



ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА  
ИМ. Г.К. БОРЕСКОВА

---

## «Лазерный терموкаталитический синтез водорода и непредельных углеводородов из природного газа - эксперимент и теория»

Снытников В.Н.  
Пескова Е.Е.  
Стояновская О.П.  
Лашина Е. А.  
Маркелова Т. В.

Валерий Николаевич Снытников

Ведущий научный сотрудник  
Отдела гетерогенного катализа ИК СО РАН,  
Новосибирск  
E-mail : [snyt@catalysis.ru](mailto:snyt@catalysis.ru)

Доклад сделан при поддержке РФФ,  
проект № 21-19-00429



Многотоннажное производство  
Крупные источники сырья

Печи  
пиролиза



Маломасштабные источники  
Сланцевый газ



ForexAW.com



ForexAW.com

Сланцевый газ  
одна скважина  $10^3 - 10^4$  м<sup>3</sup>/день

**Задача:**

Мобильные установки  
Малотоннажного производства  
ценных углеводородов  
и водорода



## Проблема

### ПОЛУЧЕНИЕ ЭТИЛЕНА - ВАРИАНТ МОНЕТИЗАЦИИ ПРИРОДНОГО ГАЗА

#### СЫРЬЕ

Метан



1000 м<sup>3</sup>

~5 000 руб.

#### ПРОДУКЦИЯ

Этилен



0,63 т

Водород



0,09 т

~40 000 руб.

- Этилен – самый многотоннажный полупродукт современного химического производства
- Природный газ может стать ценнейшим сырьем для получения этилена и водорода из метана
- Цель – создание экономически обоснованной технологии получения этилена и водорода из природного газа

### ОСНОВНАЯ НАУЧНАЯ ПРОБЛЕМА

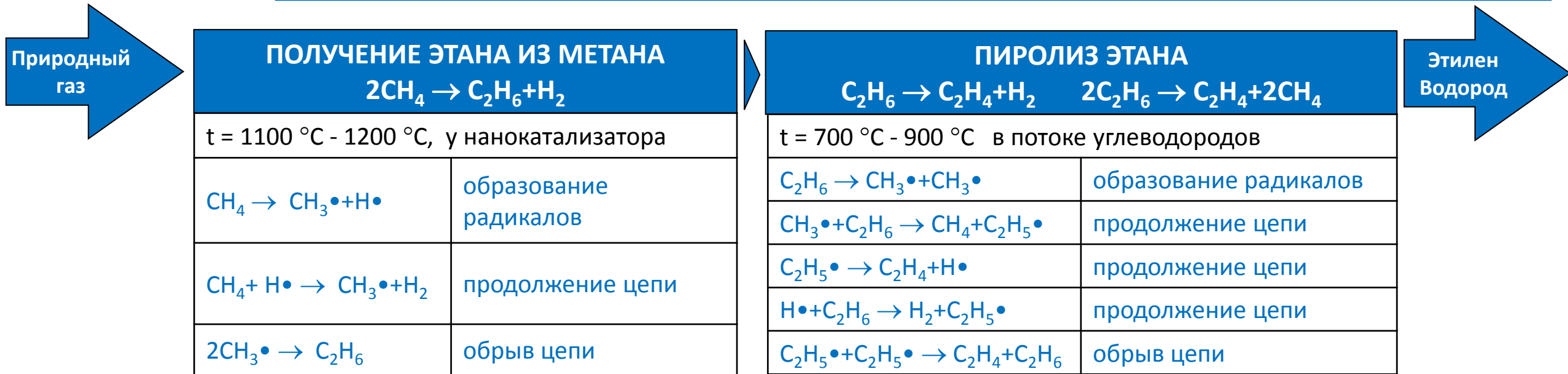
Химическое превращение метана в этилен идёт через стадию образования этана:  $2\text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2$

Далее этан превращается в этилен:  $\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$

Для «активации» молекулы метана и достижения его высоких конверсий в этан необходимы температуры выше 1100-1200°C. Однако при этих температурах активно протекают дальнейшие реакции превращения этана в углерод, ацетилен и бензол. В тоже время при температурах пиролиза этана в этилен (700-900°C) конверсия метана крайне низка.

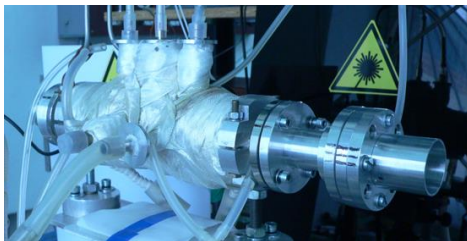


# Химизм процесса и основная идея разработки



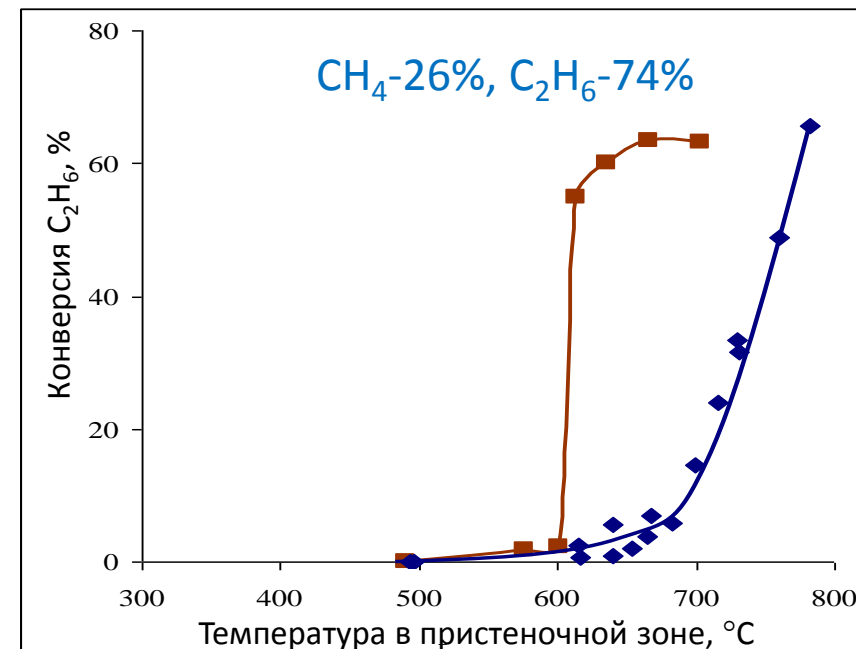
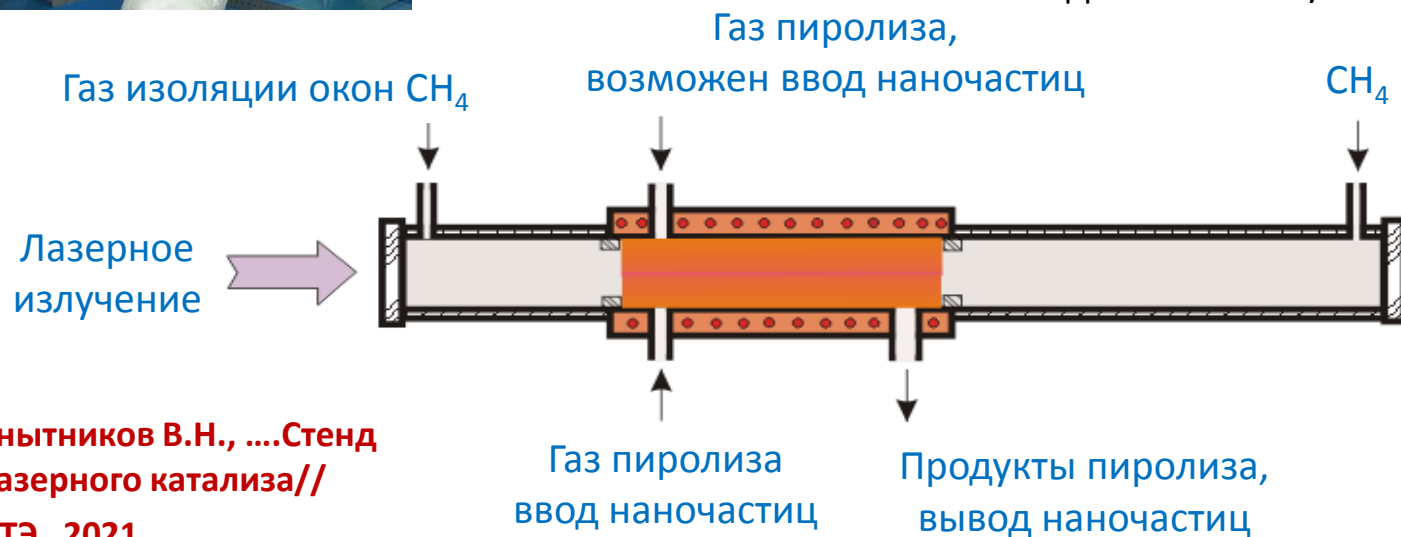
- Каталитические наночастицы нагреты излучением  $\text{CO}_2$ -лазера в окружающем газе пониженной температуры. Метан активируется на горячих наночастицах с образованием атомов водорода
- Образующийся этилен эффективно поглощает излучение  $\text{CO}_2$ -лазера, что создает локализованные высокотемпературные зоны непосредственно в газовом потоке с образованием новых радикалов
- Создание высокотемпературной зоны генерации радикалов в потоке позволяет управлять радикальными цепными реакциями, включая их эффективную остановку на микросекундных временах

# Лабораторная установка и результаты экспериментов (без использования катализатора)



Параметры лабораторного реактора:

- длина – 350 мм
- длина реакционной зоны - 70 мм
- диаметр – 21 мм
- толщина стенки – 2 мм
- Расход газа - 8.6 л/час



- - при использовании лазерного излучения (мощность 30 Вт, диаметр пучка – 0,3 см)
- ◆ - без использования лазерного излучения

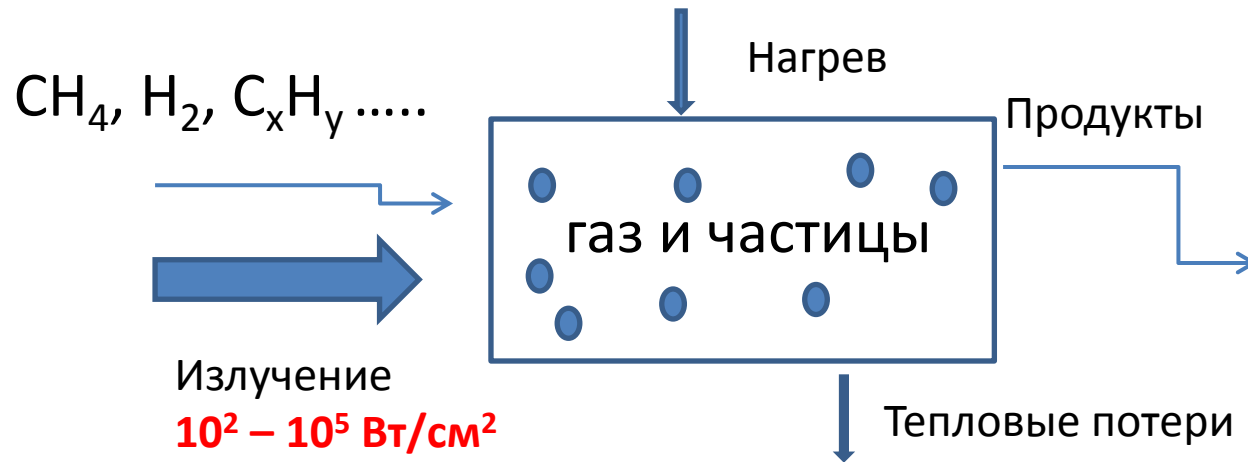
Masyuk N., .... // Journal of Analytical and Applied Pyrolysis. 2018.

Снытников В.Н., ....Стенд лазерного катализа// ПТЭ, 2021.

Использование лазерного излучения позволяет добиться сравнимой степени конверсии этана при значительно более низких (на 100-150°C) температурах в пристеночной области реактора



## Реакционная среда



Задача – численная модель  
реакционного двухфазного  
потока с лазерным излучением

Давление 0.5 – 2 атм

Метан

Наночастицы Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> , Fe /SiO<sub>2</sub> , ....

Диаметр наночастиц порядка 10 нм

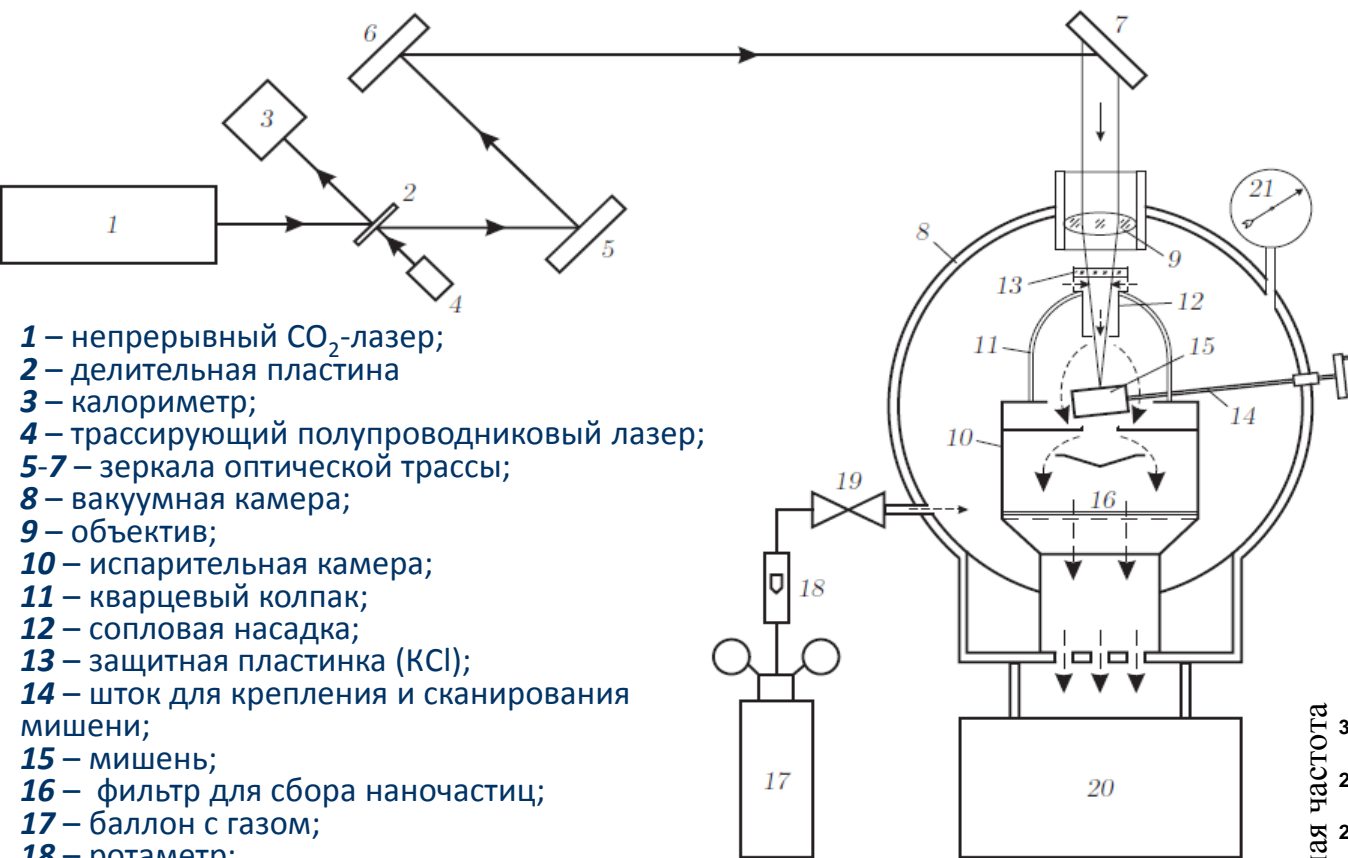
Число частиц менее 10<sup>20</sup> в м<sup>3</sup>

Скорость дозвуковая, в экспериментальном реакторе до 20 см/сек

в пилотных реакторах до 100 м/сек

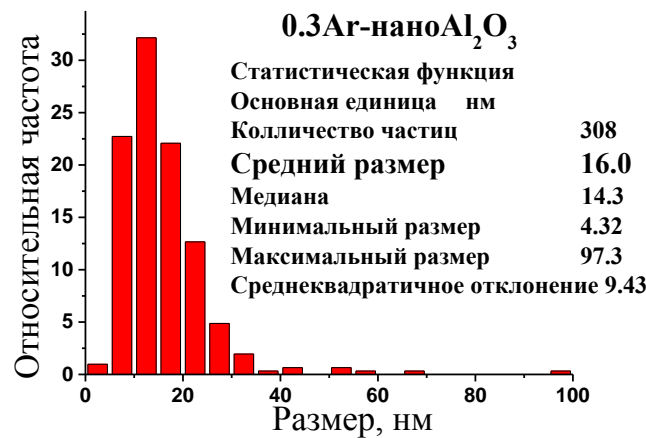
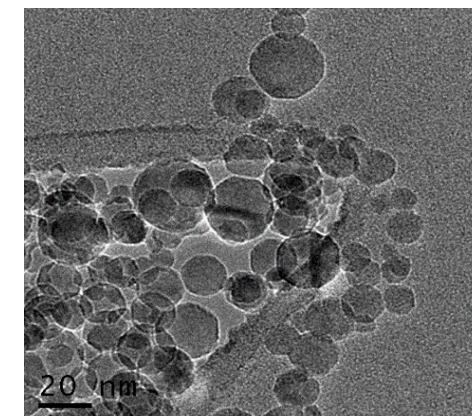
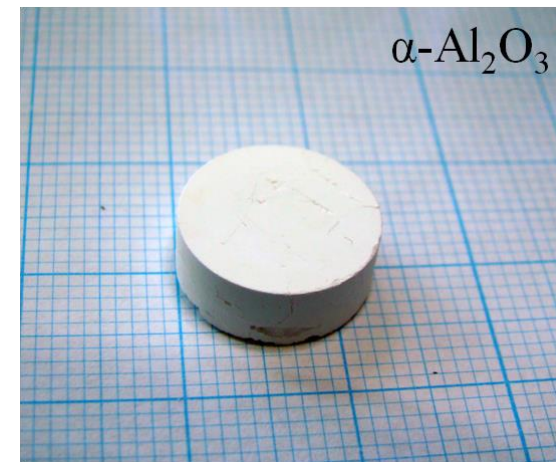
Продукты – водород, углеводороды, ароматические соединения, ....

# Установка для получения наночастиц катализатора



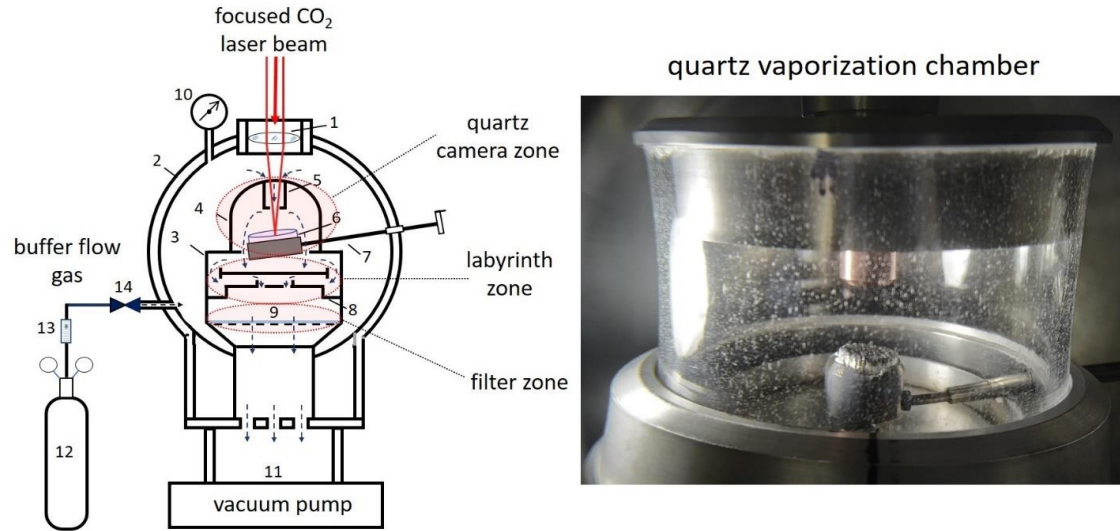
- 1 – непрерывный CO<sub>2</sub>-лазер;
  - 2 – делительная пластина
  - 3 – калориметр;
  - 4 – трассирующий полупроводниковый лазер;
  - 5-7 – зеркала оптической трассы;
  - 8 – вакуумная камера;
  - 9 – объектив;
  - 10 – испарительная камера;
  - 11 – кварцевый колпак;
  - 12 – сопловая насадка;
  - 13 – защитная пластинка (KCl);
  - 14 – шток для крепления и сканирования мишени;
  - 15 – мишень;
  - 16 – фильтр для сбора наночастиц;
  - 17 – баллон с газом;
  - 18 – ротаметр;
  - 19 – вентиль;
  - 20 – система прокачки газа;
  - 21 – вакуумметр.
- Сплошные стрелки – направление распространения излучения лазера, штриховые – направление движения потока газа

Условия испарения, газ и давление	d <sub>сред.</sub> , НМ
He, P= 0,034 атм.	3-4
He, P= 0,1 атм.	6
Ar, P= 0,1 атм.	15
<b>Ar, P= 0,3 атм.</b>	<b>16</b>
He, P= 0,9 атм.	21

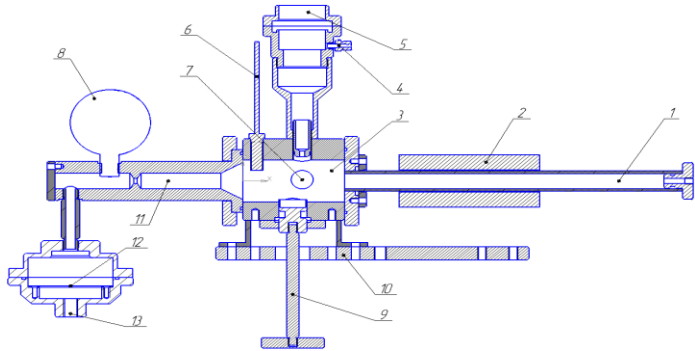


Baronskiy,.....  
Kostyukov A.,... 2018-2023

# Численные модели лазерного синтеза каталитических наночастиц

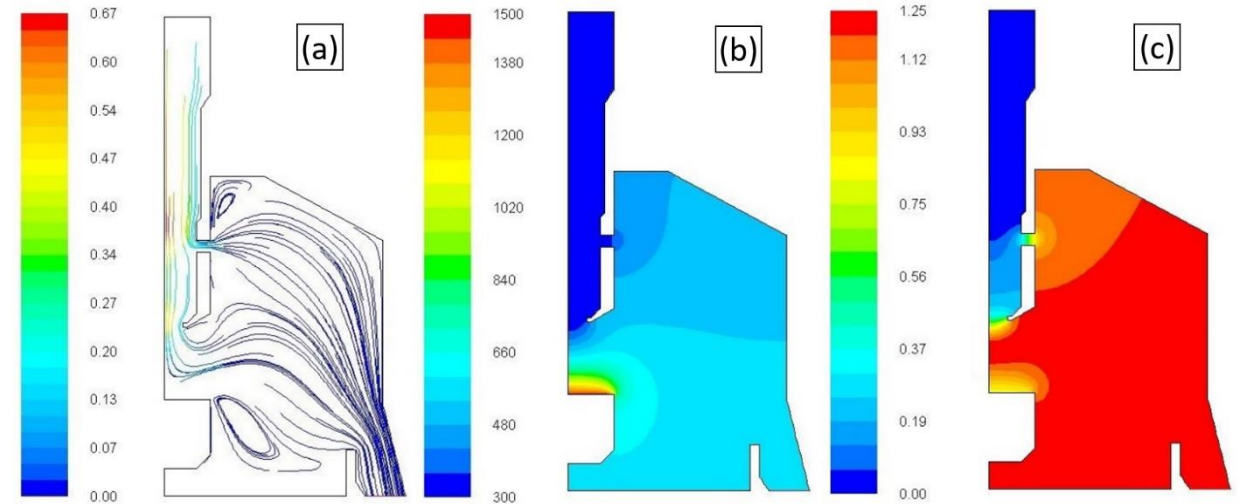


Экспериментальная установка,  
созданная в ИК СО РАН в начале 2000-х годов



Новый реактор

## ANSYS Fluent, ССКЦ СО РАН

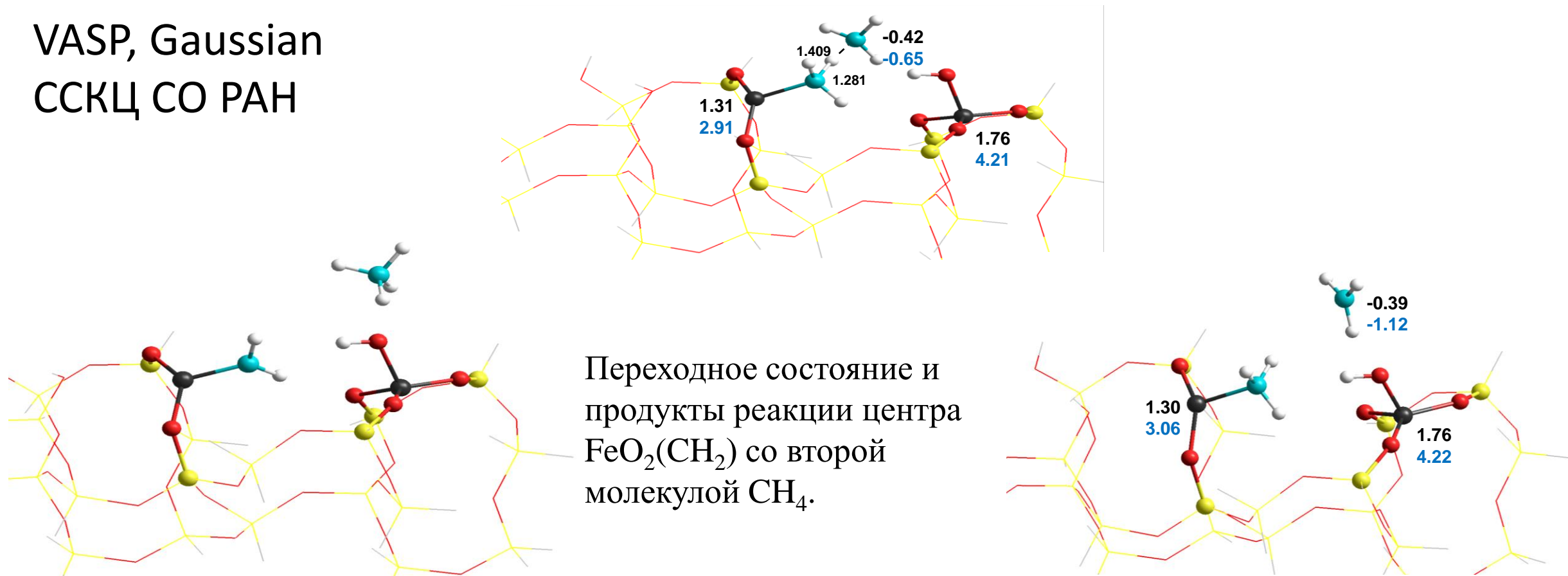


**a**-линии тока скорости (м/с), **b**-температура (К),  
**c**-концентрация Ar (мол/м<sup>3</sup>).

Костюков А.И., Маркелова Т.В., .... Готовиться в печать



VASP, Gaussian  
ССКЦ СО РАН



Зильберберг И.Л., Шубин А.А., Ковальский В.Ю. и др.

Kovalskii V.Y., ....//Molecular Catalysis. 2022

# Химические реакции

№	Стадии¶	Еа, ¶ кДж/моль	А, сек <sup>-1</sup> или ¶ см <sup>3</sup> /(молек·сек)
1	$C_2H_6 \rightarrow \cdot CH_3 + \cdot CH_3$	366	$2.4 \times 10^{16}$
2	$CH_3(s) + \cdot CH_3(s) \rightarrow C_2H_6$	5.9	$2.34 \times 10^{-10}$
2а	$2f$ $CH_3 + \cdot C_2H_6 \rightarrow \cdot CH_4 + C_2H_5$	50.24	$5.41 \times 10^{-12}$
2б	$2b$ $CH_4 + \cdot C_2H_5 \rightarrow \cdot CH_3 + C_2H_6$	90	$3.5 \times 10^{-11}$
3а	$3f$ $C_2H_5 \rightarrow \cdot C_2H_4 + H$	166	$2.0 \times 10^{13}$
3б	$3b$ $C_2H_4 + H \rightarrow \cdot C_2H_5$	6.3	$1.66 \times 10^{-11}$
4а	$4f$ $H + \cdot C_2H_6 \rightarrow H_2 + \cdot C_2H_5$	40.16	$1.66 \times 10^{-10}$
4б	$4b$ $H_2 + \cdot C_2H_5 \rightarrow H + \cdot C_2H_6$	96.45	$6.61 \times 10^{-11}$
5а	$5f$ $CH_3 + \cdot C_2H_4 \rightarrow C_3H_7$	32.26	$5.5 \times 10^{-13}$
5б	$5b$ $C_3H_7 \rightarrow \cdot CH_3 + \cdot C_2H_4$	139	$3.0 \times 10^{14}$
6а	$6f$ $C_2H_5 + \cdot C_2H_5 \rightarrow \cdot C_2H_4 + C_2H_6$	3.34	$2.74 \times 10^{-11}$
7а	$7f$ $C_3H_7 + \cdot C_2H_4 \rightarrow \cdot C_2H_5 + C_3H_6$	27.6	$4.4 \times 10^{-14}$
8а	$8f$ $CH_3 + \cdot C_2H_4 \rightarrow \cdot CH_4 + C_2H_3$	46.56	$6.91 \times 10^{-12}$
8б	$8b$ $CH_4 + \cdot C_2H_3 \rightarrow \cdot CH_3 + C_2H_4$	25.94	$1.48 \times 10^{-13}$
9а	$9a$ $CH_3 + \cdot C_2H_3 \rightarrow \cdot CH_4 + C_2H_2$	3.2	$1.5 \times 10^{-11}$
10а	$10a$ $C_2H_3 + H \rightarrow \cdot C_2H_2 + H_2$	0	$2.0 \times 10^{-11}$
11а	$11f$ $CH_4 + H \rightarrow \cdot CH_3 + H_2$	49.89	$1.26 \times 10^{-10}$
11б	$11b$ $CH_3 + H_2 \rightarrow \cdot CH_4 + H$	51.05	$5.48 \times 10^{-12}$
12а	$12f$ $CH_3 + \cdot CH_3 \rightarrow C_2H_5 + H$	111	$1.33 \times 10^{-9}$

12б	$12b$ $C_2H_5 + H \rightarrow \cdot CH_3 + \cdot CH_3$	3.64	$1.79 \times 10^{-10}$
13а	$13f$ $C_2H_4 + H \rightarrow \cdot C_2H_3 + H_2$	62.36	$9.0 \times 10^{-10}$
13б	$13b$ $C_2H_3 + H_2 \rightarrow \cdot C_2H_4 + H$	34.75	$1.61 \times 10^{-13}$
14а	$14f$ $CH_4 + Fe(0) \rightarrow \cdot CH_3(s) + FeH$	63	$2.8 \times 10^{-8} \times T_g^{0.5}$
14б	$14b$ $CH_3 + H \rightarrow \cdot CH_4$	1.15	$3.2 \times 10^{-10}$
15а	$15f$ $C_2H_3 \rightarrow \cdot C_2H_2 + H$	186	$6.93 \times 10^{12}$
15б	$15b$ $C_2H_2 + H \rightarrow \cdot C_2H_3$	10.1	$9.13 \times 10^{-12}$
16а	$16f$ $C_2H_2 + \cdot CH_3 \rightarrow \cdot C_3H_4 + H$	32.03	$5.6 \times 10^{-13}$
16б	$16b$ $C_3H_4 + H \rightarrow \cdot C_2H_2 + \cdot CH_3$	16.74	$8.3 \times 10^{-11}$
17а	$17a$ $C_3H_4 + H \rightarrow \cdot C_3H_3 + H_2$	18.87	$1.2 \times 10^{-10}$
18а	$18a$ $C_3H_4 + \cdot C_3H_3 \rightarrow C_6H_6 + H$	50.21	$1.16 \times 10^{-12}$
19а	$19f$ $C_6H_6 + \cdot CH_3 \rightarrow \cdot CH_4 + C_6H_5$	80.9	$4.35 \times 10^{-11}$
19б	$19b$ $CH_4 + \cdot C_6H_5 \rightarrow \cdot C_6H_6 + \cdot CH_3$	36	$3.32 \times 10^{-12}$
20а	$20a$ $C_3H_3 + \cdot C_3H_3 \rightarrow C_6H_6$	48	$1.47 \times 10^{-10}$
21а	$21a$ $FeH + CH_4 \rightarrow \cdot FeH_2 + \cdot CH_3(s)$	209	$2.8 \times 10^{-8} \times T_g^{0.5}$
22а	$22a$ $FeH_2 \rightarrow Fe(0) + H_2$	138	$1.7 \times 10^{-11}$
23а	$23a$ $FeH_2 \rightarrow FeH + H$	213	$1.7 \times 10^{-11}$

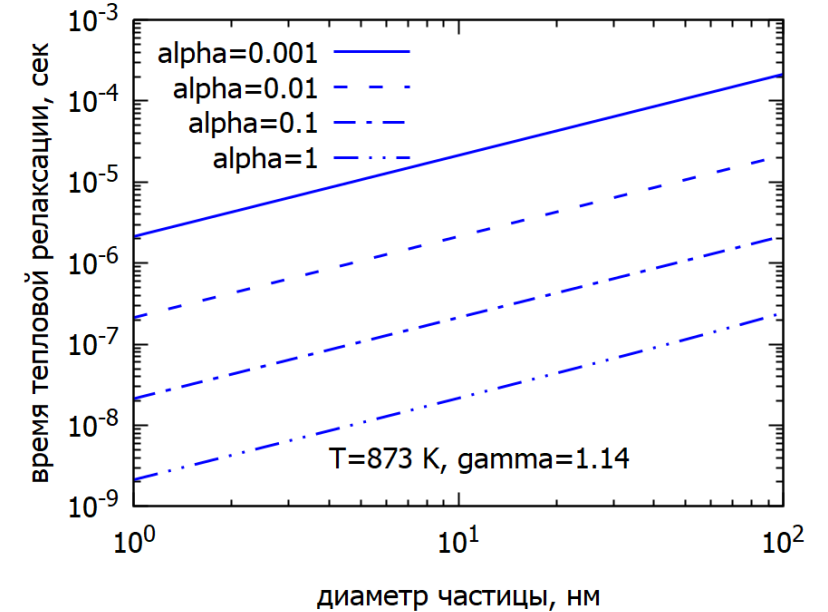
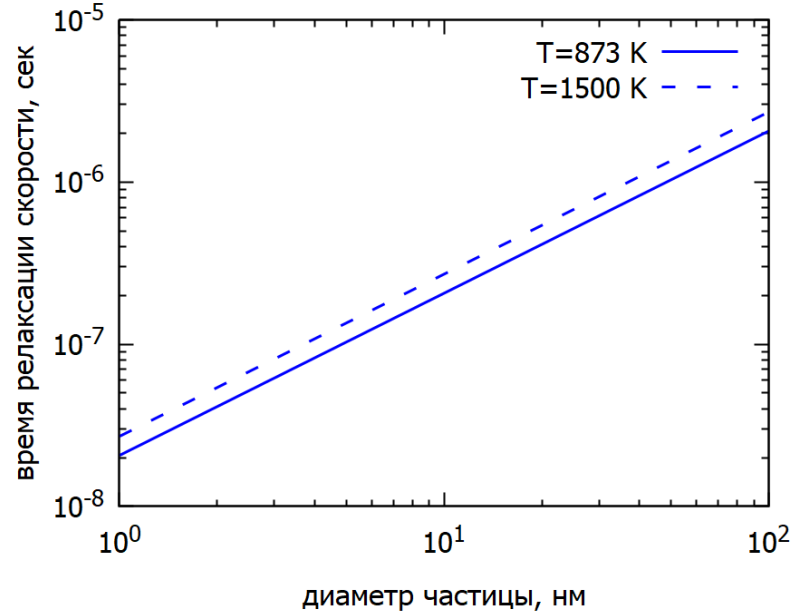
¶

Лашина Е.А.,... // ХИУР, 2023

# Времена релаксации между газом и частицами

Время скоростной релаксации

$$t_i = \frac{s_i \rho_s}{c_s \rho_g} = \frac{s_i \rho_s c_s}{p}$$



Время тепловой релаксации

$$\zeta_i = \frac{m_i C_{DV} (T_i - T_g)}{q_{conv}} = \frac{8m_i C_{DV} (\gamma - 1) T_g}{\alpha \pi s_i^2 c_t (\gamma + 1)}$$

Время скоростной (левая панель) и тепловой (правая панель) релаксации сферических частиц оксида алюминия в метане при атмосферном давлении. Времена скоростной релаксации приведены для температуры метана 850 К и 1500 К. Времена тепловой релаксации приведены для разных коэффициентов тепловой аккомодации.



# Математическая модель двухфазной реакционной среды с лазерным излучением

$$\frac{\partial \rho_g Y_m}{\partial t} + \nabla(\rho_g Y_m \vec{v}) = -\nabla \vec{J}_m + R_m, m = 1, \dots, M, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla(\rho_i \vec{v}) = 0, i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p_d + \nabla \bar{\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) + \nabla \left( \left( \rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) \vec{v} \right) = \quad (4)$$

$$-\nabla \vec{q} + \left( n_g \alpha + \sum_i n_i \alpha_i \right) F - \sum_i 4\pi s_i^2 n_i \sigma (T_i^4 - T_g^4),$$

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \left( n_g \alpha + \sum_i n_i \alpha_i \right) F = 0. \quad (5)$$

$$p_g = \rho_g R T_g \sum_m Y_m / M_{wm}, \quad \sum_m Y_m = 1, \sum_m R_m = 0, \sum_m \vec{J}_m = 0. \quad R_m = M_{wm} \sum_k v_{mk} w_k.$$

$$h_g(T_g, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T_g), \quad h_m(T_g) = \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{pm}(T_g) dT_g + h_m^0.$$

В. Н. Снытников, Е. Е. Пескова, О. П. Стояновская Модель двухтемпературной среды газ — твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Математическое моделирование, 2023, т. 35, №4, С.24-50





Для определения температуры частиц используем соотношение :

$$\frac{dm_i C_{DV} T_i}{dt} = q_{abs} - q_{rad} - q_{conv} - q_{chem}.$$

Средний по смеси коэффициент диффузии рассчитывается по формуле:

$$D_{m,mix} = \frac{1 - X_m}{\sum_{l \neq m} X_l / D_{lm}}, D_{lm} = 2.68 \cdot 10^{-7} \frac{\sqrt{T_g^3 (M_{wl} + M_{wm}) / 2 M_{wl} M_{wm}}}{p \sigma_{lm}^2 \Omega_d (T_D^*)}.$$

коэффициент поглощения в случае излучения CO2 лазера и этилена в газовой смеси:

Snytnikov V.I.,..... // [Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer](#). 2020.

$$\alpha = \alpha_0 \exp(-E / kT_g) / (1 + F / D).$$

Коэффициент поглощения лазерного излучения фракцией пыли рассчитывается из выражения,  $s_i$  - диаметр наночастицы  $i$  - группы:

$$\alpha_i = \beta_0 \pi s_i^2,$$

$\beta_0$  - безразмерное число для наночастицы по теории Ми

$$\beta_0 = 12 \frac{s_i}{\lambda} \frac{\varepsilon''}{(\varepsilon' + 2)^2 + \varepsilon''^2}.$$



# Схема реакции и кинетические параметры

Скорость протекания первой стадии реакции определяется из выражения:

$$w_1 = k_1 [CH_4],$$

$$k_1 = \alpha_1 \pi s_i^2 \sqrt{\frac{8k_B T_g}{\pi m_{CH_4}}} e^{-E_1/RT_i},$$

$$\alpha_1 = 1 \text{ - константа.}$$

Скорость протекания второй стадии реакции:

$$w_2 = k_2 [C_2H_6],$$

$$k_2 = A_2 e^{-E_2/RT_g}.$$

№	Стадия	$A_i, 1/c$	$E_i,$ кДж/моль
1	$2CH_4 \rightarrow C_2H_6 + H_2$		100.0
2	$C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$	$3.16 \cdot 10^{14}$	284.0

Численный метод, 2D плоский и осесимметричный параллельные коды разработаны

**Пескова Е.Е., .... 2018-2023**



*Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф.*

Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана  
Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т.18. №3. С.98-106.

**Пескова Е.Е.** Диссертация на степень кандидата наук, 2018

*Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф.*

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЛИЗА ПРОПАНА В ПРОТОЧНОМ ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ПОСТОЯННОГО  
ВНЕШНЕГО НАГРЕВА

Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 9. С. 119-130.

*Жалнин Р.В., Масыгин В.Ф., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф.*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОЗВУКОВЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ НА НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ  
Инженерные технологии и системы. 2020. Т. 30. № 1. С. 162-175.

**E E Peskova** Numerical modeling of subsonic axisymmetric reacting gas flows Journal of Physics: Conference Series 2057 (2021) 012071

**Пескова Е.Е.** Parallel algorithm for a two-phase gas-solid particle model with chemical reactions and laser radiation  
ПАВТ-2023 (Полная статья)



# Математическая модель двухфазной реакционной среды с лазерным излучением

$$\frac{\partial \rho_g Y_m}{\partial t} + \nabla(\rho_g Y_m \vec{v}) = -\nabla \vec{J}_m + R_m, m = 1, \dots, M, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla(\rho_i \vec{v}) = 0, i = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p_d + \nabla \bar{\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) + \nabla \left( \left( \rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) \vec{v} \right) = \quad (4)$$

$$-\nabla \vec{q} + \left( n_g \alpha + \sum_i n_i \alpha_i \right) F - \sum_i 4\pi s_i^2 n_i \sigma (T_i^4 - T_g^4),$$

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \left( n_g \alpha + \sum_i n_i \alpha_i \right) F = 0. \quad (5)$$

$$p_g = \rho_g R T_g \sum_m Y_m / M_{wm}, \quad \sum_m Y_m = 1, \sum_m R_m = 0, \sum_m \vec{J}_m = 0. \quad R_m = M_{wm} \sum_k v_{mk} w_k.$$

$$h_g(T_g, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T_g), \quad h_m(T_g) = \int_{T_{ref}}^{T_g} C_{pm}(T_g) dT_g + h_m^0.$$

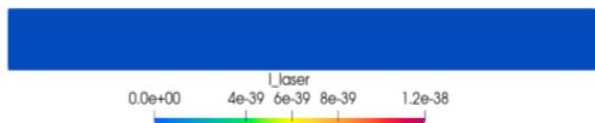
В. Н. Снытников, Е. Е. Пескова, О. П. Стояновская Модель двухтемпературной среды газ — твердые наночастицы с лазерным пиролизом метана // Математическое моделирование, 2023, т. 35, №4, С.24-50





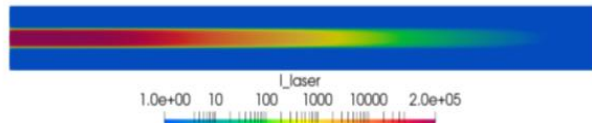
# Лазерный синтез этилена из этана

0 Вт/м<sup>2</sup>



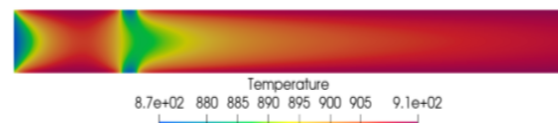
Интенсивность

204 000 Вт/м<sup>2</sup>



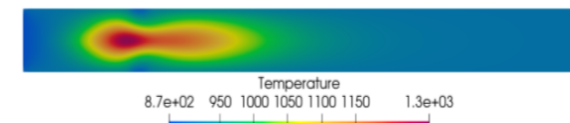
Интенсивность

0 Вт/м<sup>2</sup>

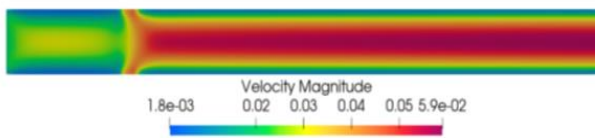


Температура

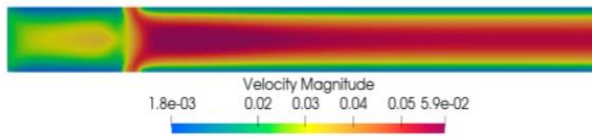
204 000 Вт/м<sup>2</sup>



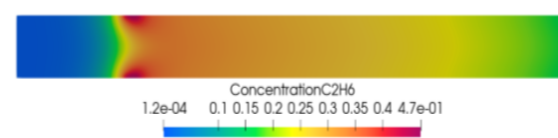
Температура



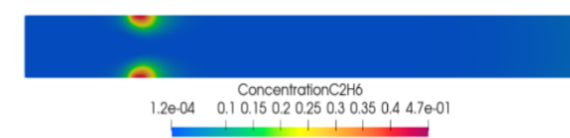
Скорость



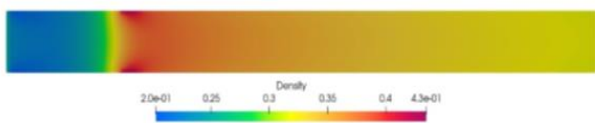
Скорость



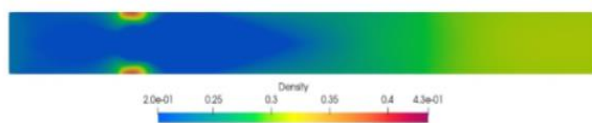
Этан



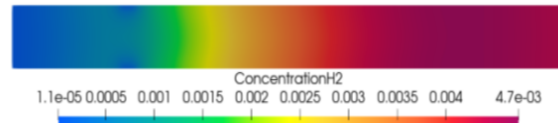
Этан



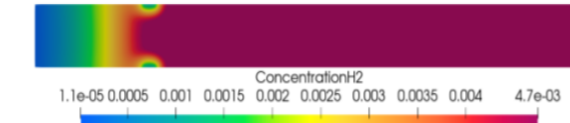
Плотность



Плотность

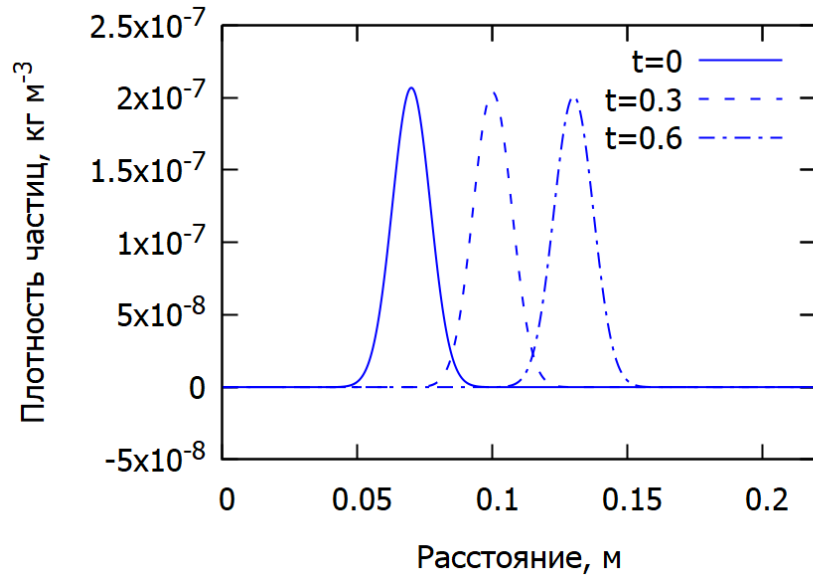


Водород

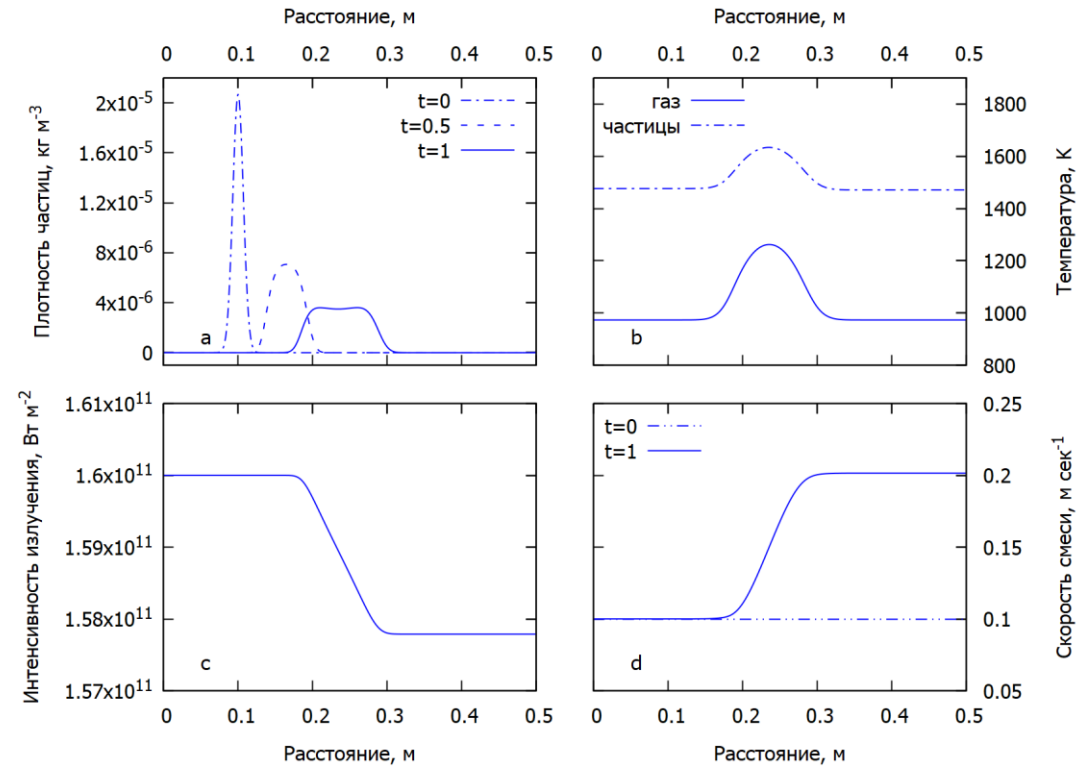


Водород

# Динамика частиц в газе без химических реакций

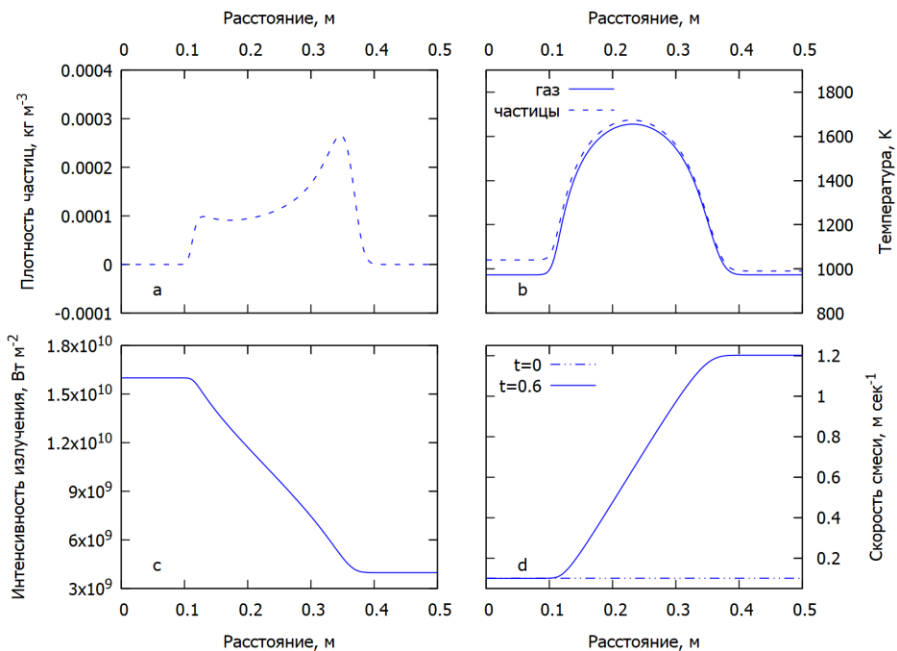


Движение сгустка частиц в среде с однородной скоростью 0.1 м/с, интенсивностью излучения  $8 \cdot 10^{10}$  Вт/м<sup>2</sup>, размер частиц  $s_i = 5 \cdot 10^{-9}$  м, низкая концентрация частиц  $n_{i,max} = 10^{14}$  м<sup>-3</sup>.

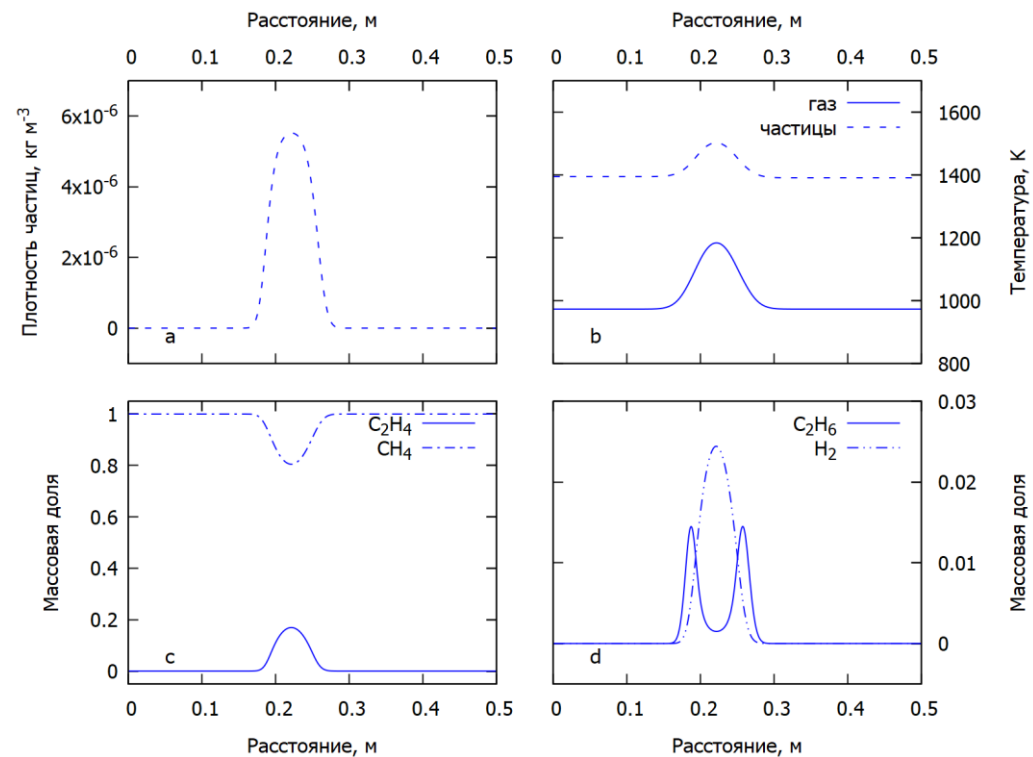


**Двухтемпературный режим без химических реакций.** Распределение плотности частиц (панель a), температуры частиц и газа (панель b), интенсивности лазерного излучения (панель c), скорости смеси (панель d) вдоль направления потока. Расчет с умеренным содержанием частиц  $n_{i,max} = 10^{16}$  м<sup>-3</sup> и высокой интенсивностью излучения  $1.6 \cdot 10^{11}$  Вт/м<sup>2</sup>.

# Динамика частиц в газе с лазерным излучением



Однотемпературный режим **без химических реакций**. Распределение плотности частиц (панель a), температуры частиц и газа (панель b), интенсивности лазерного излучения (панель c), скорости смеси (панель d) вдоль направления потока. Расчет с повышенным содержанием частиц  $n_{i,max} = 10^{18} \text{ м}^{-3}$  и низкой интенсивностью излучения  $1.6 \cdot 10^{10} \text{ Вт/м}^2$ .



Двухтемпературный режим **с химическими реакциями**. Распределение плотности частиц (панель a), температуры частиц и газа (панель b), компонентов газовой смеси (панели c,d) вдоль направления потока. Расчет с умеренным содержанием частиц  $n_{i,max} = 10^{16} \text{ м}^{-3}$  и высокой интенсивностью излучения  $1.6 \cdot 10^{11} \text{ Вт/м}^2$ .



## Выводы

Создана математическая и численная односкоростная модель для исследования двухфазной дозвуковой среды из многокомпонентного газа и наночастиц в поле лазерного излучения. Модель учитывает нагрев-охлаждение компонент среды лазерным излучением, детальные процессы теплообмена между газом и частицами в свободно-молекулярном режиме, тепловые эффекты химических реакций по кинетическим уравнениям, отвечающим заданной схеме химических реакций.

Математическая модель предсказывает существование неравновесной двухтемпературной среды из наночастиц и многокомпонентного газа с химическими реакциями в газе и на поверхности наночастиц, которые поглощают лазерное излучение. Температура наночастиц может отличаться от температуры газа на сотни градусов несмотря на интенсивный теплообмен между газом и наночастицами. Повышенные температуры наночастиц стимулируют гетерогенные химические реакции на их поверхности. Тем самым, эти реакции могут управляться поглощаемым лазерным излучением посредством изменения температуры частиц. Это открывает возможности эффективного проведения каталитических синтезов подбором нужных каталитически активных материалов для наночастиц и их дизайна, включая размер частиц.

Существование режима с двухтемпературной средой и получаемые решения сильно зависят от многих параметров задачи, которые нелинейно связаны между собой. В частности, к ним относятся коэффициент аккомодации, радиус и концентрация наночастиц, интенсивность лазерного излучения, начальная температура газа.

Физико-химическая модель расширена включением детального механизма гетерогенно-гомогенного катализа дегидрирования предельных углеводородов. Ближайшее развитие модели связано с учетом пространственных эффектов, в частности, взаимодействия среды со стенками, пространственной диффузии по осесимметричной модели.

**БЛАГОДАРЮ ЗА ВНИМАНИЕ!**

**Приглашаем к сотрудничеству, а студентов и аспирантов для подготовки диссертаций!**