УДК 66.096.5-932.2

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В РЕАКТОРІ КРЕКІНГУ АЕРОЗОЛЬНИМ НАНОКАТАЛІЗОМ

Поркуян О. В., Проказа О. І., Алахмад Алмоу К.

THE MODELING OF DIFFUSION PROCESSES IN THE REACTOR OF CRACKING BY THE AEROSOL NANOCATALYSIS

Porkuian O. V., Prokaza O. I., Alahmad Almouh K.

У роботі наведено результати теоретичних досліджень дифузійних процесів в реакторі крекінгу вакуумного газойлю з використанням технології аерозольного нанокаталізу. Показано, що ефективний коефіцієнт турбулентної дифузії для наночастинок каталізатора достатньо високий, і частинки переносяться турбулентним потоком також як і рідина, що спрощує розгляд багатофазної системи.

Ключові слова: *каталітичний крекінг, аерозольний нанокаталіз, каталізатор, дифузія, тверда фаза, моделювання.*

Вступ. Автоматизація процесів каталітичного крекінгу вакуумного газойлю з використанням технології аерозольного нанокаталізу потребує створення адекватних математичних моделей, що дозволяють застосовувати сучасні методи оптимального керування. Реактор крекінгу за технологією аерозольного каталізу, що розглядається в даній роботі, можна віднести до апаратів з віброзрідженим шаром. Особливістю таких апаратів, як і реакторів з механічним перемішуванням, барботажних апаратів та реакторів із псевдозрідженим шаром, являється стохастичний характер руху дискретної фази в об'ємі апарату і інтенсивні флуктуації різних типів [1]. Розвиток методів розрахунку та математичного моделювання таких процесів може бути використано для вибору оптимального режиму їх роботи, побудови автоматичних систем управління та обчислення оптимальних настроювань регуляторів.

Виклад основного матеріалу. В даний час каталітичний крекінг є найбільш перспективним і важливим серед процесів переробки нафти. Здійснення каталітичного крекінгу за технологією аерозольного нанокаталізу з віброзрідженим шаром є перспективним напрямком розвитку нафтопереробних виробництв. В реакторах каталітичного крекінгу за технологією аерозольного нанокаталізу каталітично активний матеріал піддається безперервній механохімактивації in situ шляхом примусових механічних коливань інертного диспергуючого матеріалу - скляних кульок розміром 0,8 - 1,2 мм. Відбувається постійне подрібнення скоагульованих частинок каталізатора до нанорозмірів (10^{-8}-10^{-10} м) та підтримання їх високої активності протягом необмеженого часу [2]. Причому реактор віброзрідженого шару дозволяє регулювати частоту імпульсів механохімактивації (МХА) поверхні частинок.

За чисельними дослідженнями встановлено, що варіюванням частоти механохімактивації можливо змінювати характеристики процесу каталітичного крекінгу, у тому числі швидкість процесу та механізм хімічних перетворень, що в принципі дозволяє підвищувати селективність цільових реакцій за рахунок зміни процесів енергетичних обмінів та силових взаємодій на мікрорівні. По суті, гідромеханичні процеси у віброзрідженому шарі певною мірою визначають ефективність хіміко-технологічного процесу в цілому [3]. Тому необхідно розглянути ці процеси з метою побудови фізико-математичної моделі, придатної для розробки систем автоматизації.

Враховуючи, що фізичні процеси у віброзрідженому шарі аналогічні процесам, що мають місце у системах з псевдозрідженим шаром, будемо для моделювання застосовувати методи, запропоновані в роботі [4].

Рух часток каталізатору можна розглядати на трьох рівнях:

- Мікрорівень. Цей рівень характеризується флуктаціями, масштаб яких порівняний з розмірами окремих частинок, при цьому рух окремих частинок в таких умовах носить характер мікроколивань без якого-небудь просторового трансферу енергії.
- Середній рівень. Флуктації на цьому рівні зв'язані з рухом частинок певними групами, всередині яких рух частинок корельовано.
- Макрорівень. Процеси переміщення та змішування носять характер флуктацій, які зв'язані з

порушенням статистично однорідної структури шару при виникненні коливань шару як цілого.

Враховуючи, що віброзріджений шар представляє собою багатофазну систему, то для описання змішування фаз цього шару в реакторі аерозольного нанокаталізу внаслідок хаотичного руху частинок можуть бути використані положення добре опрацьованої теорії дифузійних процесів [5]. Аналогія процесів змішування частинок твердої фази з дифузійними процесами переносу може бути, як зазначено в [4], установлена деякими шляхами. Будемо розглядати хаотичний рух частинок каталізатора як аналог руху броунівських частинок, тоді, в відповідності з класичними методами, можна увести коефіцієнт дифузії твердої фази, пропорційний швидкості руху частинок та довжині їх вільного пробігу. Змішування твердої фази віброзрідженого шару можна розглядати як процес типу турбулентного змішування рідини. Це дозволяє визначити ефективний коефіцієнт дифузії наночастинок каталізатору з позиції теорії турбулентного переносу як величину, пропорційну середньоквадратичному значенню пульсаційної компоненти швидкості руху твердої фази та довжині змішування. За своїми ознаками випадкові процеси руху частинок у віброзрідженому шарі можна вважати марковськими, тоді дифузійне описання змішування твердої фази слідує з рівнянь Колмогорова, які описують ймовірні характеристики марковських випадкових процесів.

Більшість методів визначення ефективних коефіцієнтів дифузії твердої фази засновано на зіставленні точних рішень дифузійного рівняння при відповідних граничних умовах з експериментальними вимірюваннями розподілення концентрації як-небудь помічених частинок в просторі та часі. В результаті зіставлення точних рішень дифузійного рівняння та експериментальних кривих, як правило, вдається знайти такі значення коефіцієнта дифузії, які входять в точні рішення, при цьому різниця теоретичних та експериментальних даних є суттєвою.

При визначенні ефективних коефіцієнтів дифузії по вимірюванням розподілень концентрації помічених частинок вимірюється загальний потік помічених частинок, який складається з конвективної та дифузійної частин. Таким чином, для визначення ефективного коефіцієнта дифузії необхідно знати розподілення циркуляційних швидкостей переносу твердої фази у віброзрідженому шарі. Ці швидкості не завжди відомі. Знаючи траєкторії руху окремих частинок у просторі шару, можна визначити ефективний коефіцієнт дифузії безпосередньо зі співвідношення Ейнштейна для дисперсії координат та часу без використання у явному вигляді рішень рівнянь дифузії.

Для того, щоби отримати рівняння ефективної дифузії твердої фази, можна виходити з різноманітних моделей руху твердої фази. Найбільш близьким до реальної картини руху є розгляд змішування твердої фази як аналога великомасштабної турбулентної течії, при котрому окремі групи частинок рухаються без втрати індивідуальності на протязі деякого шляху змішування [4]. В цьому випадку, з рядом допущень, виявляється можливим отримати для опису процесу переносу у твердій фазі диференціальне рівняння, постійні коефіцієнти якого можна ототожнити з ефективними коефіцієнтами дифузії.

Нехай в твердій фазі віброзрідженого шару присутня певна кількість помічених частинок з просторово-часовим розподіленням $\xi(r,\tau)$. Змінення кількості таких частинок в деякому об'ємі шару може відбуватися тільки за рахунок переносу частинок зі швидкостями руху *v* твердої фази:

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\int\limits_{(V)}\xi dV=\oint\limits_{(S)}-\xi v df=-\int\limits_{(V)}(\xi v)dV\,. \qquad (1)$$

Умова довільності об'єму інтегрування в (1) призводить до рівняння нерозривності для потоку помічених частинок:

$$\frac{\partial\xi}{\partial\tau}+div(\xi v)=0\,. \qquad (2)$$

Локальне значення швидкості руху твердої фази віброзрідженого шару можна представити в вигляді суми швидкості упорядкованого циркуляційного руху $\langle v\rangle$ та пульсаційної складової v', яка виникає у результаті локальних флуктацій аеродинамічних сил та безладних змін структури потоку:

$$v=\langle v\rangle+v'. \qquad (3)$$

Аналогічне співвідношення може бути записано й для концентрації ξ помічених частинок:

$$\xi=\langle\xi\rangle+\xi'. \qquad (4)$$

Після підстановки (3) и (4) у (2) та усереднення може бути отримано рівняння вигляду:

$$\frac{\partial\langle\xi\rangle}{\partial\tau}+div\langle\xi\rangle\langle v\rangle=-div\langle\xi' v'\rangle\,. \qquad (5)$$

Для того, щоб отримати рівняння (5) при проведенні усереднення, необхідно використати умови Рейнольдса:

$$\langle(\langle\xi\rangle+\xi')(\langle v\rangle+v')\rangle=\langle\xi\rangle\langle v\rangle+\langle\xi' v'\rangle\,. \qquad (6)$$

Виконання умови Рейнольдса визначається можливістю вибору інтервалу усереднення проміжного між періодами пульсаційного та усередненого рухів. Розрив між характерними частотами циркуляційного (0-0,1 Гц) та пульсаційного (0,5-15 Гц) руху твердої фази

достатньо великий, і виконання умови (6) може бути забезпечено.

Щоб придати рівнянню (5) форму дифузійного рівняння, необхідно виключити пульсаційну складову швидкості з правої частини рівняння. Для цього можна припустити, що компоненти густини пульсаційного потоку помічених частинок лінійно зв'язані з градієнтом середньої концентрації:

$$\langle \xi' \upsilon_i' \rangle = -D_{i,j} \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \cdot \qquad (7)$$

Це співвідношення грає таку ж роль, що й перший закон Фіка в молекулярній дифузії, і представляє собою гіпотезу, причому її застосовність для віброзрідженого шару повинна бути підтверджена експериментально. Підставляючи (7) у (5):

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot \langle \xi \rangle \langle \upsilon_i \rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} D_{ij} \cdot \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \cdot \qquad (8)$$

В рівняннях (7) та (8) пропонується сумування за індексом, що повторюється.

Компоненти тензора D_{ij} (ефективні коефіцієнти дифузії) є функціями координат та часу. Таким чином, при строго дифузійному описанні перемішування твердої фази необхідно завдання тензора поля D_{ij} у всьому просторі шару. Така задача важко виконувана, тому необхідні деякі розумні спрощення. Віброзріджений шар при встановленому режимі може бути розглянутий як статистично стаціонарна система, статистичні середні якої не змінюються в часі. Для статично стаціонарного шару тензор ефективних коефіцієнтів дифузії D_{ij} не залежить від часу. Ще одним спрощенням є припущення щодо аксіальної статистичної однорідності шару, в відповідності з яким статистичні характеристики не змінюються при зсуві початку системи координат вздовж осі симетрії шару. Анізотропія статистичних характеристик віброзрідженого шару визначається динамічною нерівноцінністю радіального та аксіального напрямків. Аксіальний напрямок співпадає з напрямком середнього вектору гідродинамічних сил. Ця обставина дозволяє припустити, що в циліндричній системі координат осі координат є головними осями тензора ефективних коефіцієнтів дифузії. В цьому випадку в тензорі D_{ij} відмінним від нуля будуть тільки діагональні компоненти D_{ii}. Обмежившись розглядом осесиметричних дифузійних задач у віброзрідженому шарі з аксіальною симетрією, можна виключити з рівняння (8) кутову координату, бо в будь-якій меридіональній площині картини руху твердої фази будуть статистично однакові. Таким чином, рівняння (8) прийме вигляд:

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial \tau} + div(\langle \xi \rangle \langle v \rangle) = D_{zz} \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle}{\partial z^2} + D_{rr} \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \cdot (r \cdot \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial r}) \cdot \qquad (9)$$

Із проведеного аналізу випливає, що циліндрична система координат для рівняння ефективної дифузії твердої фази віброзрідженого шару має особливе значення, бо її осі співпадають з головними осями тензора ефективних коефіцієнтів дифузії, що дозволяє використовувати в рівняннях тільки два коефіцієнта: D_{zz} та D_{rr}.

Застосування дифузійного рівняння вигляду (9) для описання процесів змішування в твердій фазі віброзрідженого шару призводить до характерного для дифузійного приближення парадоксу – нескінченності миттєвої швидкості руху частинок. Це є наслідком того, що у дифузійному описанні траєкторія руху одиночної частинки трактується як марківська функція, що не диференціюється. По фізичному змісту це відповідає ігноруванню інерційних властивостей частинки.

Щоб врахувати інерційність, можна записати рівняння (9) у вигляді [6,7]

$$-\rho_к \left\langle \vec{v}_к{}' M_к{}' \right\rangle = \rho_к \psi \left\langle \vec{v}_к{}' \otimes \vec{v}_к{}' \right\rangle {}^{k}\!/\!_{\varepsilon} \, grad \langle M_к \rangle , \qquad (10)$$

де M_k – масова концентрація;

$\vec{v}_k$ – абсолютна швидкість твердої фази;

ρ, $\rho_к$ – густина несучої і твердої фази,

${}^{k}\!/\!_{\varepsilon}$ – період турбулентної пульсації (відношення кінетичної енергії до швидкості її дисипації);

ψ – фактор, який відображає інерційність частинок, що залежить від масштабу турбулентності (розміру вихору) $L = k^{3/2} / \varepsilon$; турбулентного числа Рейнольда $\mathrm{Re}_t = \rho \sqrt{k} d_к / \mu$ та розміру часток.

Згідно гіпотези Прандтля-Колмогорова [7] вираз (10) може бути представлено в індексному вигляді:

$$-\left\langle M_к{}' \vec{v}_{к,i}{}' \right\rangle = \psi C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \langle M_к \rangle}{\partial x_j} . \qquad (11)$$

Турбулентний дифузійний потік може бути виражений як:

$$-\left\langle M_к' v_{к,i}' \right\rangle = Sc_t C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial \langle M_к \rangle}{dx_j} = D_t \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial x_j} , \qquad (12)$$

де D_t – коефіцієнт турбулентної дифузії рідкої фази;

Sc_t – турбулентне число Шмідта.

Порівнюючи (11) з (12), визначаємо коефіцієнт турбулентної дифузії твердої фази:

$$D_{кt} = D_t \frac{\psi}{Sc} \cdot \qquad (13)$$

Цей коефіцієнт залежить від поля турбулентності, тобто змінюється від точки до

точки. З урахуванням турбулентності рівняння збереження маси дисперсного середовища після осереднення за Рейнольдом, рівняння дифузії набуває вигляду і може бути записано як:

$$\frac{\partial \rho_к \langle M_к \rangle}{\partial t} + div(\rho_к \langle M_к \rangle \langle \vec{v}_к \rangle) = \\ = -div(\rho_к \psi \langle \vec{v}_e{}' \vec{v}_к{}' \rangle \delta t)(\Delta \langle M_к \rangle), \quad (14)$$

де δt – період турбулентної пульсації, який залежить від відношення турбулентної кінетичної енергії до швидкості її дисипації – k/ε.

Якщо розглядати часові інтервали, значно більші за час кореляції, то зміщення частинок можна вважати некорельованими і, тим самим, по закінченні проміжків часу, більших за час кореляції, ці величини будуть статистично незалежними. Таким чином, за цих умов випадкова послідовність зміщень поміченої частинки буде являтись марківською. Дифузійне наближення застосуємо для описання змішування у віброзрідженому шарі тільки при умові, що $\tau \rangle\rangle \tau_r^*$. Узагальнення дифузійного наближення на випадок обмеженої миттєвої швидкості частинки (коли $\tau \approx \tau_r^*$) може бути проведено або шляхом введення в дифузійне рівняння кінцевих різностей, або шляхом припущення, що марківською функцією є тільки шестивимірна функція $\{R(R_0,\tau), v(R_0,\tau)\}$, що відповідає використанню гіперболічного рівняння дифузії. Для того, щоб отримати таке рівняння, необхідно замість співвідношення (9) використати:

$$\langle \xi' \upsilon_i' \rangle = -D_{ij}^* \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} - \tau^* \cdot \frac{\partial}{\partial \tau} \langle \xi' \upsilon_i' \rangle. \quad (15)$$

Підставляючи (15) в (5), після деяких перетворень можна отримати гіперболічне рівняння дифузії твердої фази віброзрідженого шару:

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial \tau} + \tau^* \cdot \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle}{\partial \tau^2} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\langle \xi \rangle \langle \upsilon_i \rangle) = \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot D_{ij}^* \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_i}. \quad (16)$$

За умови, коли дифузійні властивості віброзрідженого шару можуть бути описані тільки двома коефіцієнтами дифузії, будемо мати:

$$\frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial \tau} + \tau^* \cdot \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle}{\partial \tau^2} + div(\langle \xi \rangle \langle v \rangle) = \\ = D_{zz}^* \frac{\partial^2 \langle \xi \rangle}{\partial z^2} + D_{rr} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r}(r \cdot \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial r}). \quad (17)$$

Повний опис руху твердої фази у віброзрідженому шару повинний складатись з системи, в яку входить рівняння (9) або (17) та рівняння, яке визначає середню швидкість $\langle v \rangle$ циркуляції твердої фази. В літературі [5] зустрічаються спроби використати одновимірне чисто дифузійне рівняння $(\langle v \rangle = 0, D_{rr} = 0)$ для визначення ефективних коефіцієнтів дифузії твердої фази. В цьому випадку потік вигляду:

$$q_m = \langle v \rangle \langle \xi \rangle - D \cdot qrad \langle \xi \rangle; \quad (18)$$

замінюється потоком:

$$q_m = -D' \cdot qrad \langle \xi \rangle. \quad (19)$$

Очевидно, що при визначенні ефективних коефіцієнтів дифузії відповідно до (19) для одного й того ж віброзрідженого шару чисельне значення ефективного коефіцієнту дифузії D' буде більше чисельного значення ефективного коефіцієнта D, визначеного відповідно з (18).

Маючи в своєму розпорядженні траєкторії руху помічених частинок у віброзрідженому шарі, можна безпосередньо розрахувати величину ефективних коефіцієнтів дифузії із співвідношень:

$$\upsilon_z^2(\tau) = \left\langle [z \cdot (\tau) - \langle z \cdot (\tau) \rangle]^2 \right\rangle \cong 2D_{zz} \cdot \tau; \\ \upsilon_z^2(\tau) = \left\langle [r \cdot (\tau) - \langle r \cdot (\tau) \rangle]^2 \right\rangle \cong 2D_{rr} \cdot \tau. \quad (20)$$

Як показує аналіз експериментальних даних за полідисперсними шарами, чисельні значення ефективних коефіцієнтів дифузії для частинок різних фракцій при кожному режимі віброзрідження співпадають у межах похибок експериментальної методики. Це може бути пояснено виходячи з моделі руху твердої фази у віброзрідженому шарі, згідно з якою ефективні коефіцієнти дифузії визначаються турбулентним змішуванням груп частинок, до складу яких входять частинки усіх фракцій. За аналогом зі статичною гідромеханікою рідини для ефективних коефіцієнтів дифузії можна увести співвідношення:

$$D_{zz} \approx \langle \upsilon_z' \rangle l_z; \\ D_{rr} \approx \langle \upsilon_r' \rangle l_r, \quad (21)$$

де $\langle \upsilon_z' \rangle$ та $\langle \upsilon_r' \rangle$ - середні значення пульсаційних складових компонент швидкості руху твердої фази, l_r та l_z - довжини аксіального та радіального шляхів змішування. При використовуванні співвідношень (21) виникають труднощі зі знаходженням довжин шляхів змішування, так як ці величини не є первинними, а визначаються іншими статичними характеристиками. Більш зручним для експериментальної перевірки та кількісної оцінки ефективних коефіцієнтів дифузії є співвідношення, яке зв'язує ефективний коефіцієнт дифузії D_{ij} та час кореляції τ_i^*:

$$D_{ii} \approx \frac{1}{2} \left\langle \upsilon_i^2{}' \right\rangle \cdot \tau_i^*, \text{ де } i = z, r. \quad (22)$$

Висновки. Для описання змішування фаз віброзрідженого шару в реакторі аерозольного

нанокаталізу внаслідок хаотичного руху частинок була використана теорія дифузійних процесів. Результати чисельних розрахунків показують, що ефективний коефіцієнт турбулентної дифузії для наночастинок каталізатора достатньо високий, і частинки переносяться турбулентним потоком також, як і рідина, що спрощує розгляд багатофазної системи. Теоретичні результати можуть бути використані для описання рівнянь тепло- та масоперенесення при розробці математичної моделі реактору аерозольного нанокаталізу.

Л і т е р а т у р а

1. Стенцель Й. І. Математичне моделювання хімічних процесів на основі теорії реологічних переходів / Й. І. Стенцель // Вісник Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля. – 2007. – № 5 (111), Ч.2. – С. 91-96.
2. Гликин М. А. Аэрозольный катализ / М. А. Гликин // Теоретические основы химической технологии. – 1996. – Т. 30, № 4. – С. 430-434.
3. Исследование аэрозольного нанокатализа в виброожиженном слое / И. М. Гликина, В. С. Новицкий, Н. Ф. Тюпало, М. А. Гликин // Хімічна промисловість України. – 2003. – № 3. – С. 24-29.
4. Таганов И. Н. Моделирование процессов массо- и энергопереноса / И. Н. Таганов. – Л.: Химия, 1979. – 203 с.
5. Соу С. Гидродинамика многофазных систем. – М.: Мир, 1971 – 536 с.
6. Dueck J. Matematical model and numerical calculations of hydrocyclone / J. Dueck, O. Matvienko, Th. Neesse // Proc. Of Int. Congress for Particle Technology PARTEC 2001, Nuremberg, Germany, 27–29 March 2001. – Nuremberg, 2001. – 218 p.
7. Matvienko O. Numerishe Simulation der Stromungen in einem Hydrozyklon / O. Matvienko, J. Dueck, Th. Neesse // Gessellschaft fur Angewandte Mathematik und Mechanik, Annual meeting, Bremen, 6–9 April 1998. – Bremen, 1998 – 128 p.

R e f e r e n c e s

1. Stencel' J. I. Matematichne modeljuvannja himichnih procesiv na osnovi teorії reologichnih perehodiv / J. I. Stencel' // Visnik Shidnoukraïns'kogo nacional'nogo universitetu imeni Volodimira Dalja. – 2007. – № 5 (111), Ch.2. – S. 91-96.
2. Glikin M. A. Ajerozol'nyj kataliz / M. A. Glikin // Teoreticheskie osnovy himicheskoj tehnologii. – 1996. – T. 30, № 4. – S. 430-434.
3. Issledovanie ajerozol'nogo nanokataliza v vibroozhizhennom sloe / I. M. Glikina, V. S. Novickij, N. F. Tjupalo, M. A. Glikin // Himichna promislovist' Ukraini. – 2003. – № 3. – S. 24-29.
4. Taganov I. N. Modelirovanie processov masso- i jenergoperenosa / I. N. Taganov. – L.: Himija, 1979. – 203 s.
5. Sou S. Gidrodinamika mnogofaznyh sistem. – M.: Mir, 1971 – 536 s.
6. Dueck J. Matematical model and numerical calculations of hydrocyclone / J. Dueck, O. Matvienko, Th. Neesse // Proc. Of Int. Congress for Particle Technology PARTEC 2001, Nuremberg, Germany, 27–29 March 2001. – Nuremberg, 2001. – 218 p.
7. Matvienko O. Numerishe Simulation der Stromungen in einem Hydrozyklon / O. Matvienko, J. Dueck, Th. Neesse // Gessellschaft fur Angewandte Mathematik und Mechanik, Annual meeting, Bremen, 6–9 April 1998. – Bremen, 1998 – 128 p.

Поркуян О. В., Проказа Е. И., Кутайба А. А. Моделирование диффузионных процессов в реакторе крекинга аэрозольным нанокатализом

В работе приведены результаты теоретических исследований диффузионных процессов в реакторе крекинга вакуумного газойля с использованием технологии аэрозольного нанокатализа. Показано, что эффективный коэффициент турбулентной диффузии для наночастиц катализатора достаточно высокий, и частицы переносятся турбулентным потоком также как и жидкость, что упрощает рассмотрение многофазной системы.

Ключевые слова: *каталитический крекинг, аэрозольный нанокатализ, катализатор, диффузия, твердая фаза, моделирование.*

Porkuyan O. V., Prokaza O. I., Kutaiba A. A. The modeling of diffusion processes in the reactor of cracking by the aerosol nanocatalysis

The results of theoretical researches of diffusion processes in the reactor of cracking of vacuum gas oil using the technology of aerosol nanocatalysis are given in the work. It is shown that the effective coefficient of turbulent diffusion for the catalyst nanoparticles is high enough, and the particles are carried by turbulent flow as well as liquid, that simplifies the consideration of the multiphase system.

Keywords: *catalytic cracking, aerosol nanocatalysis, catalyst, diffusion, solid phase, modeling.*

Поркуян Ольга Вікторівна – д.т.н., професор, директор, Технологічний інститут Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Сєвєродонецьк) OLGA.PORKUIAN@gmail.com

Проказа Олена Іванівна – к.т.н., доцент кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Технологічний інститут Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Сєвєродонецьк) kafKISU.Elena@gmail.com

Алахмад Алмоу Кутайба – аспірант кафедри комп'ютерно-інтегрованих систем управління, Технологічний інститут Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Сєвєродонецьк) OLGA.PORKUIAN@gmail.com

Рецензент: **Соколов В. І. -** д.т.н., професор

Стаття подана 14.10.2014