



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • [Электронная библиотека](#)

[Препринты ИПМ](#) • [Препринт № 66 за 2024 г.](#)



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

Г.Л. Шарипов, К.Ф. Коледина,
[В.О. Подрыга](#), [С.В. Поляков](#),
[Н.И. Тарасов](#)

Моделирование течения
углеводородного флюида в
каталитическом реакторе

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](#)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Моделирование течения углеводородного флюида в каталитическом реакторе / Г.Л. Шарипов [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 66. 16 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-66>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-66>

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

**Г.Л. Шарипов, К.Ф. Коледина, В.О. Подрыга,
С.В. Поляков, Н.И. Тарасов**

**Моделирование течения
углеводородного флюида
в каталитическом реакторе**

Москва — 2024

Шарипов Г.Л., Коледина К.Ф., Подрыга В.О., Поляков С.В., Тарасов Н.И.

Моделирование течения углеводородного флюида в каталитическом реакторе

Рассматривается методика математического моделирования процесса изомеризации углеводородного флюида в каталитическом реакторе, используемого для синтеза органических топлив. Разработана модель расчета параметров течения флюида в смешанной среде «открытое пространство – пористое тело», учитывающая свойства пористого материала и основные химические превращения, характеризующие гидроизомеризацию. Модель включает регуляризованные на основе квазигидродинамического подхода уравнения Навье-Стокса, усредненные по репрезентативному элементарному объему, и систему уравнений конвекции-диффузии для расчета эволюции концентраций сырья и продукта реакции. В пространственно двумерном случае разработан численный алгоритм решения задачи, выполнена его программная реализация. Проведены пробные расчеты модельной задачи, показавшие корректность разработанного численного подхода и работоспособность созданного программного кода.

Ключевые слова: химический реактор, катализ, математическое моделирование, квазигидродинамическая система уравнений, уравнения конвекции-диффузии, пористая среда

Glyus Lyabibovich Sharipov, Kamila Phelicsovna Koledina, Viktoriia Olegovna Podryga, Sergey Vladimirovich Polyakov, Nikita Igorevich Tarasov

Modeling of hydrocarbon fluid flow in a catalytic reactor

The article considers the methodology of mathematical modeling of the process of hydrocarbon fluid isomerization in a catalytic reactor used for the synthesis of organic fuels. A model for calculating the parameters of fluid flow in a mixed medium "open space – porous body" has been developed, taking into account the properties of the porous material and the main chemical transformations characterizing hydroisomerization. The model includes the Navier-Stokes equations regularized on the basis of the quasi-hydrodynamic approach, averaged over a representative elementary volume, and a system of convection-diffusion equations for calculating the evolution of the concentrations of raw materials and the reaction product. In the spatially two-dimensional case, a numerical algorithm for solving the problem has been developed; its software implementation has been performed. Trial calculations of the model problem have been carried out, which have shown the correctness of the developed numerical approach and the operability of the created software code.

Key words: chemical reactor, catalysis, mathematical modeling, quasi-hydrodynamic system of equations, convection-diffusion equations, porous medium

Введение

В последнее время вновь усилился интерес к исследованию сложных нелинейных процессов в химических реакторах. Это связано с разработкой новых и оптимизацией существующих технологий переработки углеводородного сырья и синтеза перспективных продуктов и материалов. Всё возрастающие требования к качеству переработки и свойствам продукции и развитие аппарата математического моделирования, опирающегося на компьютерные и суперкомпьютерные вычисления, ставят перед исследователями задачи совершенствования технологии исследований. Требованием момента является учет в математических моделях множества физико-химических факторов, в том числе многофазности и многокомпонентности протекания многостадийных химических реакций в условиях реальной геометрии химической установки.

Одной из актуальных сегодня задач является моделирование процесса изомеризации углеводородного флюида, стимулируемого его прохождением через слой металлического катализатора. Представленный процесс производят в специальных химических реакторах различной конфигурации и наполнения. Данные устройства позволяют осуществлять синтез продуктов нефтехимии с широкой номенклатурой, в том числе дизельного топлива с заданными параметрами. Технология производства дизельного топлива рассматривается, например, в работах [1–6].

Основной целью данной работы является численный анализ процессов гидроизомеризации гексадекана в присутствии катализатора на основе алюмофосфата. В работе рассматривается упрощенный вариант задачи, связанный с прохождением флюида, содержащего гексадекан и водород, через слоистую пористую среду, включающую гранулы стекла и катализатора. В слое катализатора рассматривается основной механизм гидроизомеризации. При формировании модели течения используются усредненные по репрезентативному элементарному объему регуляризованные уравнения Навье-Стокса и уравнения конвекции-диффузии. Для численного решения используется сеточный метод конечных объемов. На его основе разработана программа, с помощью которой проведены тестовые расчеты.

Процесс гидроизомеризации в химическом реакторе

Рассмотрим лабораторный химический реактор [5], изображенный на рис. 1. Реактор имеет входной и выходной патрубки, расположенные соответственно в левой и правой частях. В центральной области в качестве химически нейтрального уплотнителя для фиксации катализатора используется стеклянная крошка. Представленная лабораторная установка допускает варьирование толщины слоя катализатора. В рамках данной работы рассмотрим

процессы, проходящие при толщине катализатора 0.1 м. В качестве материала катализатора используется алюмофосфат. Для удобства дальнейшего анализа обозначим цифрами 1, 2, 3, 4, 5 соответственно свободную левую зону реактора, зону левого уплотнителя, зону катализатора, зону правого уплотнителя и правую свободную зону.

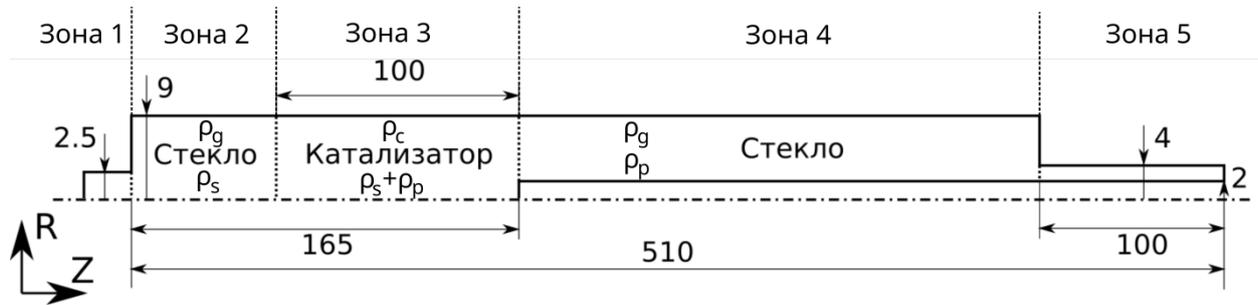
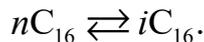


Рис. 1. Расчетная область (единицы измерения - 0.001 м)

В качестве сырья рассмотрим гексадекан, который в присутствии катализатора превращается в целевой продукт (изо-гексадекан) в соответствии со следующей одностадийной химической реакцией [3]:



Здесь nC_{16} – обозначение гексадекана $C_{16}H_{34}$, iC_{16} – обозначение изо-гексадекана $C_{16}H_{34}$. Выбранное упрощение химизма процесса имеет свои преимущества и недостатки. С одной стороны, получается более простая математическая задача, с другой стороны, снижается до определенного уровня точность моделирования.

Многофазность среды в реакторе существенно влияет на динамику химических превращений и итоговый выход целевого продукта реакции. В рассматриваемом нами случае в сырье присутствует молекулярный водород, побочными продуктами реакции являются такие газовые фракции, как метан, этан, пропан и бутан. Таким образом, среда в реакторе является двухфазной (в ней присутствуют жидкость и газ). На предварительном этапе исследования будем считать концентрации молекулярного водорода и побочных продуктов реакции малыми. Поэтому в дальнейшем рассматривается лишь основная реакция изомеризации в слое катализатора, а течение считается однофазным.

Для корректного описания процессов в химическом реакторе необходимо воспроизвести течение сырья и продукта реакции, их распределение и взаимодействие в исследуемом объеме. Для этого требуется сформировать соответствующую модель и разработать методику её численного анализа. В данной работе рассматриваются все аспекты математического и численного моделирования, а также результаты верификации разработанного программного кода.

Математическая модель

Модель течения. Вопрос моделирования течения флюида (жидкости, газа или многофазной многокомпонентной среды) через пористое тело до настоящего времени является нетривиальным. При его разрешении часто используются два следующих подхода. В рамках первого подхода в области свободного течения флюида используется стандартная система уравнений Навье-Стокса, а в пористой зоне – специальные законы движения среды (Дарси, Форхгеймера и др.) [7, 8]. На границах различных зон ставятся необходимые условия сопряжения решений. В рамках второго подхода уравнения Навье-Стокса (или их аналоги) рассматриваются во всей области реактора и усредняются по репрезентативному элементарному объему (REV) на основе законов сохранения массы, импульса и энергии. В результате формулируется общая система уравнений, описывающая течение флюида как в свободной, так и в пористой областях. Эта система уравнений известна в литературе как осредненные по объему уравнения Навье-Стокса (VANS) [9 – 11]. С учетом особенностей процессов в химическом реакторе, включающих переменное значение пористости, наличие областей свободного течения и относительно высокую скорость фильтрации, наиболее подходящим в рассматриваемом нами случае представляется использование VANS-постановки.

В рамках рассматриваемой нами модели не учитывается присутствие в объеме газовой фазы и течение считается однофазным. В общем случае плотность жидкой фазы зависит от ее состава и давления. В принятом приближении мы пренебрегаем зависимостью от давления и считаем суммарную плотность константой, которую составляют в различных подзонах реактора сырье и продукт реакции в разных пропорциях.

В этих предположениях при рассмотрении изотермического процесса система уравнений VANS во всем объеме может быть записана в следующем виде [10]:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla(\rho\mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla\left(\frac{1}{\varepsilon}\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}\right) = -\varepsilon\nabla p + \nabla(\mathbf{\Pi}_{NS}) - G\mathbf{u}, \quad (2)$$

где $\partial\bullet/\partial t$ – частная производная, ∇ – оператор набла, \otimes – внешнее произведение векторов, t – время, $\varepsilon = \varepsilon(x, y, z) = V_f(x, y, z)/V$ – пористость, $V_f(x, y, z)$ – объем жидкой фазы, V – общий объем среды, $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$ – вектор скорости фильтрации, p – давление, $\mathbf{\Pi}_{NS}$ – тензор Навье-Стокса, определяемый выражениями:

$$\mathbf{\Pi}_{NS} = \{\Pi_{\alpha\beta}^{NS}\}, \quad \Pi_{\alpha\beta}^{NS} = \mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial \alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial \beta} \right) - \delta_{\alpha\beta} \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad \alpha, \beta = x, y, z,$$

μ – динамическая вязкость, $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера, x, y, z – пространственные координаты, $G = \frac{\varepsilon\mu}{K} + \frac{\rho F(\varepsilon)}{\sqrt{K}} |\mathbf{u}|$ – коэффициент стока импульса, связанный с движением жидкости через пористую среду, K – проницаемость пористой среды, $F(\varepsilon)$ – эмпирический коэффициент Форхгеймера. Система (1), (2) дополняется необходимыми граничными и начальными условиями.

При модификации модели удобно воспользоваться квазигидродинамическим (КГид) подходом [12 – 14]. В рассматриваемой постановке система (1), (2) будет иметь вид:

$$\nabla(\mathbf{u} - \mathbf{w}) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \left(\frac{1}{\varepsilon} \rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \otimes \mathbf{u} \right) = -\varepsilon \nabla p + \nabla(\mathbf{\Pi}_{NS} + \mathbf{\Pi}_{QGD}) - G\mathbf{u}, \quad (4)$$

где

$$\mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho} \left[\left(\frac{1}{\varepsilon} \rho \mathbf{u}, \nabla \right) \mathbf{u} + \varepsilon \nabla p + G\mathbf{u} \right], \quad \mathbf{\Pi}_{QGD} = \frac{1}{\varepsilon} \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{w},$$

\mathbf{w} – КГид поправка к скорости фильтрации, (\bullet, \bullet) – скалярное произведение, τ – параметр регуляризации КГид подхода, $\mathbf{\Pi}_{QGD}$ – поправка к тензору Навье-Стокса, обеспечивающая совместно с конвективным слагаемым в левой части (4) симметрию тензора диффузии импульса.

В качестве обоснования данного выбора отметим два обстоятельства. Во-первых, КГид уравнения лучше описывают кинетические свойства течения в условиях неравновесной химически реагирующей среды [13]. Во-вторых, численная реализация КГид уравнений имеет дополнительный фактор устойчивости в виде параметра регуляризации.

Система уравнений (3), (4) приводится к безразмерному виду посредством следующих преобразований:

$$x = L_0 \bar{x}, \quad y = L_0 \bar{y}, \quad z = L_0 \bar{z}, \quad \mathbf{u} = u_0 \bar{\mathbf{u}}, \quad t = \frac{u_0}{L_0} \bar{t}, \quad p = \rho_0 u_0^2 \bar{p}.$$

Опуская черту над безразмерными переменными, получаем вместо (3), (4) следующие уравнения:

$$\nabla(\mathbf{u} - \mathbf{w}) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \left[\frac{1}{\text{Re}} (\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T) - \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \mathbf{w} \otimes \mathbf{u}) \right] - \varepsilon \nabla p - G \mathbf{u}, \quad (6)$$

где

$$\mathbf{w} = \tau_0 \left[\frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} + \varepsilon \nabla p + G \mathbf{u} \right],$$

L_0 – характерный линейный размер, u_0 – характерная скорость фильтрации (принимается равной скорости входного потока), ρ_0 – плотность сырья, \mathbf{w} – регуляризирующая поправка к скорости, нормированная на u_0 , $\text{Re} = L_0 u_0 \rho_0 / \mu_0$ – число Рейнольдса, μ_0 – динамическая вязкость сырья, G – коэффициент изменения импульса в пористой среде, нормированный на $\rho_0 u_0 / L_0$, $\tau_0 \sim 1/\text{Re}$ – параметр регуляризации, нормированный на L_0 / u_0 .

Коэффициент изменения импульса в пористой среде G может иметь различный вид [9, 15 – 17], который зависит от многих параметров – скорости течения, вязкости среды и формы пор. Поскольку течение в реакторе характеризуется числами Рейнольдса, существенно большими 10 ($\text{Re} > 10$), воспользуемся нелинейной моделью Форхгеймера, при которой данный коэффициент примет вид [9]

$$G = \frac{\varepsilon}{\text{ReDa}} + \frac{F(\varepsilon)}{\sqrt{\text{Da}}} |\mathbf{u}|, \quad (7)$$

где $\text{Da} = K / L_0^2$ – число Дарси. В данной работе воспользуемся зависимостью $F(\varepsilon) = 0.134 \varepsilon^{-3/2}$, хорошо описывающей силу трения флюида о скелет (наполнитель), образованный сферическими частицами. В областях, не занятых стеклом и катализатором, $G = 0$.

Уравнения (5), (6) с учетом (7) реализуют сквозную модель «свободный поток-фильтрация». Её проблемно-зависимыми параметрами являются числа Рейнольдса (Re) и Дарси (Da), пористость (ε) и величина малого параметра регуляризации (τ_0).

Распределение сырья и продуктов реакции. Модель, описываемая системой (5), (6), позволяет единым образом рассмотреть течение флюида в различных зонах реактора. К ней следует добавить уравнения эволюции концентраций сырья и продукта реакции. Для этого используем уравнения конвекции-диффузии с учетом пористости [18], которые записываются в безразмерном виде следующим образом:

$$\frac{\partial(\varepsilon C_i)}{\partial t} = \nabla[\varepsilon D_i \nabla C_i] - \nabla(\mathbf{u} C_i) \mp \varepsilon \beta C_s, \quad i = s, p. \quad (8)$$

Здесь помимо нормированных на характерное значение C_0 концентраций сырья C_s и продукта реакции C_p введена величина $\beta = \frac{C_c}{C_c^*}$ – константа скорости реакции, C_c и C_c^* – текущая и эффективная концентрации катализатора, D_s и D_p – коэффициенты диффузии сырья и продукта реакции, нормированные на величину $u_0 L_0$. Процесс образования продукта реакции моделируется слагаемым "+ $\varepsilon \beta C_s$ ", а убывания сырья – слагаемым "- $\varepsilon \beta C_s$ ".

Концентрация катализатора в конкретном расчете считается постоянной ввиду малого его расхода в единицу времени. Проблемно-зависимыми параметрами в (8) являются скорость фильтрации \mathbf{u} , коэффициенты диффузии сырья (D_s) и продукта (D_p) химической реакции, пористость (ε).

Таким образом, итоговая математическая модель процесса включает в себя уравнения (5), (6), (8) и дополняется уравнениями связи и необходимыми начальными и граничными условиями. Ввиду применения сквозной схемы моделирования будем считать, что в каждый момент времени сырье и продукт реакции присутствуют во всем объеме, но их концентрации существенно изменяются только в слое катализатора. На левой границе реактора в объем поступает флюид, состоящий из сырья, на правой границе реализуется свободный вынос флюида с преимущественным содержанием продукта реакции. На внешних стенках реактора задаются условия непротекания для концентраций сырья и продукта реакции и условия прилипания для скорости.

Вычислительный алгоритм. Численная схема на декартовой сетке в пространственно двумерном варианте модели была построена с помощью метода конечных объемов [19]. При расчете давления и концентраций в качестве конечного объема использовались ячейки расчетной сетки. Компоненты вектора скорости рассчитывались по узловым конечным объемам. Дискретизация производных по времени построена на основе явной схемы.

Общий алгоритм состоит в интегрировании на каждом шаге по времени уравнений (5), (6) и (8). Вследствие независимости уравнений (5), (6) от концентрации стало возможным разделить общий алгоритм на две стадии. На первой стадии рассчитывается квазистационарное течение флюида через установку. На второй стадии интегрируются уравнения (8).

Результаты моделирования

Тестовый расчет. Для верификации модели, вычислительного алгоритма и его программной реализации рассмотрим течение жидкости в прямоугольном канале с пористой вставкой [8, 10]. Геометрия расчетной области приведена на рис. 2.



Рис. 2. Расчетная область тестовой задачи (единицы измерения – 1 м)

Расчет производился от начальных условий покоящейся среды. На входе задавалось течение Пуазейля, на верхней и нижней границах – условия прилипания, на выходе – постоянное давление. В качестве параметров течения и пористой области были приняты следующие значения: $Re = 100, 500, 1000$, $Da = 0.01$, $\varepsilon = 0.1$. Полученные квазистационарные распределения модуля скорости и давления приведены на рис. 3 и 4. Расчетная сетка состояла из 40 501 узлов и 40 000 четырехугольников, характерный линейный размер элементов составил 0.02. Аналогичный расчет был проведен с помощью программного пакета Ansys Fluent. Полученные распределения вдоль центрального сечения представлены на рис. 5.

Результаты, полученные по обеим методикам, хорошо согласуются между собой, что подтверждает состоятельность построенного нами вычислительного алгоритма и его программной реализации.

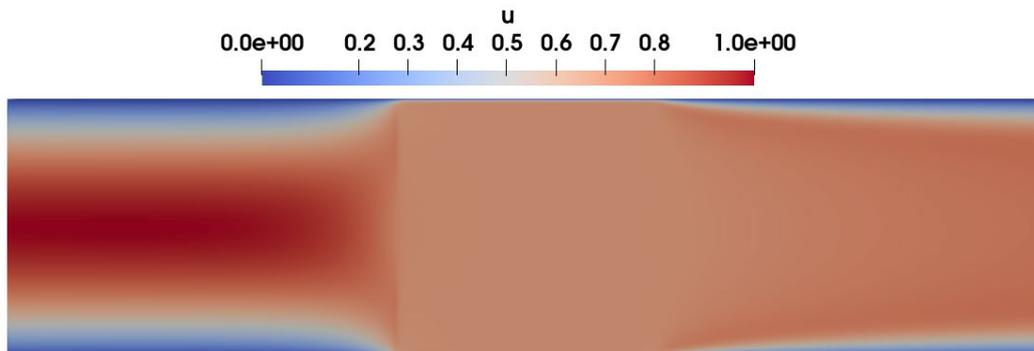


Рис. 3. Распределение модуля скорости при $Re=500$

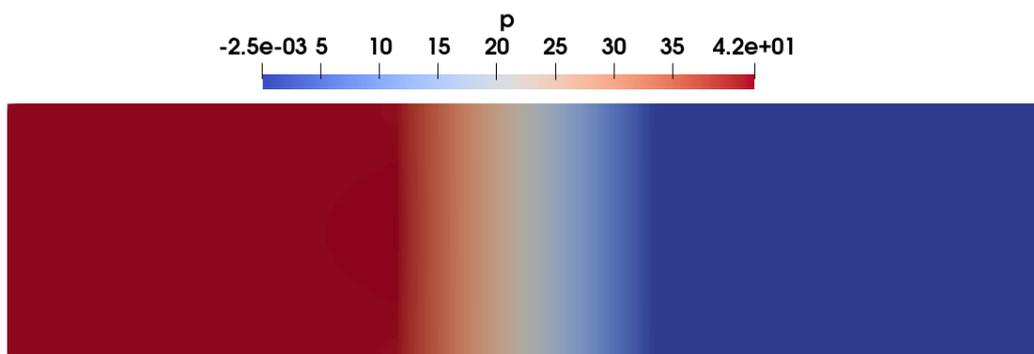


Рис. 4. Распределение давления при $Re=500$

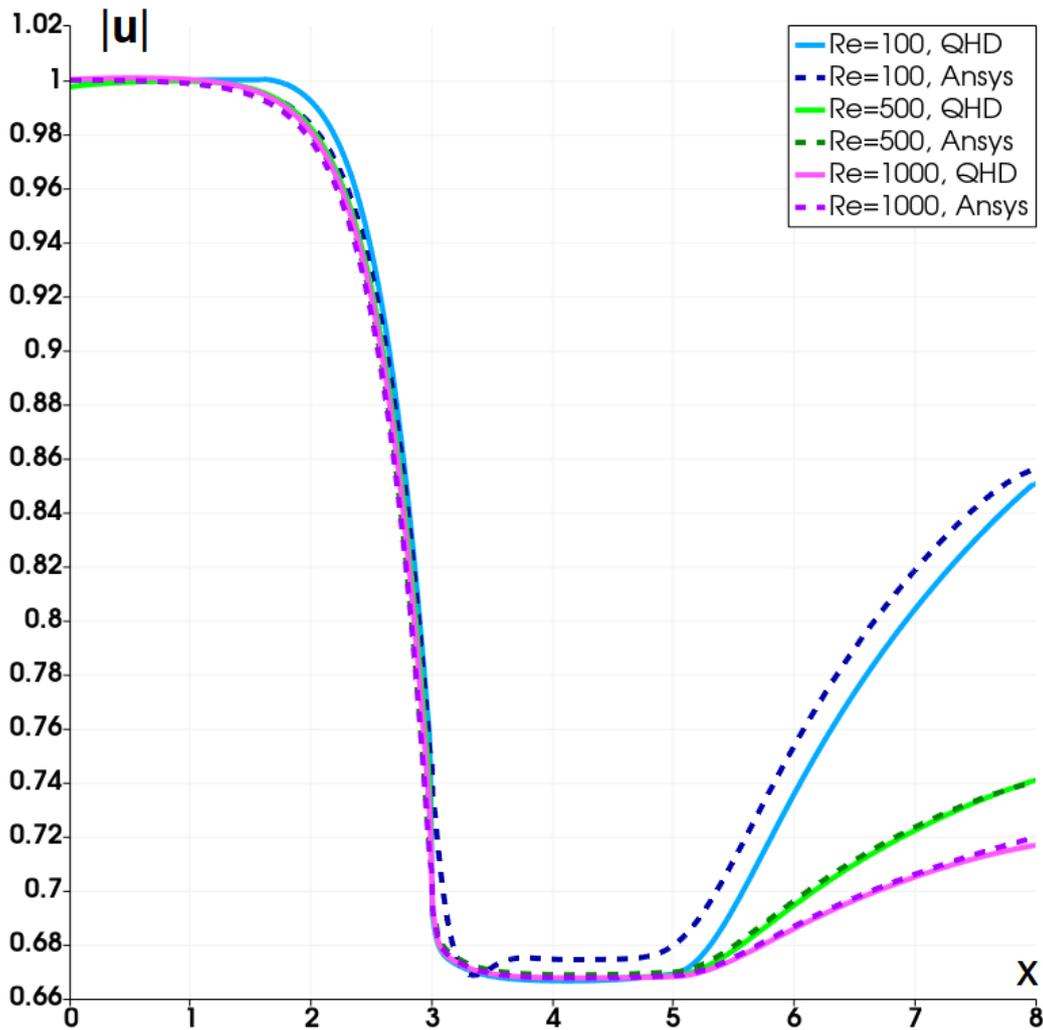


Рис. 5. Распределения модуля скорости вдоль центральной линии (штриховые линии – расчеты в Ansys Fluent, сплошные – оригинальная КГид модель, синий – $Re = 100$, зеленый – $Re = 500$, пурпурный – $Re = 1000$).

Расчет процессов в химическом реакторе. Расчеты проводились в двумерной постановке в случае плоской геометрии на сетке, состоящей из 110 400 четырехугольников и 113 973 узлов при характерном линейном размере элемента 0.25. В качестве начальных условий использовались условия покоя среды. На входе задавалось течение Пуазейля, на стенках – условия прилипания, на выходе – мягкие граничные условия. При параметрах нормировки $L_0 = 10^{-3} \text{ м}$, $\rho_0 = 770 \text{ кг/м}^3$, $\mu_0 = 3.3 \cdot 10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $u_0 = 0.43 \text{ м/с}$ использованы следующие модельные коэффициенты: $Re = 100$, $Da_g = 0.1$, $Da_c = 0.2$, $\varepsilon_g = 0.28$, $\varepsilon_c = 0.6$, индексы g и c соответствуют стеклянной крошке и катализатору, $\tau_0 = 0.005$.

Стационарное течение, параметры которого представлены на рис. 6–8, было достигнуто при 50 безразмерных временных единицах. Шаг по времени

определен из условий устойчивости вычислительного алгоритма КГ и Д системы и составил ~ 0.0055 .

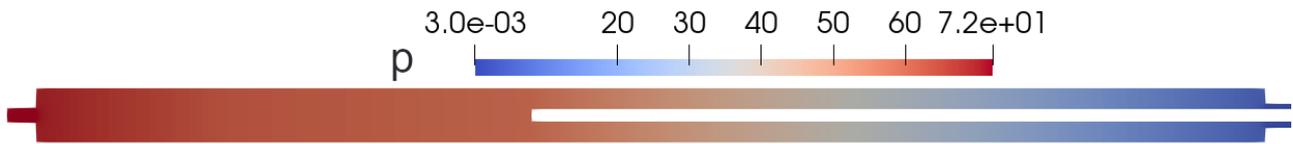


Рис. 6. Распределение давления

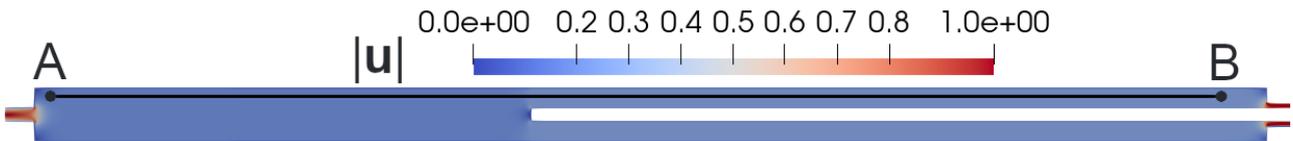


Рис. 7. Распределение модуля скорости

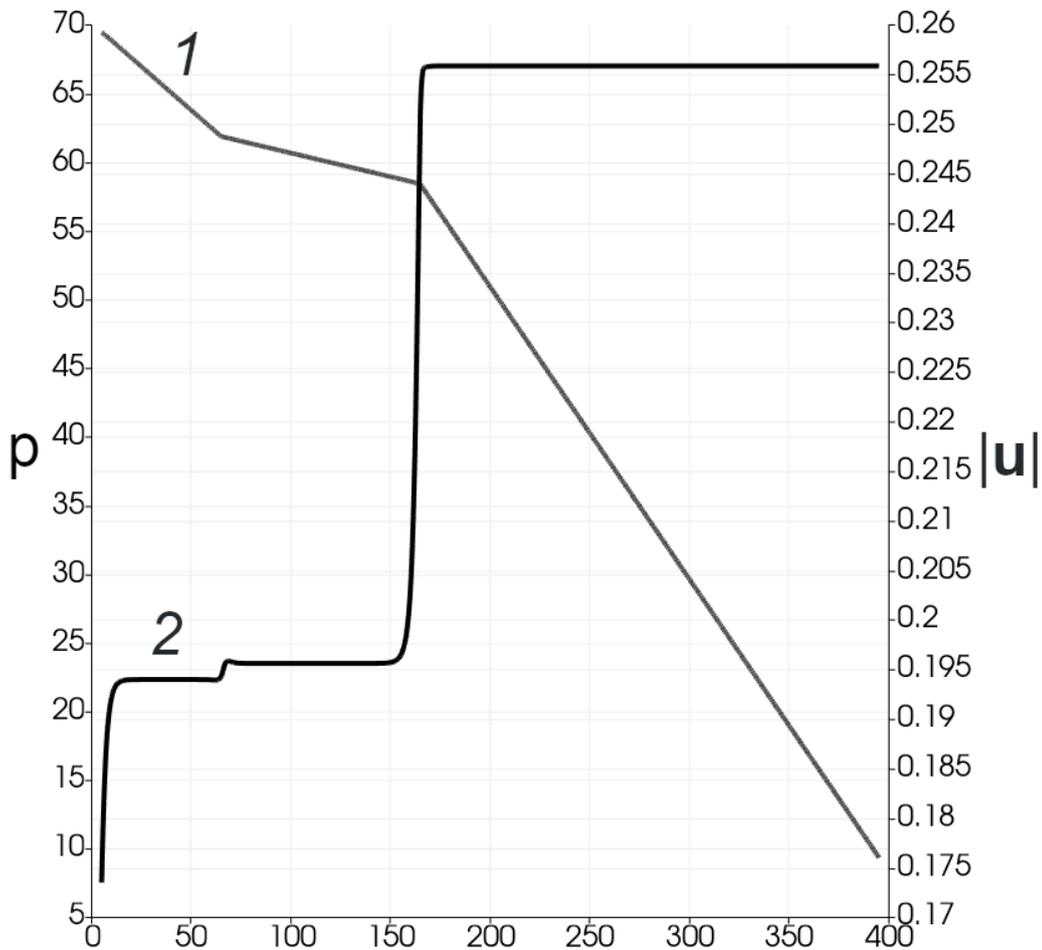


Рис. 8. Распределения давления (1) и модуля скорости (2) вдоль линии АВ рис. 5

Посредством полученного распределения скорости был проведен расчет эволюции концентраций веществ. Начальные распределения сырья и продукта

реакции во всей области расчета принимались равными значениям 0.0. На левой границе безразмерная концентрации сырья задавалась значением 1. Модельные коэффициенты диффузии задавались равными $D_s = D_p = 0.1$.

Приведем описание результатов расчетов. При малых значениях величины β (порядка 0.001 и менее) изменение концентрации сырья C_s во всем объеме реактора со временем увеличивается до значения, близкого к 1. Концентрация $C_p \approx 0$. При больших значениях β (например, для значения 1) в зоне катализатора происходит превращение сырья в продукт реакции, и величина C_s существенно уменьшается в зонах 3-5. В этих зонах появляются отличные от нуля значения величины C_p . С учетом запаздывания во времени и диффузионных процессов в пористой среде во всем объеме реализуются неоднородные распределения $C_s(x, y, t)$, $C_p(x, y, t)$. Пример процесса установления представлен на рис. 9 и 10. На первом этапе, до достижения сырьем катализатора, в зонах 1 и 2 происходит накопление C_s (см. рис. 9), а $C_p \approx 0$ во всей расчетной области. В момент достижения сырьем зоны 3 начинает формироваться продукт реакции (рис. 10). Вследствие высокой скорости реакции, принятой в рамках расчета, большая часть C_s преобразуется в C_p уже на начальном участке катализатора.

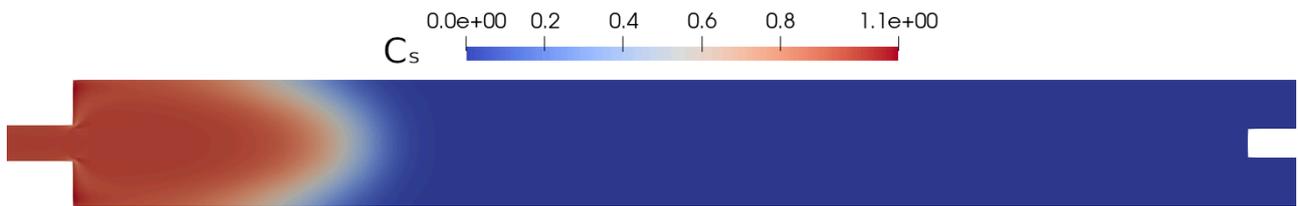


Рис. 9. Распределение концентрации сырья на момент времени 80. Фрагмент реактора

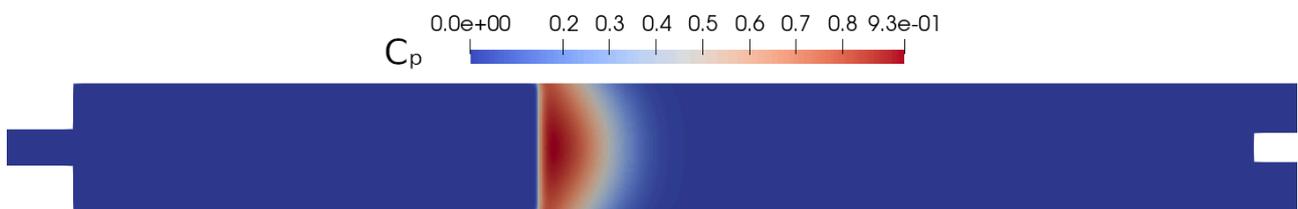


Рис. 10. Распределение концентрации продукта на момент времени 150. Фрагмент реактора

В стационаре в левой свободной зоне реактора и левом уплотнителе $C_s(x, y) = 1$, за исключением небольших застойных областей у стенок реактора, а $C_p(x, y) = 0$. В оставшихся зонах реактора сформируются распределения, существенно зависящие от скорости реакции. При $\beta = 1$ стационарные

распределения концентрации сырья и продуктов реакции в зонах 1-3 на момент времени 1000 приведены на рис. 11, 12. В последующих зонах (4 и 5) $C_s(x, y) \approx 0$, $C_p(x, y) \approx 1$.

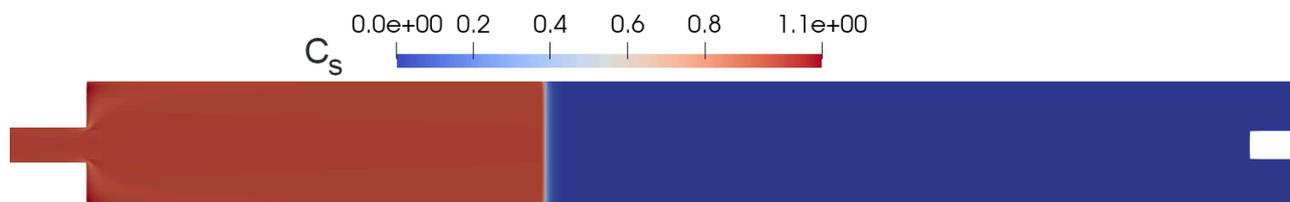


Рис. 11. Распределение концентрации сырья на момент времени 1000. Фрагмент реактора

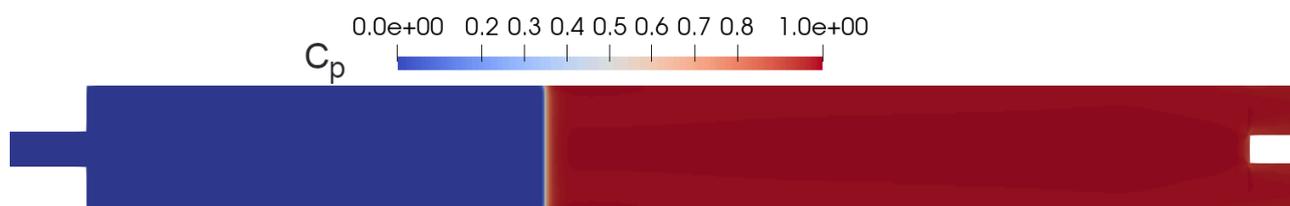


Рис. 12. Распределение концентрации продукта реакции на момент времени 1000. Фрагмент реактора

Сформулируем теперь некоторые выводы. Проведенные модельные расчеты течения в реакторе показали, что его основные характеристики соответствуют теоретическим представлениям [8, 10] и хорошо согласуются с результатами, полученными с помощью программного пакета Ansys Fluent. Однако использование пакета Ansys Fluent сопряжено прежде всего с лицензионными ограничениями. Кроме того, его использование ограничено по размерности сетки и перепаду давлений, если речь идет о расчетах процессов в реальной промышленной установке со сложной геометрией реактора.

Выполненные расчеты процессов в химическом реакторе показали применимость и расширяемость предложенной математической модели, в том числе для расчета течений через сложные геометрические области с неоднородной пористостью. Кроме того, введение уравнений конвекции-диффузии позволяет получить распределения сырья и продуктов реакции, необходимые для полного описания процесса гидроизомеризации.

Заключение

В работе исследован процесс прохождения двухкомпонентного углеводородного флюида в реакторе со слоем металлического катализатора. В этих целях построена оригинальная математическая модель, включающая регуляризованные на основе квазигидродинамического подхода уравнения Навье-Стокса и уравнения конвекции-диффузии, усредненные по репрезентативному элементарному объему. Предложен и программно

реализован вычислительный алгоритм, с помощью которого проведены тестовые расчеты. Для примера рассмотрена прямоугольная область с пористой вставкой. Расчеты проведены для трех чисел Рейнольдса. В целях верификации и валидации алгоритма проведено сравнение результатов численного моделирования с результатами, полученными с помощью ПО Ansys Fluent. Сравнение показало, что разработанная численная методика соответствует по основным характеристикам расчетным данным пакета Ansys Fluent. Также был проведен тестовый расчет химического реактора в плоской геометрии. Полученные результаты подтвердили возможность использования представленной компьютерной модели для описания процесса гидроизомеризации. Данная работа предваряет новый этап моделирования, связанный с разработкой многомасштабных моделей и методов расчета процессов получения органических топлив с заданными свойствами. Основное внимание авторов в дальнейшей работе будет уделено воспроизведению реальной трехмерной геометрии установок, в том числе промышленных, а также уточнению параметров химических превращений за счет включения в модель микроскопических описаний.

Список литературы

1. *Бакун В.Г., Яковенко Р.Е., Салиев А.Н., Сулима С.И., Земляков Н.Д., Некроенко С.В.* Получение синтетических низкозастывающих дизельных топлив: технологии и перспективы // *Инженерный вестник Дона*, 2017, №4, с. 1–27. URL: <http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2017/4537>
2. *Савостьянов А.П., Яковенко Р.Е., Нарочный Г.Б., Меркин А.А.* Получение арктического дизельного топлива из попутного нефтяного газа // *Журнал «Neftegaz.RU»*, 2017, т. 71, № 11, с. 62–66. URL: <https://magazine.neftegaz.ru/archive/503191/>
3. *Зайнуллин Р.З., Коледина К.Ф., Ахметов А.Ф., Губайдуллин И.М.* Кинетика каталитического риформинга бензина // *Кинетика и катализ*. 2017, т. 58, № 3, с. 550–559. DOI: 10.31857/S0453881120040176
4. *Зайнуллин Р.З., Коледина К.Ф., Ахметов А.Ф., Губайдуллин И.М.* Возможные пути модернизации реакторного блока каталитического риформинга на основе кинетической модели // *Эл. науч. журн. «Нефтегазовое дело»*, 2018, №6, с. 78–97. DOI: 10.17122/ogbus-2018-6-78-97
5. *Фасхутдинов Р.Р., Зайнуллин Р.З., Ромеро А.Э., Ахметова К.Р.* Эффективный метод оценки коммерческих катализаторов каталитического крекинга в лабораторных условиях // *Булат. чтен.*, 2020, т. 5, с. 290–299. URL: <http://www.id-yug.com/images/id-yug/Bulatov/2020/5/PDF/2020-5-290-299.pdf>
6. *Самотылова С.А., Торгашов А.Ю.* Применение физически обоснованной математической модели массообменного технологического процесса для повышения точности оценивания качества конечного продукта // *Теорет.*

- ОСНОВЫ ХИМ. ТЕХНОЛОГИИ, 2022, т. 56, № 3, с. 379–396. DOI: 10.31857/S0040357122020117
7. *Rybak I., Schwarzmeier C., Eggenweiler E., Rude U.* Validation and calibration of coupled porous-medium and free-flow problems using pore-scale resolved models // *Comput. Geosci.*, 2021, v. 25, p. 621–635. DOI: 10.1007/s10596-020-09994-x
 8. *Costa V.A.F., Oliveira L.A., Baliga B.R., Sousa A.C.M.* Simulation of coupled flows in adjacent porous and open domains using a control-volume finite-element method // *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2024, v. 45, No. 7, p. 675–697. DOI: 10.1080/10407780490424839
 9. *Das M.K., Mukherjee P.P., Muralidhar K.* Modeling Transport Phenomena in Porous Media with Applications. – New York: Springer, 2018. DOI: 10.1007/978-3-319-69866-3
 10. *Duzel U., Martin A.* Modeling high velocity flow through porous media // *Proc. AIAA Scitech 2020 Forum*. Orlando, 2020, p. 17. DOI: 10.2514/6.2020-0486
 11. Поляков С.В., Трапезникова М.А., Чурбанов А.Г., Чурбанова Н.Г. Расчет несжимаемых течений в системе «пористое тело – свободный поток» // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*, №71, 2021, 19 с. DOI: 10.20948/prepr-2021-71
 12. *Elizarova T.G.* Quasi-Gas Dynamic Equations. – NY: Springer – Verlag, 2009. DOI: 10.1007/978-3-642-00292-2
 13. *Шеретов Ю.В.* Математические модели гидродинамики: учеб. пособие. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2004.
 14. *Шеретов Ю.В.* Кинетически согласованные уравнения газовой динамики: монография. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2023.
 15. *Kaviany M.* Principles of Heat Transfer in Porous Media. – New York: Mechanical Engineering Series, Springer, 1991. DOI: 10.1007/978-1-4612-4254-3
 16. *Ingham D.B., Pop I.* Transport Phenomena in Porous Media. V. 2. – Oxford: Pergamon Press, Elsevier Science, 2002. DOI: 10.1016/B978-0-08-043965-5.X5000-4
 17. *Nield D.A., Bejan A.* Convection in Porous Media. 4th ed. – New York: Springer, 2013. DOI: 10.1007/978-1-4614-5541-7
 18. *Whitaker S.* Volume Averaging of Transport Equations // *Advances in Fluid Mechanics*, v.13, Fluid Transport in Porous Media, 1997, p. 1–60.
 19. *Eymard R., Gallouet T., Herbin R.* Finite volume methods // *Handbook of Numerical Analysis*, 2000, v. 7, p. 713–1018. DOI: 10.1016/S1570-8659(00)07005-8

Оглавление

Процесс гидроизомеризации в химическом реакторе.....	3
Математическая модель.....	5
Результаты моделирования	8
Заключение.....	13
Список литературы.....	14