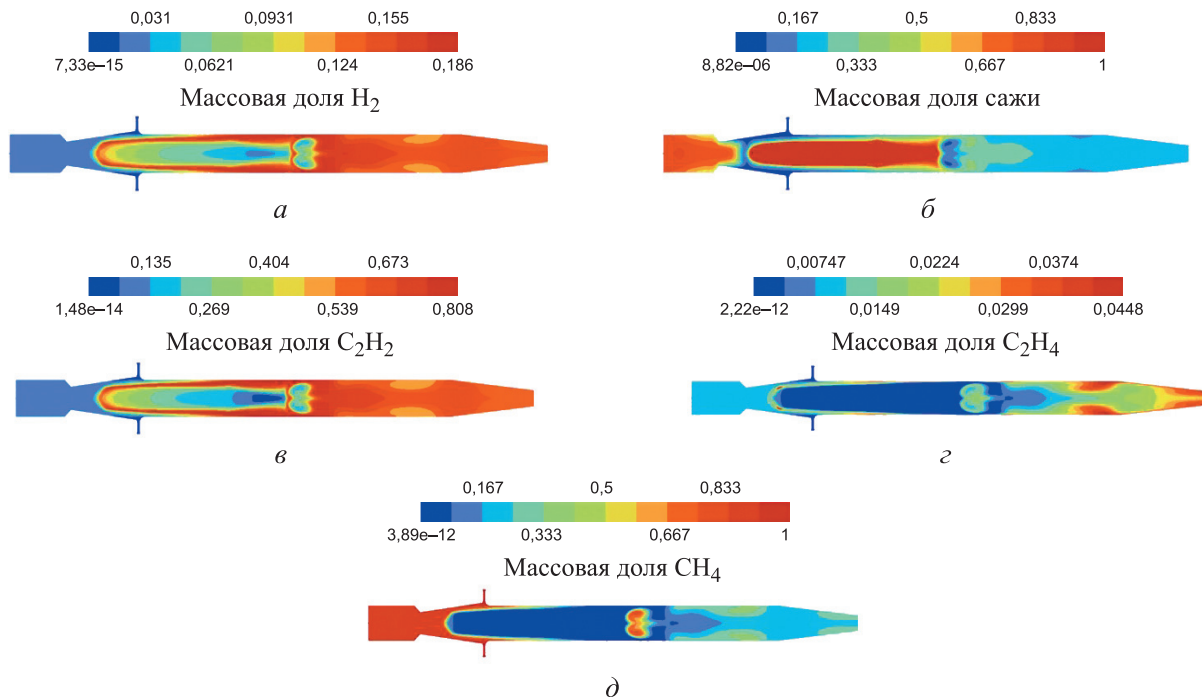


Рис. 5. Распределения средней массовой доли водорода (а), сажи (б), ацетилена (в), этилена (г) и метана (д) по длине канала

**Значения массовой доли основных компонентов смеси в продуктах пиролиза и температуры на выходе из реактора при мощности  $N_{эл} = 35$  кВт**

Компонент	Массовая доля кг/кг	Температура на выходе из реактора, К
$C_2H_2$	0,44/(0,306 ± 0,05)	1467/(1500±100)
$C_2H_4$	0,028/(0,039 ± 0,05)	
$CH_4$	0,236/(0,315 ± 0,05)	
$H_2$	0,137/(0,165 ± 0,05)	
Сажа	0,147/(0,174 ± 0,05)	

Примечание. В числителе дроби указаны расчетные значения, в знаменателе — экспериментальные.

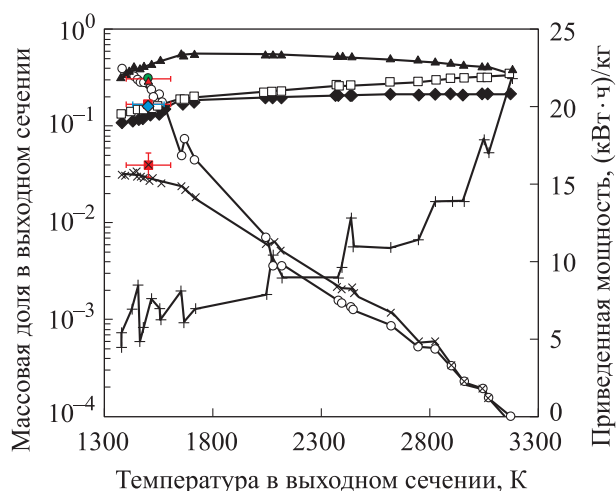


Рис. 6. Зависимости приведенной мощности (—+) и массовой доли компонентов смеси в продуктах пиролиза от температуры в выходном сечении:  
 —▲ и ▲ — C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>; —◆ и ◆ — H<sub>2</sub>; —○ и ● — CH<sub>4</sub>;  
 —□ и ■ — сажа; —× и × — C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>

Установлено, что при приведенной мощности установки более 10 кВт·ч/кг достигается почти полная конверсия метана и максимальная выработка ценных продуктов пиролиза — ацетилена (0,56), сажи (0,22) и водорода (0,20). Этот режим работы установки потребует применения закалки для сохранения высокого значения выхода водорода и ацетилена, так как температура смеси продуктов пиролиза будет достигать температуры ~2100 К.

В то же время установка плазменного пиролиза с приведенной мощностью около 7 кВт·ч/кг будет обеспечивать неполную конверсию метана в ценные продукты пиролиза, но при этом для нее потребуются существенно менее интенсивное охлаждение выходящих газов, так как температура продуктов пиролиза будет равна 1600 К. При последующем увеличении приведенной мощности массовая доля ацетилена падает.

Массовая доля сажи в продуктах пиролиза монотонно растет с повышением приведенной

мощности установки. Это, по-видимому, связано с тем, что при возрастании температуры смеси продуктов пиролиза и метана в реакторе интенсифицируется процесс дегидрогенизации ацетилена (и, соответственно, уменьшается его массовая доля), появления новых зародышей сажи и рост уже образывавшихся частиц сажи.

## Выводы

1. Проведено расчетно-экспериментальное исследование по выявлению факторов, влияющих на состав продуктов пиролиза при различных условиях работы плазмотрона. В ходе решения этой задачи разработана математическая модель рабочего процесса, учитывающая большую часть химических превращений, происходящих в ней, а также динамику образования сажи.

2. Сравнение результатов расчета по разработанной математической модели и данных эксперимента показало хорошую сходимость. Это позволяет заключить, что численное трехмерное моделирование адекватно отражает динамику образования продуктов пиролиза — сажи, водорода и ацетилена при различных режимах работы плазмотрона.

3. Анализ результатов математического моделирования показал, что почти максимальное количество водорода (массовая доля 0,2) можно получить при приведенной мощности 7,8 кВт·ч/кг и температуре на выходе 2040 К. Увеличение приведенной мощности до 21,8 кВт·ч/кг приводит к незначительному повышению выхода водорода и достижению его максимального значения (0,21), когда температура на выходе из реактора равна 3173 К. Максимальный выход ацетилена в продуктах пиролиза соответствует почти такому же уровню приведенной мощности, как и для водорода.

## Литература

- [1] Bilera I.V., Lebedev Yu.A., Titov A.Yu. et al. Modeling of acetylene formation from methane in a plasma jet. *High Energy Chem.*, 2024, vol. 58, no. 3, pp. 332–342, doi: <https://doi.org/10.1134/S0018143924700127>
- [2] Rebrov S.G., Koshlakov V.V., Golikov A.N. et al. Plasma pyrolysis of methane using a DC plasma torch. *Plasma Phys. Rep.*, 2025, vol. 50, no. 12, pp. 1599–1603, doi: <https://doi.org/10.1134/S1063780X24602141>
- [3] Hua F., Cheng Y., Cheng Y. Numerical study of methane to acetylene process in novel thermal plasma array reactor. *Chem. Eng. J. Adv.*, 2022, vol. 11, art. 100309, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.100309>

- [4] Heijkers S., Aghaei M., Bogaerts A. Plasma-based CH<sub>4</sub> conversion into higher hydrocarbons and H<sub>2</sub>: modeling to reveal the reaction mechanisms of different plasma sources. *J. Phys. Chem. C*, 2020, vol. 124, no. 13, pp. 7016–7030, doi: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c00082>
- [5] Fulcheri L., Dames E., Rohani V. Plasma-based conversion of methane into hydrogen and carbon black. *Curr. Opin. Green Sustain Chem.*, 2024, vol. 50, art. 100973, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2024.100973>
- [6] Ali Z., Song H., Trieu Nguyen U.N. et al. Hydrogen and solid carbon production via methane pyrolysis in a rotating gliding arc plasma reactor. *ChemSusChem*, 2025, vol. 18, no. 7, art. e202401602, doi: <https://doi.org/10.1002/cssc.202401602>
- [7] Cheng Y., Li T., Rehmet C. et al. Detailed kinetic modeling of chemical quenching processes of acetylene-rich gas at high temperature. *Chem. Eng. J.*, 2017, vol. 315, pp. 324–334, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.01.040>
- [8] Daghagheleh O., Schenk J., Zarl M.A. et al. Feasibility of a plasma furnace for methane pyrolysis: hydrogen and carbon production. *Energies*, 2024, vol. 17, no. 1, art. 167, doi: <https://doi.org/10.3390/en17010167>
- [9] Bilera I.V., Lebedev Y.A. Plasma-chemical production of acetylene from hydrocarbons: history and current status (a review). *Pet. Chem.*, 2022, vol. 62, no. 4, pp. 329–351, doi: <https://doi.org/10.1134/S0965544122010145>
- [10] Wnukowski M. Methane pyrolysis with the use of plasma: review of plasma reactors and process products. *Energies*, 2023, vol. 16, no. 18, art. 6441, doi: <https://doi.org/10.3390/en16186441>
- [11] Moghaddam A.L., Hejazi S., Fattahi M. et al. Methane pyrolysis for hydrogen production: navigating the path to a net zero future. *Energy Environ. Sci.*, 2025, vol. 18, no. 6, art. 2747, doi: <https://doi.org/10.1039/d4ee06191h>
- [12] Alhamed H., Behar O., Saxena S. et al. From methane to hydrogen: a comprehensive review to assess the efficiency and potential of turquoise hydrogen technologies. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2024, vol. 68, pp. 635–662, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.231>
- [13] Dou P., Qi T., Xu S. et al. Recent advances in the application of plasma technology in hydrogen energy research. *Clean Energy Sci. Technol.*, 2025, vol. 3, no. 2, art. 370, doi: <https://doi.org/10.18686/cest370>
- [14] Кодряну Н.П., Ишмурзин А.А., Дауди Д.И. и др. Теоретическая основа и практический анализ технологий для водородной стратегии Российской Федерации. *Газовая промышленность*, 2022, № 1, с. 56–70.
- [15] Миллер С.А. *Ацетилен, его свойства, получение и применение*. Т. 1. Ленинград, Химия, 1969. 679 с.
- [16] Андреев Д.Н. *Органический синтез в электрических разрядах*. Москва, Ленинград, Изд-во Акад. наук СССР, 1953. 336 с.
- [17] Полак Л.С. *Кинетика и термодинамика химических реакций в низкотемпературной плазме*. Москва, Наука, 1965. 256 с.
- [18] Трошин К.Я. Кинетическое моделирование закалки продуктов сгорания при получении ацетилена. *Химическая физика*, 2019, т. 38, № 8, с. 3–11, doi: <https://doi.org/10.1134/S0207401X19080132>
- [19] ANSYS student free student software. *ansys.com: веб-сайт*. URL: <https://www.ansys.com/academic/free-student-products> (дата обращения: 15.11.2023).
- [20] Frenklach M., Wang H., Goldenberg M. Reduced detailed mechanism for methane combustion. *Energy and Power Engineering*, 2012, vol. 4, no. 1, pp. 28–33, doi: <http://dx.doi.org/10.4236/epe.2012.41004>
- [21] Gran I.R., Magnussen B.F. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 1. Influence of turbulence modeling and boundary conditions. *Combust. Sci. Technol.*, 1996, vol. 119, no. 1-6, pp. 171–190, doi: <https://doi.org/10.1080/00102209608951998>
- [22] Gran. I.R., Magnussen B.F. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2. Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry. *Combust. Sci. Technol.*, 1996, vol. 119, no. 1-6, pp. 191–217, doi: <https://doi.org/10.1080/00102209608951999>
- [23] Pope S.B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1997, vol. 1(1), pp. 41–63, doi: <https://doi.org/10.1080/713665229>

- [24] Tesner P.A., Snegirova T.D., Knorre V.G. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combust. Flame*, 1971, vol. 17, no. 2, pp. 253–260, doi: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(71\)80168-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(71)80168-2)
- [25] Семенов Н.Н. *Ценные реакции*. Москва, Наука, 1986. 535 с.
- [26] Теснер П.А. *Образование углерода из углеводородов газовой фазы*. Москва, Химия, 1972. 136 с.
- [27] Magnussen B.F., Hiertager B.H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 1977, vol. 16, no. 1, pp. 719–729, doi: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(77)80366-4)
- [28] Raw M.J. Robustness of coupled algebraic multigrid for the Navier-Stokes equations. *AIAA 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno. 1996.
- [29] Ильин В.П. Многосеточные методы неполной факторизации в подпространствах Крылова. *Записки научных семинаров ПОМИ*, 2022, т. 514, с. 61–76.

## References

- [1] Bilera I.V., Lebedev Yu.A., Titov A.Yu. et al. Modeling of acetylene formation from methane in a plasma jet. *High Energy Chem.*, 2024, vol. 58, no. 3, pp. 332–342, doi: <https://doi.org/10.1134/S0018143924700127>
- [2] Rebrov S.G., Koshlakov V.V., Golikov A.N. et al. Plasma pyrolysis of methane using a DC plasma torch. *Plasma Phys. Rep.*, 2025, vol. 50, no. 12, pp. 1599–1603, doi: <https://doi.org/10.1134/S1063780X24602141>
- [3] Hua F., Cheng Y., Cheng Y. Numerical study of methane to acetylene process in novel thermal plasma array reactor. *Chem. Eng. J. Adv.*, 2022, vol. 11, art. 100309, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.100309>
- [4] Heijkers S., Aghaei M., Bogaerts A. Plasma-based CH<sub>4</sub> conversion into higher hydrocarbons and H<sub>2</sub>: modeling to reveal the reaction mechanisms of different plasma sources. *J. Phys. Chem. C*, 2020, vol. 124, no. 13, pp. 7016–7030, doi: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c00082>
- [5] Fulcheri L., Dames E., Rohani V. Plasma-based conversion of methane into hydrogen and carbon black. *Curr. Opin. Green Sustain Chem.*, 2024, vol. 50, art. 100973, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2024.100973>
- [6] Ali Z., Song H., Trieu Nguyen U.N. et al. Hydrogen and solid carbon production via methane pyrolysis in a rotating gliding arc plasma reactor. *ChemSusChem*, 2025, vol. 18, no. 7, art. e202401602, doi: <https://doi.org/10.1002/cssc.202401602>
- [7] Cheng Y., Li T., Rehm C. et al. Detailed kinetic modeling of chemical quenching processes of acetylene-rich gas at high temperature. *Chem. Eng. J.*, 2017, vol. 315, pp. 324–334, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.01.040>
- [8] Daghagheleh O., Schenk J., Zarl M.A. et al. Feasibility of a plasma furnace for methane pyrolysis: hydrogen and carbon production. *Energies*, 2024, vol. 17, no. 1, art. 167, doi: <https://doi.org/10.3390/en17010167>
- [9] Bilera I.V., Lebedev Y.A. Plasma-chemical production of acetylene from hydrocarbons: history and current status (a review). *Pet. Chem.*, 2022, vol. 62, no. 4, pp. 329–351, doi: <https://doi.org/10.1134/S0965544122010145>
- [10] Wnukowski M. Methane pyrolysis with the use of plasma: review of plasma reactors and process products. *Energies*, 2023, vol. 16, no. 18, art. 6441, doi: <https://doi.org/10.3390/en16186441>
- [11] Moghaddam A.L., Hejazi S., Fattahi M. et al. Methane pyrolysis for hydrogen production: navigating the path to a net zero future. *Energy Environ. Sci.*, 2025, vol. 18, no. 6, art. 2747, doi: <https://doi.org/10.1039/d4ee06191h>
- [12] Alhamed H., Behar O., Saxena S. et al. From methane to hydrogen: a comprehensive review to assess the efficiency and potential of turquoise hydrogen technologies. *Int. J. Hydrog. Energy*, 2024, vol. 68, pp. 635–662, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.231>
- [13] Dou P., Qi T., Xu S. et al. Recent advances in the application of plasma technology in hydrogen energy research. *Clean Energy Sci. Technol.*, 2025, vol. 3, no. 2, art. 370, doi: <https://doi.org/10.18686/cest370>
- [14] Kodryanu N.P., Ishmurzin A.A., Daudi D.I. et al. Theoretical basis and practical analysis of the technologies for the hydrogen strategy of the Russian Federation. *Gazovaya promyshlennost*, 2022, no. 1, pp. 56–70. (In Russ.).

- [15] Miller S.A. Acetylene. *Its properties, manufacture, and uses*. Vol. 1. Academic Press, 1965. 800 p. (Russ. ed.: *Atsetilen, ego svoystva, poluchenie i primenenie*. Т. 1. Leningrad, Khimiya Publ., 1969. 679 p.)
- [16] Andreev D.N. *Organicheskiy sintez v elektricheskikh razryadakh* [Organic synthesis in electrical discharges]. Moscow, Leningrad, Izd-vo Akad. nauk SSSR Publ., 1953. 336 p. (In Russ.).
- [17] Polak L.S. *Kinetika i termodinamika khimicheskikh reaktsiy v nizkotemperaturnoy plazme* [Kinetics and thermodynamics of chemical reactions in low-temperature plasma]. Moscow, Nauka Publ., 1965. 256 p. (In Russ.).
- [18] Troshin K.Ya. Kinetic modeling of the quenching of combustion products during the synthesis of acetylene. *Khimicheskaya fizika*, 2019, vol. 38, no. 8, pp. 3–11, doi: <https://doi.org/10.1134/S0207401X19080132> (in Russ.). (Eng. version: *Russ. J. Phys. Chem. B*, 2019, vol. 13, no. 4, pp. 577–584, doi: <https://doi.org/10.1134/S1990793119040274>)
- [19] ANSYS student free student software. *ansys.com: website*. URL: <https://www.ansys.com/academic/free-student-products> (accessed: 15.11.2023).
- [20] Frenklach M., Wang H., Goldenberg M. Reduced detailed mechanism for methane combustion. *Energy and Power Engineering*, 2012, vol. 4, no. 1, pp. 28–33, doi: <http://dx.doi.org/10.4236/epe.2012.41004>
- [21] Gran I.R., Magnussen B.F. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 1. Influence of turbulence modeling and boundary conditions. *Combust. Sci. Technol.*, 1996, vol. 119, no. 1–6, pp. 171–190, doi: <https://doi.org/10.1080/00102209608951998>
- [22] Gran. I.R., Magnussen B.F. A numerical study of a bluff-body stabilized diffusion flame. Part 2. Influence of combustion modeling and finite-rate chemistry. *Combust. Sci. Technol.*, 1996, vol. 119, no. 1–6, pp. 191–217, doi: <https://doi.org/10.1080/00102209608951999>
- [23] Pope S.B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1997, vol. 1(1), pp. 41–63, doi: <https://doi.org/10.1080/713665229>
- [24] Tesner P.A., Snegirova T.D., Knorre V.G. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combust. Flame*, 1971, vol. 17, no. 2, pp. 253–260, doi: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(71\)80168-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(71)80168-2)
- [25] Semenov N.N. *Tsepnye reaktsii* [Chain reactions]. Moscow, Nauka Publ., 1986. 535 p. (In Russ.).
- [26] Tesner P.A. *Obrazovanie ugleroda iz uglevodorodov gazovoy fazy* [Formation of carbon from gas-phase hydrocarbons]. Moscow, Khimiya Publ., 1972. 136 p. (In Russ.).
- [27] Magnussen B.F., Hiertager B.H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 1977, vol. 16, no. 1, pp. 719–729, doi: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(77\)80366-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(77)80366-4)
- [28] Raw M.J. Robustness of coupled algebraic multigrid for the Navier-Stokes equations. *AIAA 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, Reno. 1996.
- [29] Ilin V.P. Multigrid methods of incomplete factorization in Krylov subspaces. *Zapiski nauchnykh seminarov POMI*, 2022, vol. 514, pp. 61–76. (In Russ.). (Eng. version: *J. Math. Sci.*, 2023, vol. 272, no. 4, pp. 523–532, doi: <https://doi.org/10.1007/s10958-023-06446-6>)

Статья поступила в редакцию 19.11.2025

## Информация об авторах

**ТЮЛКОВ Кузьма Васильевич** — инженер кафедры «Ракетные двигатели». Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет) (125993, Москва, Волоколамское шоссе д. 4, e-mail: [tyulkovkv@mai.ru](mailto:tyulkovkv@mai.ru)).

**БОРОВИК Игорь Николаевич** — кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры «Ракетные двигатели». Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет) (125993, Москва, Волоколамское шоссе д. 4, e-mail: [borovikin@mai.ru](mailto:borovikin@mai.ru)).

## Information about the authors

**TYULKOV Kuzma Vasilievich** — Engineer, Rocket Engines Department. Moscow Aviation Institute (National Research University) (125993, Moscow, Russian Federation, Volokolamskoye Shosse, Bldg. 4, e-mail: [tyulkovkv@mai.ru](mailto:tyulkovkv@mai.ru)).

**BOROVIK Igor Nikolaevich** — Candidate of Science (Eng.), Rocket Engines Department. Moscow Aviation Institute (National Research University) (125993, Moscow, Russian Federation, Volokolamskoye Shosse, Bldg. 4, e-mail: [borovikin@mai.ru](mailto:borovikin@mai.ru)).

**БИНДИМАН Александр Павлович** — ассистент кафедры «Ракетные двигатели». Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет) (125993, Москва, Волоколамское шоссе д. 4, e-mail: bindimanap@mai.ru).

**МУКАМБЕТОВ Ралиф Ядекарович** — старший преподаватель кафедры «Ракетные двигатели». Московский авиационный институт (Национальный исследовательский университет) (125993, Москва, Волоколамское шоссе д. 4, e-mail: mukambetovry@mai.ru).

**РЕБРОВ Сергей Григорьевич** — доктор технических наук, главный научный сотрудник. АО ГНЦ «Центр Келдыша» (125438, Москва, Российская Федерация, ул. Онежская, д. 8, e-mail: rebrov\_sergey@mail.ru).

**ЯНОВСКИЙ Леонид Самойлович** — доктор технических наук, член-корреспондент РАН, профессор, заведующий отделом горения и взрыва. Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (142432, Черноголовка, Российская Федерация, пр-т академика Семенова, д. 1); главный научный сотрудник научно-исследовательского сектора 7.1. Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН (630090, Новосибирск, Российская Федерация, пр-т академика Лаврентьева, д. 1, e-mail: leonidyanovskiy@yandex.ru).

**ЕЖОВ Василий Михайлович** — кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории горения в высокоскоростных потоках отдела горения и взрыва. Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (142432, Черноголовка, Российская Федерация, пр-т академика Семенова, д. 1, e-mail: anathema40000@gmail.com).

**ИЛЬИНА Марина Анатольевна** — младший научный сотрудник лаборатории горения в высокоскоростных потоках отдела горения и взрыва. Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (142432, Черноголовка, Российская Федерация, пр-т академика Семенова, д. 1, e-mail: mailina2025@yandex.ru).

**Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Тюльков К.В., Боровик И.Н., Биндиман А.П., Мукамбетов Р.Я., Ребров С.Г., Яновский Л.С., Ежов В.М., Ильина М.А. Численное исследование процесса плазмохимического пиролиза метана. *Известия высших учебных заведений. Машиностроение*, 2026, № 3, с. 50–61.

**Please cite this article in English as:**

Tyulkov K.V., Borovik I.N., Bindiman A.P., Mukambetov R.Ya., Rebrov S.G., Yanovskiy L.S., Ezhov V.M., Ilina M.A. Numerical investigation of the plasma chemical pyrolysis of methane. *BMSTU Journal of Mechanical Engineering*, 2026, no. 3, pp. 50–61.

**BINDIMAN Aleksandr Pavlovich** — Assistant. Rocket Engines Department. Moscow Aviation Institute (National Research University) (125993, Moscow, Russian Federation, Volokolamskoye Shosse, Bldg. 4, e-mail: bindimanap@mai.ru).

**MUKAMBETOV Ralif Yadekarovich** — Senior Lecturer. Rocket Engines Department. Moscow Aviation Institute (National Research University) (125993, Moscow, Russian Federation, Volokolamskoye Shosse, Bldg. 4, e-mail: mukambetovry@mai.ru).

**REBROV Sergey Grigorievich** — Doctor of Science (Eng.), Chief Researcher. Keldysh Research Center (125438, Moscow, Russian Federation, Russian Federation, Onezhskaya St., Bldg. 8, e-mail: rebrov\_sergey@mail.ru).

**YANOVSKIY Leonid Samoilovich** — Doctor of Science (Eng.), Corresponding Member of Russian Academy of Sciences, Professor, Head of Department of Combustion and Explosion. Federal Research Center of Problem Chemical Physics and Medicine Chemistry Russia Academy of Science (142432, Moscow region, Chernogolovka, Akademika Semenova Ave., Bldg. 1); Chief Researcher, Research sector 7.1. Institute of Thermophysics Russian Academy of Science (630090, Novosibirsk, Russian Federation, Akademika Lavrentyeva Ave., Bldg. 1, e-mail: leonidyanovskiy@yandex.ru).

**EZHOV Vasily Mikhailovich** — Doctor of Science (Eng.), Senior Researcher, Laboratory of Combustion in high-speed streams at Department of Combustion and Explosion. Federal Research Center of Problem Chemical Physics and Medicine Chemistry Russia Academy of Science (142432, Chernogolovka, Russian Federation, Akademika Semenova Ave., Bldg. 1, e-mail: anathema40000@gmail.com).

**ILINA Marina Anatolyevna** — Junior Research, Laboratory of Combustion in High-speed streams at Department of Combustion and Explosion. Federal Research Center of Problem Chemical Physics and Medicine Chemistry Russia Academy of Science (142432, Chernogolovka, Russian Federation, Akademika Semenova Ave., Bldg. 1, e-mail: mailina2025@yandex.ru).