03

Компьютерное моделирование ламинарного течения химически реагирующей углеводородной жидкости для синтеза нефтехимических продуктов

© С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, Н.И. Тарасов

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
125047 Москва, Россия
e-mail: kudryashova@imamod.ru

Поступило в Редакцию 29 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 26 июня 2025 г.
Принято к публикации 26 июня 2025 г.

Рассмотрена проблема нефтепереработки, связанная с производством морозостойких дизельных топлив. В качестве объекта исследования выбрана технология производства изомера гексадекана в лабораторной установке, основанная на термическом стимулировании каталитической реакции. Материалом катализатора служит пористый алюмофосфат. Представлено численное решение прямой задачи изомеризации с учетом геометрии установки. Предложена оригинальная комплексная трехмерная математическая модель, включающая квазигидродинамическую систему уравнений для расчета течения жидкой среды и уравнения конвекции–диффузии — реакции для расчета динамики концентраций исходного сырья и продуктов реакции. При численной реализации модели применены методы расщепления по физическим процессам и конечных объемов. Использована процедура распараллеливания на основе метода разделения областей.

Ключевые слова: переработка нефти, каталитические реакции изомеризации, квазигидродинамика, конвекция–диффузия, трехмерное компьютерное моделирование.

DOI: 10.61011/JTF.2026.01.62033.92-25

Введение

Детальное теоретическое изучение характеристик потоков жидкости и газа в системах добычи нефти началось в 1950-х годах с акцентом на приложения к процессам в вертикальных скважинах. В то время данные в основном основывались на эксплуатационных показаниях, полученных в полевых условиях. Они включали такие параметры, как объемный расход, теплофизические свойства каждой фазы, давление внутри трубопровода, внутренний диаметр и угол наклона. На основе этого скромного набора информации появились первые научные работы [1,2]. Дальнейшие исследования проникли также в сферу переработки сырой нефти и природного газа [3,4] и сопровождались разработкой большого класса математических методов [5–10]. К настоящему моменту нефтехимическая отрасль использует развитые технологии компьютерного моделирования, реализованные в таких известных пакетах, как HYSIM, HYSYS, Pro II, ProVision, Pipeface, Protiss, Aspen Plus, Speed UP, Dyna Plus, CHEMCAD, PROSIM и др. В современной ситуации многие из них недоступны для использования в отечественной нефтехимической индустрии, в связи с чем требуется их импортозамещение. Однако более важным аспектом является развитие новых технологий моделирования и создание цифровых платформ для нефтегазовой отрасли.

В настоящей работе рассматривается одна из конкретных задач нефтепереработки, связанная с производством морозостойких дизельных топлив. В качестве объекта исследования выбрана технология производства изомера гексадекана в лабораторной установке, основанная на термическом стимулировании каталитической реакции в присутствии водорода. Материалом катализатора служит пористый алюмофосфат.

В отличие от чисто термического способа переработки, где для расщепления сырья используется лишь тепловая энергия, основой рассматриваемого производственного процесса является многостадийная схема химических превращений, стимулируемая катализаторами. Итоговый производственный цикл является более экономичным, так как образование продукта с нужными свойствами протекает при более низких температурах и с большей скоростью. Получаемый продукт содержит гораздо меньше непредельных углеводородов и не требует добавления антиокислителей.

Выбор вышеуказанного направления исследования связан со следующим. Жидкие углеводороды являются основными компонентами современной энергетической инфраструктуры. Синтетические бензин и дизельное топливо содержат значительно более высокую плотность энергии, чем исходные природные компоненты: метанол, этанол, метан и водород. Это обстоятельство позволяет развивать и использовать транспортные системы, базирующиеся на принципах получения энергии из углеводородов, еще долгое время.

Теоретический и численный анализ потоков углеводородов дает инженерам и технологам эффективный ин-

струмент в оптимизации производственных процессов. В современной ситуации при массовом использовании компьютеров и программных средств моделирования важным является разработка так называемых мультифизичных моделей и высокоточных численных алгоритмов их реализации. В рассматриваемом нами направлении актуальными задачами являются комплексные модели, отражающие все стадии процесса переработки сырья и учитывающие одновременно процессы тепло- и массопереноса, химические превращения. Также важным является учет в них структуры каталитической среды, состава углеводородного флюида, геометрии лабораторной или производственной установки. Актуальным остается и численная и компьютерная реализации таких моделей.

Целью данного исследования является разработка численной методики компьютерного анализа процессов гидроизомеризации гексадекана в присутствии катализатора на основе алюмофосфата. Практической целью такого анализа является эффективность применения и мониторинг состояния катализатора в период эксплуатации установки, который позволяет своевременно перейти к циклу регенерации катализатора или его полной замены.

В настоящей работе рассматривается задача о прохождении углеводородной жидкости, содержащей гексадекан и водород, через слоистую пористую среду, включающую гранулы стекла и катализатора. В слое катализатора рассматривается механизм гидроизомеризации, который описывается химическими превращениями сырья в продукт с образованием побочной фракции в виде метана. Для выбранной постановки задачи в случае трехмерной геометрии предложена комплексная математическая модель, построен сеточный вариант ее дискретизации на основе метода конечных объемов, разработаны алгоритм и программа для проведения вычислительных экспериментов. С помощью программы проведен ряд численных расчетов.

1. Постановка задачи и математическая модель

Рассмотрим активную зону лабораторного химического реактора цилиндрической осесимметричной формы, изображенную на рис. 1. Она имеет входное и выходное отверстия, расположенные соответственно слева и справа. В центральной области расположен слой катализатора, зафиксированный слева и справа стеклянной крошкой. На оси реактора располагается цилиндрический медный теплонагреватель, стимулирующий химические реакции в слое катализатора. В качестве материала катализатора используется алюмофосфат.

В объем реактора поступает углеводородная смесь, в которой основным компонентом является гексадекан $n\mathrm{C}_{16}$ ($\mathrm{C}_{16}\mathrm{H}_{34}$), а также растворены в малых концентрациях изомер гексадекана $i\mathrm{C}_{16}$ ($\mathrm{C}_{16}\mathrm{H}_{34}$), молекулярный водород (H_2) и метан (CH_4). Данная смесь попадает в

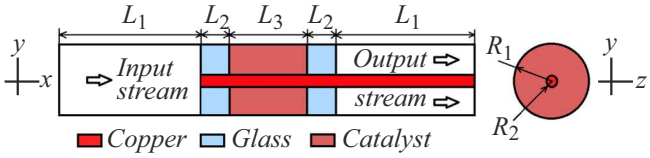


Рис. 1. Схема химического реактора в продольном (слева) и поперечном (справа) сечениях.

слой катализатора, в котором протекают следующие химические реакции: 1) $n\mathrm{C}_{16}i\mathrm{C}_{16} \leftrightarrows i\mathrm{C}_{16}$, 2) $n\mathrm{C}_{16} \xrightarrow{H_2} \mathrm{CH}_4$, 3) $i\mathrm{C}_{16} \xrightarrow{H_2} \mathrm{CH}_4$.

Реакции стимулируются как наличием катализатора, так и нагревом слоя катализатора с помощью теплонагревателя. Среда катализатора вместе со слоями уплотнителя рассматривается нами как пористая среда с фиксированным каркасом. Поступающая в нее жидкость считается однофазной, слабо сжимаемой и многокомпонентной. В этих предположениях в условиях постоянной температуры флюида можно использовать следующую комплексную модель процесса изомеризации.

Первая часть модели базируется на приближении VANS для пористого слоя [5–10] и квазигидродинамическом подходе (КГиД) [11,12]. Она описывает единым образом течение многокомпонентной среды с общей плотностью ρ и скоростью $\mathbf{u}$ в свободном пространстве и в пористом теле в виде (1), (2):

$$\nabla(\mathbf{n} - \mathbf{w}) = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla\Big(\frac{1}{\varepsilon}\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \otimes \mathbf{u}\Big) = - \varepsilon\nabla p + \nabla(\mathbf{\Pi}_{NS} + \mathbf{\Pi}_{QHD}) - G\mathbf{u}, \tag{2}$$

Здесь ∇ и $\otimes$ — оператор набла и внешнее произведение векторов в координатах x, y, z, t — время, $\varepsilon = \varepsilon(x, y, z) = V_l/V$ — пористость, V_L — объем жидкой фазы, V — общий объем среды, $\mathbf{u}$ и $\mathbf{w}$ — вектор скорости фильтрации и КГиД поправка к нему, имеющая вид (3):

$$\mathbf{w} = \frac{\tau}{\rho}\left[\Big(\frac{1}{\varepsilon}\rho\mathbf{u}, \nabla\Big)\mathbf{u} + \varepsilon\nabla p + G\mathbf{u}\right], \tag{3}$$

τ — параметр регуляризации КГиД подхода (при малых скоростях потока подбирается из соображений обеспечения устойчивости численного алгоритма, принимается равным $\tau \sim \frac{1}{\mathrm{Re}}$), p — давление, $\mathbf{\Pi}_{NS}$ и $\mathbf{\Pi}_{QHD}$ — тензор Навье–Стокса и КГиД поправка к нему, определяющиеся выражениями (4), (5):

$$\mathbf{\Pi}_{NS} = \{\Pi^{NS}_{\alpha\beta}\},$$

$$\Pi^{NS}_{\alpha\beta} = \mu\left(\frac{\partial u_\beta}{\partial\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial\beta}\right) - \delta_{\alpha\beta}\frac{2}{3}\mu\mathrm{div}\mathbf{u}, \ \ \alpha, \beta = x, y, z, \tag{4}$$

$$\mathbf{\Pi}_{QHD} = \frac{1}{\varepsilon}\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{w}. \tag{5}$$

μ — динамическая вязкость, $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера, $G = \varepsilon\mu K^{-1} + \rho F(\varepsilon) K^{-1/2}|\mathbf{u}|$ — коэффициент стока импульса, связанный с движением жидкости через пористую среду, K — проницаемость пористой среды, $F(\varepsilon)$ — эмпирический коэффициент Форхгеймера [13], $\mathrm{Re} = \frac{u_0 D_0 \rho}{\mu}$ — число Рэйнольдса, u_0 — характерная скорость течения, D_0 — гидродинамический диаметр области исследования.

Вторая часть модели описывает химические реакции в слое катализатора и процессы конвекции — диффузии компонент смеси (6):

$$\frac{\partial(\varepsilon C_k)}{\partial t} = \nabla[\varepsilon D_k \nabla C_k] - \nabla(\mathbf{u} C_k), \ k = 1, 2, 3, 4. \quad (6)$$

Здесь C_k — концентрации компонент смеси, индексом $k = 1, 2, 3, 4$ последовательно пронумерованы гексадекан, изогексадекан, водород и метан.

Расчет превращений компонентов смеси производится с использованием уравнений реакций в рамках метода расщепления по физическим процессам. На основе полей концентраций, полученных с помощью уравнений (6), осуществляется их локальный пересчет в области катализатора. В данном случае процесс катализа описывается с помощью следующей системы уравнений (7):

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -w_1 - w_2, \ \frac{\partial C_2}{\partial t} = w_1 - w_3,$$
$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = -w_2 - w_3, \ \frac{\partial C_4}{\partial t} = 2w_2 + 2w_3, \quad (7)$$
$$w_1 = k_1 C_1 - k_2 C_2, \ w_2 = k_3 C_1 C_3, \ w_3 = k_4 C_2 C_3,$$

где $k = 1, 2, 3, 4$ — коэффициенты реакции, полученные эмпирическим путем. Система (7) отражает следующие свойства рассматриваемой реакции. В процессе катализа не происходит образования водорода. Формирование метана реализуется из исходного примесного водорода, гексадекана и изогексадекана. Кроме того, при сложении уравнений системы (7), можно увидеть отсутствие дополнительных источников и, как следствие, выполнение закона сохранения массы при химических превращениях, т. е.

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{\partial C_3}{\partial t} + \frac{\partial C_4}{\partial t} = 0.$$

Уравнения (1)–(6) обезразмериваются и дополняются необходимыми граничными и начальными условиями [14]. Уравнение для определения поля давления получается подстановкой (3) в (1) и имеет вид (8):

$$\nabla(\varepsilon \nabla p) = \nabla\left[\frac{\rho}{\varepsilon}\mathbf{u} - \left(\frac{1}{\varepsilon}\rho\mathbf{u}, \nabla\right)\mathbf{u} - G\mathbf{u}\right]. \quad (8)$$

Граничные условия зависят от типа границы области исследования. Для входного отверстия используется установившееся течение Пуазейля и известное распределение концентраций

$$\mathbf{u} = \left\{1 - \frac{y^2 - z^2}{R_1}, 0, 0\right\}, \ \frac{\partial p}{\partial n} = \frac{2}{\mathrm{Re} R_1^2},$$

$$C_1 = \mathrm{const}, \ C_2 = \mathrm{const}, \ C_3 = \mathrm{const}, \ C_4 = \mathrm{const}.$$

На стенке задаются условия прилипания и нулевой поток для концентраций:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \ \frac{\partial p}{\partial n} = 0,$$
$$\frac{\partial C_1}{\partial n} = \frac{\partial C_2}{\partial n} = \frac{\partial C_3}{\partial n} = \frac{\partial C_4}{\partial n} = 0.$$

На выходном отверстии задаются условия свободного выхода:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \ p = 0,$$
$$\frac{\partial C_1}{\partial n} = \frac{\partial C_2}{\partial n} = \frac{\partial C_3}{\partial n} = \frac{\partial C_4}{\partial n} = 0.$$

Численная схема дискретизации уравнений (2), (6), (8) на гексаэдральной сетке была построена с помощью метода конечных объемов [15]. При расчете давления в качестве конечного объема использовались ячейки расчетной сетки. Компоненты вектора скорости и концентраций 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 (2) и (6). При этом в рамках временно́го шага происходит решение разностного аналога уравнения (8) посредством итерационного метода сопряженных градиентов с диагональным предобусловливателем. Вследствие независимости уравнений (2), (8) от концентраций компонент смеси общий алгоритм разделен на две стадии. На первой стадии рассчитывается квазистационарное течение флюида через реактор. На второй стадии интегрируются уравнения (6). При интегрировании уравнений (6) на каждом временно́м шаге концентрации локально в узлах области катализатора пересчитываются в соответствии с уравнениями химических реакций (7).

Для вычислительного алгоритма разработана параллельная программная реализация на языке C++ с использованием библиотек Eigen, OpenMPI, GMSH и VTK. Расчеты проводились на гибридном суперкомпьютере K60, установленном в Суперкомпьютерном центре коллективного пользования ИПМ РАН.

2. Результаты численного моделирования

В качестве объекта исследования рассмотрен фрагмент лабораторного химического реактора для каталитического риформинга [16]. Параметры последующих расчетов выбирались с учетом экспериментальных данных работы [17]. Расчеты проводились в трехмерной области (рис. 2, *1*), на неструктурированной тетраэдральной сетке (рис. 2, *2*). Параметры геометрии в соответствии с обозначениями на рис. 1 имеют следующие значения: $L_1 = 3$, $L_2 = 0.5$, $L_3 = 2$ и нормировались на

радиус входного отверстия установки $R_0 = 10^{-2}$ m. Расчетная сетка строилась с использованием программного комплекса GMSH и содержала 1 940 377 объемных элементов, 368 446 точек. При параллельных вычислениях сетка разбивается на 28 подобластей (рис. 2, 3).

Расчеты течения были выполнены для следующих параметров движущейся среды: $\rho_0 = 770\,\mathrm{kg/m^3}$, $\mu_0 = 3.3 \cdot 10^{-3}$ Pa·s, $u_0 = 0.043$ m/s. Представленные параметры соответствуют основным компонентам смеси — гексадекану и изогексадекану. Данные значения соответствуют числу Рэйнольдса $\mathrm{Re} = 100$. Параметры пористых областей имеют следующие значения: $\mathrm{Da}_g = 0.1$, $\mathrm{Da}_c = 0.2$, $\varepsilon_g = 0.28$, $\varepsilon_c = 0.6$, здесь g — стеклянная крошка, c — катализатор. Расчет проводился до значения $t_{\max} = 10$ с шагом по времени $\tau_t = 2.4 \cdot 10^{-4}$ и параметром регуляризации $\tau = 5 \cdot 10^{-3}$. Параметр нормировки по времени был равен $t_0 = 0.233$ s. Расчет выполняется из состояния покоящейся среды с граничными условиями: на входе — течение Пуазейля; на стенках — условия прилипания, на выходе — условия свободного выхода. Стационарные распределения основных параметров течения — скорости и избыточного давления — показаны на рис. 3, 4.

Представленный вычислительный алгоритм расчета течения и его программная реализация для двумерной постановки сравнивались с программным комплексом Ansys Fluent в [14]. Полученные в настоящей работе результаты, позволяют сделать вывод о корректности трехмерной реализации. В свободной области на входе формируется параболический профиль скорости и линейный перепад давления. Затем в соответствии с геометрическими 92 особенностями расчетной области, происходит перестройка профиля Пуазейля. При этом, согласно закону Бернулли, торможение набегающего потока возле торца медного нагревателя приводит к повышению давления. Кроме того, адекватно отражена разность пористостей и проницаемостей стеклянной крошки и катализатора. Отметим, что расход жидкой среды на входном и выходном отверстиях установки одинаков. Это позволяет сделать вывод о корректности аппроксимации модели течения.

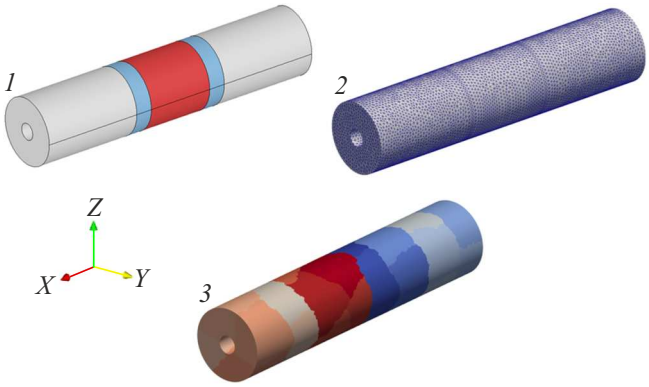


Рис. 2. Геометрия вычислительной области (*1*), тетраэдральная сетка (*2*), разбиение сетки на домены параллельного счета (*3*).

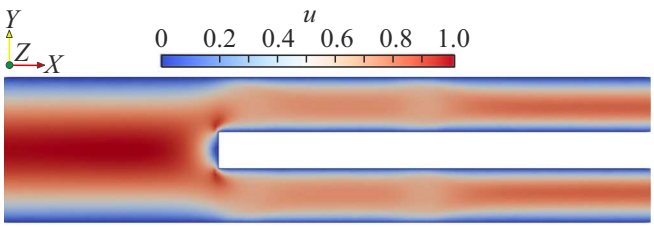


Рис. 3. Распределение модуля скорости в центральной части расчетной области (XY). Нормировка скорости $u_0 = 0.043$ m/s.

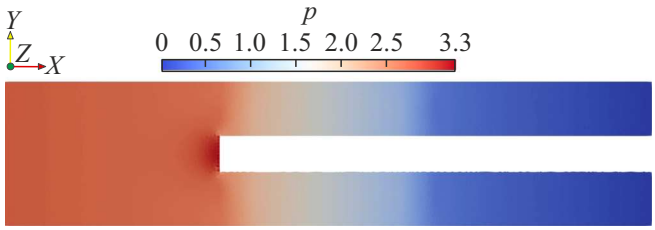


Рис. 4. Распределение избыточного давления в центральной части расчетной области (XY). Нормировка давления $p_0 = 1.4237$ Pa.

Полученные поля скоростей использовались для последующего расчета эволюции концентраций компонентов смеси. В расчете были заданы следующие параметры модели: $D_1 = 0.01$, $D_2 = 0.01$, $D_3 = 0.1$, $D_4 = 0.08$. Коэффициенты реакции: $k_1 = 1.0$, $k_2 = 0.1$, $k_3 = 0.05$ и $k_4 = 0.05$. Эти значения получены при осреднении табличных данных по температуре из диапазона 300 °C–360 °C. В качестве начальных условий во всей области и на входе в установку задавались следующие значения концентраций компонентов смеси: $C_1 = 0.948$, $C_2 = 0.001$, $C_3 = 0.05$, $C_4 = 0.001$. Расчеты проводились до значения $t_{\max} = 12.7$, когда устанавливался стационарный режим катализа изогексадекана. Полученные на этот момент времени распределения концентраций приведены на рис. 5. Они показывают, что в стационарном состоянии в области катализатора формируется распределение источников и продуктов реакции, соответствующее теоретическим оценкам, а также экспериментальным данным по выходу продукта из работы [17] (табл. 1, катализатор Pt/SAPO-11).

Дальнейшее развитие предложенной математической модели будет связано с более точным определением коэффициентов диффузии и констант реакции на основе экспериментальных данных и молекулярного моделирования. Также будут учтены зависимости этих параметров от температуры.

В целом полученные результаты отражают осесимметричный характер исследуемой геометрии. Однако сегодня не меньший интерес вызывает задача модернизации конструкций реакторных блоков на основании предварительных численных расчетов [18]. В данном случае использование трехмерной модели и неструктуриро-

ванных сеток позволит исследовать области, имеющие несимметричные патрубки (подводы сырья и выводы продуктов реакций), дополнительные фильтры, а также сужения и расширения основного резервуара реактора. В качестве примера рассмотрим реактор при наличии в нем двух теплонагревателей, схема которого изображена на рис. 6. Параметры расчета, а также граничные и начальные условия соответствуют использованным в осесимметричном случае. Расстояние между центральной осью и теплонагревателями принималось равным $L_4 = 0.4$. Полученные в результате данных расчетов параметры течения изображены на рис. 7 и 8. Распределения компонент смеси приведены на рис. 9. Таким образом, разработанный трехмерный вычислительный алгоритм позволяет исследовать процессы катализа в несимметричных геометрических постановках. Полученная программная реализация может стать полезным инструментом при конструировании новых и оптимизации существующих реакторов.

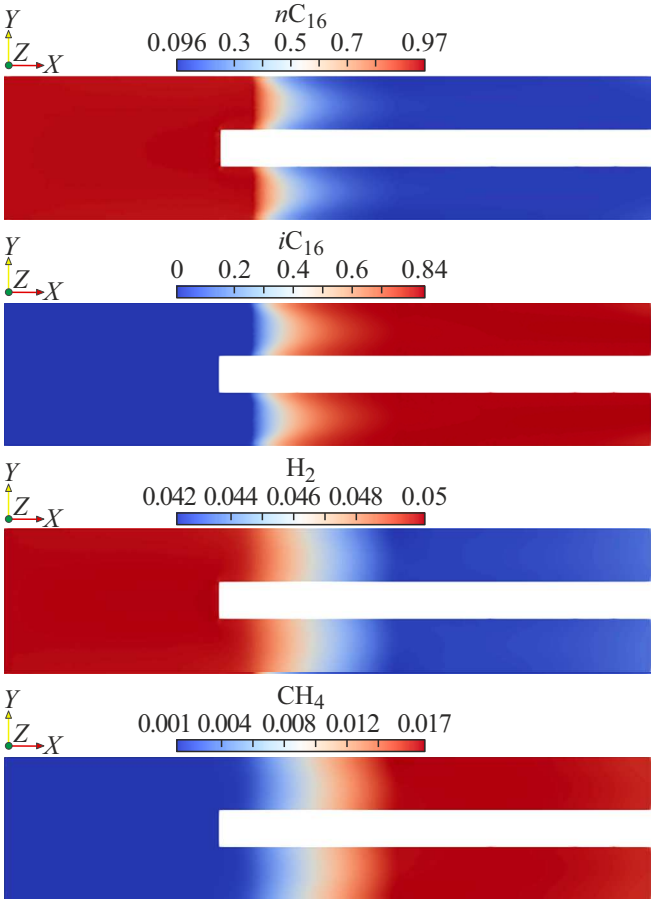


Рис. 5. Распределение концентрации nC_{16}, iC_{16}, H_2 и CH_4 в центральной части расчетной области (XY).

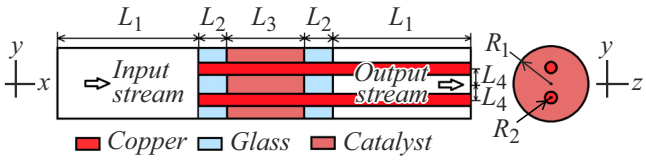


Рис. 6. Схема химического реактора с двумя теплонагревателями в продольном (слева) и поперечном (справа) сечениях.

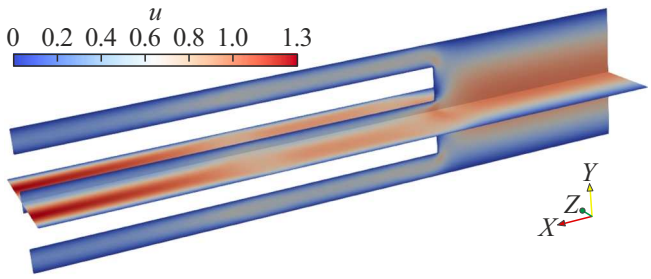


Рис. 7. Распределение модуля скорости в сечениях XY и XZ.

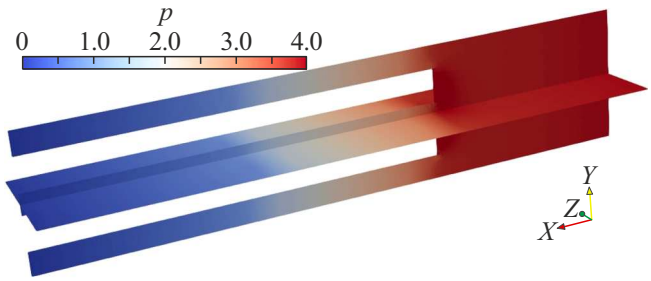


Рис. 8. Распределение избыточного давления в сечениях XY и XZ.

Заключение

В работе рассматривается актуальная проблема компьютерного моделирования процессов переработки углеводородного сырья. В качестве примера выбрана технология изомеризации гексадекана в лабораторной установке, разработанной с целью получения дизельного топлива с заданными свойствами. Предложена оригинальная сложная трехмерная математическая модель для рассматриваемой физико-химической задачи. Модель позволяет выполнить сквозной расчет течения углеводородной жидкости по всему объему установки, включая свободные зоны, пористые уплотнения и катализатор. Модель основана на перспективном квазигидродинамическом подходе, а также уравнениях диффузии–конвекции–реакции. Численная реализация данного подхода основана на методе разбиения по физическим процессам и сеточном методе конечных объемов на тетраэдральной нерегулярной сетке. Для программной реализации разработанного алгоритма применены параллельные вычисления. Численные эксперименты подтвердили работоспособность разработанной вычислительной методики и возможность ее применения для решения промышленных задач переработки нефти и газа.

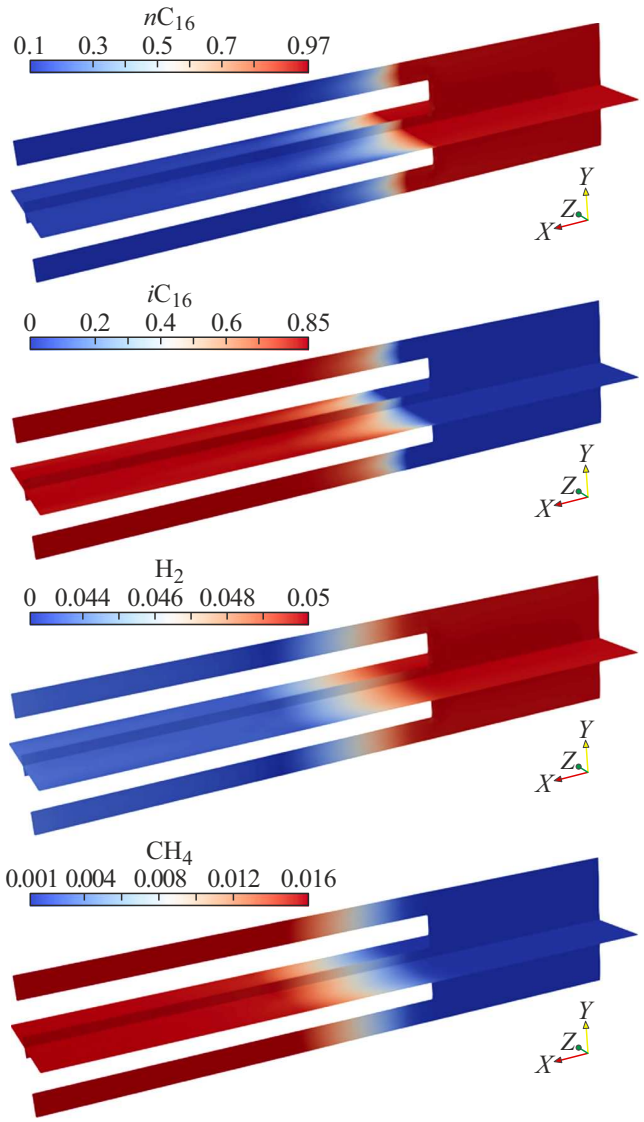


Рис. 9. Распределение концентрации nC_{16}, iC_{16}, H_2 и CH_4 в сечениях XY и XZ.

Финансирование работы

Финансирование исследований осуществлялось из средств федерального бюджета на выполнение государственного задания Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] F.H. Poettman, P.G. Carpenter. *The Multiphase Flow of Gas, Oil, and Water through Vertical Flow Strings with Application to the Design of Gas-Lift Instal-lations* (Drilling and Production Practice, NY., 1952, Document ID: API-52-257)

[2] P.B. Baxendell, R. Tomas. J. Pet. Technol., **13** (10), 1023 (1961). DOI: 10.2118/2-PA

[3] R.C. Reid, J.M. Prausnitz, T.K. Sherwood. *The Properties of Gases and Liquids* (McGraw Hill Book Company, 1981)

[4] О.Ю. Баталин, А.И. Брусиловский, М.Ю. Захаров. *Фазовые равновесия в системах природных углеводородов* (Недра, М., 1992)

[5] D.B. Ingham, I. Pop. *Transport Phenomena in Porous Media* (Pergamon Press, Elsevier Science, Oxford, 2002), v. 2.

[6] M.K. Das, P.P. Mukherjee, K. Muralidhar. *Modeling Transport Phenomena in Porous Media with Applications* (Springer, NY., 2018)

[7] S. Whitaker. *Volume averaging of transport equations*, Chapter 1. In J.P. Du Plessis (editor). *Flow in Porous Media* (Computational Mechanics Publications, Southampton, UK., 1997)

[8] I. Rybak, C. Schwarzmeier, E. Eggenweiler, U. Rude. Comput. Geosci, **25**, 621 (2021).

[9] Yu Qi, Ch.-F. Cai, P. Sun, D.-W. Wang, H.-J. Zhu. Petroleum Sci., **20**, 1978 (2023).

[10] V.A.F. Costa, L.A. Oliveira, B.R. Baliga, A.C.M. Sousa. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, **45**, 675 (2004).

[11] T.G. Elizarova. *Quasi-Gas Dynamic Equations* (Springer-Verlag, NY., 2009)

[12] Ю.В. Шеретов. *Математические модели гидродинамики*. Учебное пособие (Тверской гос. ун-т, Тверь, 2004)

[13] С.В. Поляков, М.А. Трапезникова, А.Г. Чурбанов, Н.Г. Чурбанова. № Препринт 71 (Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, М., 2021)

[14] С.В. Поляков, В.О. Подрыга, Н.И. Тарасов, К.Ф. Коледина. Теоретические основы химической технологии, **58** (5), 638 (2024). DOI: 10.31857/S0040357124050104 [S.V. Polyakov, V.O. Podryga, N.I. Tarasov, K.F. Koledina. Theor. Foundations Chem. Eng., **58** (6), 1900 (2024). DOI: 10.1134/S0040579525600950]

[15] R. Eymard, Th. Gallouët, R. Herbin. *Handbook of Numerical Analysis* (North Holland, Amsterdam, 2000), v. 7. DOI: 10.1016/S1570-8659(00)07005-8

[16] Р.З. Зайнуллин, К.Ф. Коледина, А.Ф. Ахметов, И.М. Губайдуллин. Электронный научный журнал „Нефтегазовое дело“, **6**, 78 (2018). DOI: 10.17122/ogbus-2018-6-78-97

[17] З.Р. Хайруллина, М.Р. Аглиуллин, И.Е. Алехина, Б.И. Кутепов. Вестник Башкирского ун-та, **25** (3), 495 (2020).

[18] S.V. Zazhigalov, V.A. Shilov, V.N. Rogozhnikov, D.I. Potemkin, V.A. Sobyanin, A.N. Zagoruiko, P.V. Snytnikov. Chem. Eng. J., **442** (1), 136160 (2022). DOI: 10.1016/j.cej.2022.136160