

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТОЧНЫХ МИКРОРЕАКТОРОВ

Шишанов М.В., Кук Х.Г., Большаков И.А., Досов К.А., Морозов Н.В., Яшунин Д.В.

Шишанов Михаил Валентинович (ORCID 0000-0003-2861-5878), Кук Христофор Герман (ORCID 0009-0005-7115-6760), Большаков Иван Андреевич (ORCID 0009-0002-3600-2123), Досов Кирилл Алексеевич (ORCID 0009-0000-7243-691X), Морозов Никита Вячеславович (ORCID 0009-0001-4045-5355), Яшунин Дмитрий Владимирович (ORCID 0009-0002-5741-3626)

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,

г. Москва, Россия. 125047, Московская область, г. Москва, Миусская площадь, 9.

E-mail: kuk.khristofor@inbox.ru, FlowL4b@yandex.ru

Статья посвящена исследованию моделирования процессов микрофлюидики и геометрических параметров моделей в области проточных микрореакторов. Данный тип реакторов основан на проточной химии, которая позволяет значительно увеличить выход получаемого продукта, а также снизить экономические затраты на производстве. Микропроточные реакторы рассматриваемого формата используются, прежде всего, в специальной химии и позволяют синтезировать уникальные по своим свойствам вещества, производство которых является универсальным и особенно опасным в емкостном исполнении. Приведены и прокомментированы некоторые результаты моделирования, демонстрирующие работу в инженерно-конструкторских программах CFD (Computational Fluid Dynamics modeling), CAD (Computer Aided Design) и CAE (Computer Aided Engineering), таких как «SolidWorks», «ANSYS Fluent», «Abaqus». Предложен метод по идентификации лидер-модели, обладающей ключевыми параметрами, наиболее приближенными к требуемым. Результаты данных расчётов подлежат тщательному анализу, на основании которого можно сделать вывод о физичности конкретной модели. Успешная модель подлежит воплощению в металл, доработке под требования заказчика и применению на реальном производстве. Будущие исследования нашей команды будут направлены на разработку микрореакторов других форматов, а также на изобретение и моделирование принципиально новых форм каналов для протекания химической реакции.

Ключевые слова: проточный реактор, микрореактор, проточная химия, модульный реактор, пластинчатый реактор, микрореакция, микросмесители, реакторы и теплообменники, вычислительная гидродинамика.

SIMULATION OF FLOW MICROREACTORS

Shishanov M.V., Cook Ch.G., Bolshakov I.A., Dosov K.A., Morozov N.V., Yashunin D.V.

Shishanov Mikhail Valentinovich (ORCID 0000-0003-2861-5878), Cook Christopher German (ORCID 0009-0005-7115-6760), Bolshakov Ivan Andreevich (ORCID 0009-0002-3600-2123), Dosov Kirill Alekseevich (ORCID 0009-0000-7243-691X), Morozov Nikita Vyacheslavovich (ORCID 0009-0001-4045-5355), Yashunin Dmirty Vladimirovich (ORCID 0009-0002-5741-3626)

Russian University of Chemical Technology DI. Mendeleev,

Moscow, Russia. 125047, Moscow region, Moscow, Miusskaya square, 9.

E-mail: kuk.khristofor@inbox.ru, FlowL4b@yandex.ru

The article is devoted to the study of modeling of microfluidics processes and geometric parameters of models in the field of flow microreactors. This type of reactor is based on flow chemistry, which can significantly increase the yield of the resulting product, as well as reduce the economic costs of production. Micro-flow reactors of the format under consideration are used primarily in special chemistry and allow synthesizing substances unique in their properties, the production of which is universal and especially dangerous in capacitive design. Some modeling results are presented and commented on, demonstrating work in CFD (Computational Fluid Dynamics modeling), CAD (Computer Aided Design) and CAE (Computer Aided Engineering) engineering programs, such as

"SolidWorks", "ANSYS Fluent", "Abaqus". A method for identifying a leader model with key parameters that are closest to the required ones is proposed. The results of these calculations are subject to a thorough analysis, on the basis of which it is possible to conclude about the physicality of a particular model. A successful model is to be embodied in metal, modified to meet customer requirements and used in real production. The future research of our team will be aimed at the development of microreactors of other formats, as well as at the invention and modeling of fundamentally new forms of channels for the flow of a chemical reaction.

Keywords: flow reactor, microreactor, flow chemistry, modular reactor, plate reactor, microreaction, microstructured mixers, reactors and heat exchangers, computational fluid dynamics.

АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОБЛЕМЫ

Технология проточных микрореакторов получила широкое распространение в малотоннажной и специальной химии [1]. Термин «микрореактор» используется в данной работе как некое устройство для проведения типовых химических реакций, структурные элементы которого могут достигать микрометровых размеров.

Ключевым преимуществом технологии перед классическими подходами (ёмкостной реактор, луп-реактор, проточный реактор) является повышенное отношение площади поверхности реактора к реакционному объёму. Как следствие, повышенная массо- и теплопередача, что приводит к повышению выхода с повышенной селективностью [2]. Смешивание субстратов и реагентов можно проводить в строго контролируемых условиях, что также позволяет улучшить результаты синтеза. Отдельно стоит упомянуть производство опасных промежуточных продуктов.

Поскольку используются лишь небольшие количества реагентов (объём реакторного пространства составляет от 1 до 50 мл.), которые реагируют в закрытой системе, технология микрореакторов позволяет обеспечить безопасное производство [3]. Не все реакции выигрывают от технологии микрореакторов. Большинство реакций с участием твердых веществ, как правило, трудно проводить в микрореакторах, хотя даже синтез твердых веществ был описан с использованием микроструктурированных устройств [4].

Микрореактора изготавливают на металлической, керамической основе, из стекла и кремния [5]. Стекло больше подходит для «быстрых реакций» в гомогенной среде, а также для фотохимических превращений [6]. Для реакций, проводимых при нагревании и высоком избыточном давлении, стекло и кремний не подходят, только микрореактора на металлической (нагрев и давление) и керамической основе (нагрев) [7].

Существует несколько конструкторских подходов к проектированию микрореакторов на металлической основе (нагрев и давление): пластинчато-модульный и «кожухотрубный» [8].

Пластинчато-модульный (рис.1) представляет собой несколько пластин (верхняя и нижняя изоляционные пластины, теплообменная пластина, реакционная пластина), соединённых между собой крепёжными элементами [9].

Кожухотрубный микрореактор - более простая схема, в рамках которой реакционная трубка находится в теплообменном кожухе [10]. Преимущество пластинчато-модульного типа конструкций состоит в возможности с помощью модульного подхода менять реакционную пластину с разными профилями каналов. Геометрия профиля канала в микрореакторах определяет эффективность проводимого процесса.

Микрометровые размеры диаметра канала не позволяют добиваться турбулентного гидродинамического режима, в связи с чем диффузия является движущей силой перемешивания 2-х фаз [11]. Изменение геометрии канала, как реакционной пластины, так и теплообменной, влияет на параметры процесса: температура по длине канала, давление, перемешивание 2-х фаз.

Цель данной работы – методика применения инженерно-конструкторских программ для достижения оптимальных параметров оборудования при проектировании проточных микрореакторов для проведения химических реакций при нагревании и высоком избыточном давлении для однофазных систем «жидкость-жидкость» модульного типа. Также целью проводимых исследований является сравнение 5 различных геометрий реакционных пластин для процесса смешения потоков этанола и воды и выбор наиболее эффективного. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В рамках исследования выполнялись следующие задачи:

Создать твердотельную 3D-модель исследуемого пластинчато-модульного микрореактора.

Создать несколько итераций различных геометрий каналов для реакционных пластин. Для выбранной геометрии реакционной пластины необходимо провести CFD-моделирование (от англ. computational fluid dynamics) смешения системы этанол-вода, для вычисления характеристик

поточковых процессов (температура, давление, распределение концентрации смешивающих фаз по сечению). Для исследуемого формата реактора геометрия каналов является критически важным параметром, так как перемешивание компонентов происходит за счёт диффузии и точность её моделирования важна вплоть до 1 микрометра.

Для теплообменной пластины необходимо смоделировать геометрию канала, которая позволит обеспечить изотерму на всём протяжении канала (максимальное допустимое отклонение температуры не более $\pm 1^\circ\text{C}$).

Также необходимо произвести прочностные расчёты конструкции в целом. Все элементы пластинчато-модульного микрореактора соединены между собой элементами крепления. Давление, которое развивается в канале, может достигать 100 атм. Для создания 3D-модели пластинчато-модульного микрореактора, геометрии каналов, использовалась программа твердотельного моделирования SolidWorks. Программный продукт SolidWorks является самым распространённым инструментом, используемым для автоматизированного проектирования (САПР) и 3D моделирования [12]. Для проведения CFD-расчёта в реакционной и теплообменной пластине в работе был использован программный продукт Ansys Fluent. Ansys Fluent – это флагманский продукт Ansys в области CFD, набор мощных решателей и пре-/постпроцессоров для моделирования течений жидкостей и газов с учётом турбулентности, межфазного взаимодействия, химических реакций, горения и виброакустических эффектов [13]. Данная программа лучше всего подходит для про-

ведения подобных расчётов ввиду её расширенных возможностей и наличия большого количества библиотек. В данной работе использовался модуль CFX, с помощью которого проводятся гидродинамические и газо-жидкостные расчёты.

Программный комплекс позволяет для проведения CFD-расчёта: задать геометрию каналов, выбрать режим однофазный или многофазный (учитывает смешение), выбрать вещества (среда «этанол-вода»), гидродинамический режим (ламинарный режим, численное решение уравнения Навье-Стокса (см. уравнение 1), с уравнением неразрывности), задать сетку (область конечно-элементных), произвести расчёт и получить профиль температуры, давления, концентраций, вязкости, скорости по длине и ширине канала, задать граничные и начальные условия [14].

Для численного решения поставленных задач используют также уравнение неразрывности (см. уравнение 2)

$$\rho(u * \nabla)u = \nabla * [-p * I + K]F \quad (1)$$

$$\rho \nabla * (u) = 0 \quad (2)$$

$$K = \mu(\nabla u + (\nabla u)^T) \quad (3)$$

где ρ – плотность жидкости, u – скорость, ∇ – оператор Набла, p – давление, оказываемое на частицу, I – единичная матрица, K – коэффициент Пуассона, F – внешние силы, которые мы применяем к жидкости, μ – кинематическая вязкость, T – время. Здесь $(u * \nabla)u$ – перемещение жидкости в пространстве. Для решения совместной задачи CFD-моделирования и теплообмена необходимо численно решить систему уравнений, состоящую из материального и тепловых балансов соответственно [15]:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} C_i + \text{div}(C_i * w) = \sum_{i=1}^p v_{ij} * r_i + \text{div}(D_j * \text{grad}(C_j)) \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^m C_j * Cp_j * \left(\frac{\partial}{\partial \tau} T + w * \text{grad}(T) \right) = \text{div}(\lambda * \text{grad}(T)) + \sum_{i=1}^p (-\Delta H_i) * r_i \quad (5)$$

где C_i, C_j – концентрация i -го и j -го реагента в смеси соответственно, w – корость потока, v_{ij} – стехиометрический коэффициент данного компонента, r_i – скорость химической реакции по компоненту, D_j – коэффициент молекулярной и конвективной диффузии, Cp_j – теплоёмкость j -го реагента, T – температура, λ коэффициент теплопроводности, ΔH_i – тепловой эффект реакции. В уравнениях присутствуют основные операции векторного анализа - grad (градиент), div (дивергенция). Прочностной расчёт необходимо провести как со всеми компонентами по отдельности, так и со сборкой целиком. При расчёте прочности отдельных компонентов необходимо

учесть максимальное давление в канале, исходя из напора, обеспечиваемого в технологической линии насосом. На рис. 1 показана гиперболизированная нежелательная ситуация при воздействии повышенного давления на стенки каналов – возможно появление зазоров между реакторной и теплообменной пластинами, что чревато нарушением герметичности системы и может привести к крайне негативным последствиям вплоть до нанесения серьёзного вреда здоровью человека.

При расчёте всей сборки основной задачей является моделирование и расчёт болтового соединения.

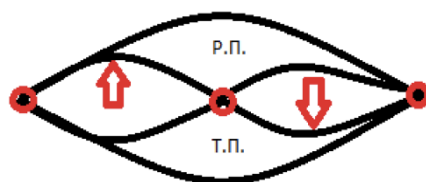


Рис. 1. Нежелательная ситуация при воздействии давления на стенки каналов, где Р.П. – реакторная пластина, Т.П. – теплообменная пластина, а стрелки – направления действия сил давления

Fig. 1. An undesirable situation when pressure is applied to the channel walls, where R.P. - reactor plate, T.P. - heat exchange plate, and arrows - directions of action of pressure forces

Abaqus – программный комплекс мирового уровня в области конечно-элементных прочностных расчетов, с помощью которого можно получать точные и достоверные решения для проведения различных прочностных расчетов. Программа позволяет: задать сетку (методом конечных элементов), задать материал, задать расчет напряженно-деформированного состояния линейно-упругого и гиперупругого материалов (на основе закона Гука) [16].

Важными результатами моделирования являются: временные зависимости в температурно-маркерных точках, результаты энергетического и теплового баланса, сеточная сходимость.

В процессе разработки пластины необходимо промоделировать несколько разных геометрически различающихся миксерных и реакционных каналов, и выбрать лидер-модель. В качестве лидер-модели необходимо выбрать ту модель, параметры которой наиболее соответствуют выбранным критериям. Значения, полученные при расчёте по данным критериям, подлежат тщательному анализу, исходя из их составляющих. Критерий оптимальности определяется, исходя из следующих параметров:

1. Оптимальность и физичность модели характеризуется критерием Рейнольдса, значение которого должно быть менее 2000, так как режим движения жидкости – ламинарный.

2. Эффективность перемешивания должна быть максимальной. В качестве критерия эффективности принят коэффициент эффективности γ (безразмерная величина, приведена к 1), формула которого приведена ниже.

$$\gamma = 1 - \frac{\Delta X}{X_{\text{теор}}}$$

где $X_{\text{теор}}$ – теоретическая массовая концентрация на выходе из миксерной зоны, ΔX – максимальная разность между теоретической и практической массовой концентрацией на выходе из миксерной зоны. Таким образом, при $\gamma=0$, перемешивание отсутствует. Напротив, при $\gamma = 1$ перемешивание считается идеальным.

3. Перепад температур по длине канала между теплоносителем и нагреваемой средой должен быть сведён к минимуму, при этом перепад температур у потока теплоносителя принят 1 °С.

4. Потери давления после прохождения реагентами миксерной зоны должен быть минимальными.

5. Наличие застойных зон по длине реакционного канала должно быть также минимизировано (определяется наличием участков с околонулевыми скоростями по всей длине реакционного канала).

Модель, которая обеспечивает лучшие показатели параметров критерия оптимальности, выбирается лидер-моделью.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Основываясь на основных ограничениях для микрофлюидики (небольшой формат – в нашем случае А6, невозможность достижения турбулентного режима ввиду небольших диаметров каналов – около двух миллиметров), а также на требованиях к модульности реакционной системы и безопасности процесса, была спроектирована твердотельная 3D-модель исследуемого пластинчато-модульного микрореактора. Модель была создана в CAD-системе SolidWorks (рис.1).

Все элементы проектировались так, чтобы обеспечить возможность соосного соединения элементов с учётом модульности. Габариты внутренних элементов корпуса – 148x105 мм, а внешних (днище и крышка реактора) – 180x180 мм. В сборке присутствуют крепёжные элементы: шпильки М16x80 – 4 шт. – благодаря им все элементы конструкции плотно прижимаются друг к другу и болты М8x50 – 6 шт. – выполняют роль направляющих и обеспечивают собираемость реактора.

Реакторная пластина представляет собой пластину с каналами, которые можно поделить на каналы миксерной зоны (зона, предназначенная для непосредственного смешения компонентов) и каналы реакторной зоны, в которой протекает сама реакция уже после интенсивного смешивания компонентов. Пример такой пластины представлен ниже (рис. 2) [17].

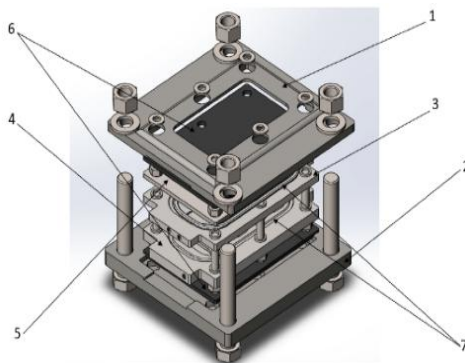


Рис. 2. Модули проточного реактора: 1 – крышка корпуса; 2 – днище корпуса; 3 – реакторная пластина; 4 – теплообменная пластина; 5 – защитная пластина, 6 – теплоизоляционные прокладки,

7 – уплотнительные кольца
Fig. 2. Flow reactor modules: 1 - housing cover; 2 - the bottom of the body; 3 – reactor plate; 4 - heat exchange plate; 5 - protective plate, 6 - heat-insulating gaskets, 7 - sealing rings

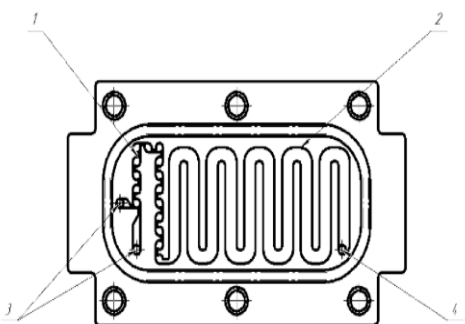


Рис. 3. Реакторная пластина: 1 – миксерная зона; 2 – реакционный канал; 3 – входы исходных компонентов; 4 – выход продуктов

Fig. 3. Reactor plate: 1 - mixing zone; 2 - reaction channel; 3 - inputs of the original components; 4 - output of products

Вид миксерной зоны и длина реакционного канала могут варьироваться в зависимости от типа реакции и количества взаимодействующих фаз.

Созданы и проанализированы 5 различных геометрий реакционных пластин, см. рис. 3. Выбор данных типов геометрий обусловлен следующими параметрами:

Для реакционной пластины важно наличие миксерной зоны, которая позволяет дестабилизировать потоки путём их закручивания и изменения направления движения с последующим совмещением с другими потоками.

Она может быть представлена в виде цилиндрических ячеек, в выступах на дне реакционного канала, представляющих собой различные геометрические формы, а также в виде резких и узких поворотов различного диаметра и форм.

Её геометрические параметры (табл. 1) обуславливаются площадью занимаемой поверхности пластины S_{mix} .

Для реакционной пластины (рис. 4) неотъемлемой частью является наличие реакционной зоны, в которой происходит непосредственно сама химическая реакция. Как показали исследования, лучше всего применять змеевиковый канал, которые позволяет получить наибольший выход.

Длину и количество поворотов данного канала можно варьировать, что особенно важно для реакций со сложной кинетикой. Её геометрические параметры обуславливаются средней длиной пути молекулы L (является значением длины сплайна, проведённого вдоль канала реакционной зоны в его средней части).

Геометрические величины, являющиеся постоянными при данном исследовании – это, прежде всего, габаритные размеры самой пластины (сопоставим с форматом типографской бумаги А6), размеры, необходимые для креплений и модульности пластин, а также диаметр реакционного канала (2 мм).

Таблица 1.

Геометрические параметры исследуемых геометрий каналов
 Table 1. Geometrical parameters of the investigated channel geometries

Пластина	а	б	в	г	д
Площадь миксерной зоны S_{mix} , мм ²	18	308	350,5	149	310
Средняя длина пути молекулы L, мм	101,5	110	150	149,5	125

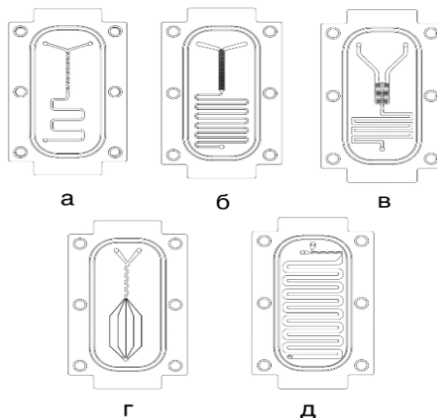


Рис. 4. Варианты исполнения реакционных пластин
 Fig. 4. Reaction plate options

Таблица 2.

Исходные данные для моделирования
 Table 2. Initial data for modeling

Начальные условия	Параметр	Значение
Вход1	Массовый расход воды, кг/с	0,0003
Вход2	Массовый расход этанола, кг/с	0,0003
Вход для теплообмена	Массовый расход воды, кг/с	0,0005
Вход1	Начальная температура, К	300
Вход2	Начальная температура, К	300
Вход для теплообмена	Начальная температура, К	400
Временной интервал	Время моделирования, с	60

Исходные данные для моделирования были следующими (табл. 2):
 Ниже представлены пример расчета для геометрического канала б (рис. 4).

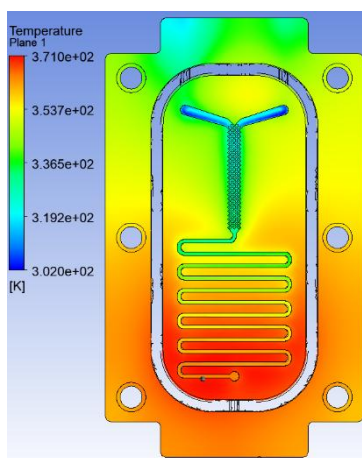


Рис. 5. Распределение температуры в реакционном потоке и в пластине
 Fig. 5. Temperature distribution in the reaction stream and in the plate

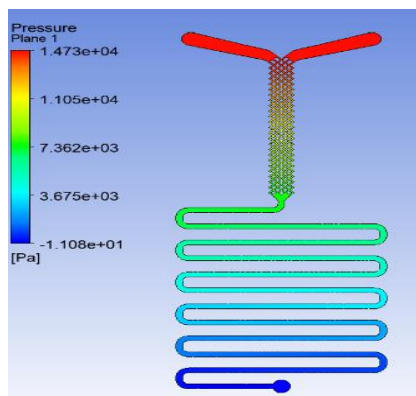


Рис.6. Давление в каналах
Fig. 6. Channel pressure

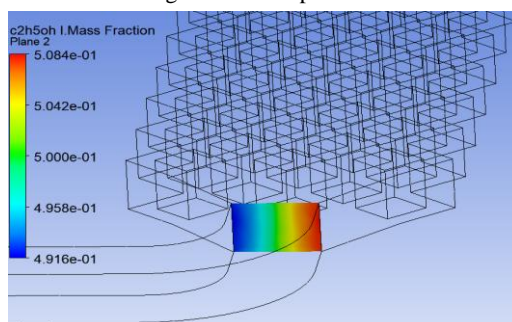


Рис.7. Градиент концентраций реагентов смеси (этанол-вода) на выходе из миксерной зоны (тонкие линии – очертания исследуемой 3D модели, градиент показан на вертикальном сечении канала)
Fig. 7. The concentration gradient of the mixture reagents (ethanol-water) at the outlet of the mixing zone (thin lines are the outlines of the 3D model under study, the gradient is shown on the vertical section of the channel)

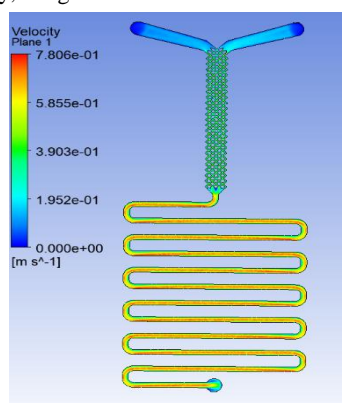


Рис.8. Распределение скоростей в каналах
Fig. 8. Velocity distribution in channels

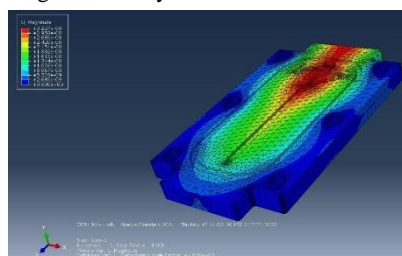


Рис. 9. Испытание теплообменной пластины в CAE ABAQUS, нагружали давлением в 10 МПа все стенки реакционного канала

Fig. 9. Heat transfer plate test in CAE ABAQUS, pressure loaded at 10 MPa all walls of the reaction channel

В результате моделирования установлено, что для начальной конструкции микрофлюидного

реактора проточная часть реактора удовлетворяет требованиям, что позволяет использовать его для проведения реакций в среде жидкость-жидкость. Из рис. 7 видно, что распределение концентраций на выходе из миксерной зоны близко к идеальному (0,4916 для одного из двух компонентов), что подтверждает эффективность смешения исходных компонентов при прохождении через неё. Из рис. 8 видно, что реакция характеризуется ламинарным режимом – скорости не превышают 0,8 м/с, количество застойных зон невелико, что является положительным фактором.

Результаты расчета показывают, что данный вариант исполнения проточных каналов с данной геометрией зоны смешения подходит для выбора в качестве претендента на реализацию в металле. Массовый расход на входе позволяет поток по микроканалам с допустимыми потерями скорости и давления (потери скорости равны 0,39 м/с, перепад давления равен 1485 Па, что показано на рис.6). Несмотря на получение непротиворечивой физической картины потока в целом, из анализа следует, что теплообмен между реакторным и теплообменными потоками в первой итерации

не удовлетворяет требованиям разработки установки – из рис. 5 видно, что происходит значительный нагрев реакторной пластины, сам поток хорошо прогревается, однако нет изотермы по всей длине канала.

Моделирование теплообмена играет немаловажную роль в проектировании микрореактора, так как в такой системе допустимы крайне незначительные отклонения вплоть до $\pm 1^\circ\text{C}$, поэтому данный фактор нуждается в доработке. Также было промоделировано нагружение реакционного канала пластины максимальным давлением (10 МПа), что показано на рис. 9.

Программа моделирует деформацию, полученную в результате нагружения пластины и выводит результат в цветовой гамме. Максимальное значение деформации в данном варианте: $3,3 \cdot 10^{-8}$ м. Такая деформация незначительна, и является допустимой при работе микрореактора. В рамках работы создана твердотельная 3D-модель пластинчато-модульного микрореактора. Смоделированы 5 различных геометрий каналов в реакционной пластине.

Таблица 3.

**Результаты моделирования нескольких вариантов реакторных пластин
Table 3. Simulation results for several variants of reactor plates**

Пластина	а	б	в	г	д
Эффективность перемешивания γ	0,9987	0,9985	0,26	0,98	0,98
Перепад температур по длине канала между теплоносителем и нагреваемой средой (разница между средней температурой реакционного потока и средней температурой теплоносителя), К	13	45	32	27	9
Перепад давления по длине канала, Па	939700	4379	10000	253,7	27
Наличие застойных зон по длине канала (на рисунке 11 такие зоны обозначаются синим цветом).	Есть	Есть	Есть	Незнач.	Незнач.
Деформация при нагружении пластины давлением в 10 МПа	Незнач.	Незнач.	Незнач.	Незнач.	Незнач.

Для каждой геометрии реакционной пластины проведено CFD-моделирование смешения модельной системы этанол-вода, для вычисления характеристик потоковых процессов (температура, давление, распределение концентрации смешивающих фаз по сечению, распределение скоростей).

Проведены прочностные расчеты конструкции. Результаты расчетов приведены в таблице 3.

Таким образом, проведённые исследования показали следующее:

1) При нагревании пластины, большая часть тепла уходит в саму пластину, при этом поток нагревается, но не так значительно. Выдвинута следующая гипотеза: необходимо предвари-

тельно нагревать саму пластину до необходимой температуры процесса. И только после этого пускать поток реагентов – такая схема позволит обеспечить минимальный температурный градиент потока и тем самым обуславливает возможность поддержания необходимого изотермического режима. Также можно значительно увеличить расход теплоносителя в теплообменной пластине, что значительно упростит задачу.

2) Большинство пластин показали отличную эффективность смешения, что обуславливает их применения не только для смешения, но и для проведения химических реакций, поскольку для проведения любой химической реакции данный

фактор является основополагающим. А сама химическая реакция протекает в реакционном канале, необходимую длину которого можно рассчитать под заказчика, исходя из особенностей кинетики определённой реакции. Единственное ограничение – невозможность проведения реакции с твёрдыми веществами. Однако, при использовании твёрдого катализатора, в микрофлюидике применяют нанесение его непосредственно на поверхность самих каналов перед проведением самой реакции. Также необходимо регулировать возможность выпадения твёрдого осадка внутри каналов. Один из методов – поддержание температуры внутри самого реактора, исключая возможность вышеуказанного явления.

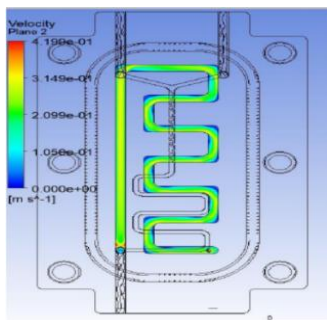


Рис. 10. Распределение скоростей в каналах теплообменной пластины
Fig. 10. Velocity distribution in the channels of the heat exchange plate

4) При нагружении пластин максимально возможным давлением (10 МПа) происходят весьма незначительные деформации, что позволяет использовать данные пластины в указанной конструкции реактора для проведения опасных для человеческого здоровья реакций при значительных давлениях (до 10 МПа). Таким образом, руководствуясь данным ограничением, есть возможность нивелировать проблему, указанную в пункте 2.

5) В результате испытаний, удалось определить лидер модель (пластина Д), исходя из следующих соображений:

а) коэффициент γ близок к 1, что обозначает повышенную эффективность смешения реагентов;

б) перепад температур по длине канала между теплоносителем и нагреваемой средой минимален среди других пластин, что очень важно для поддержания изотермического режима в пластине;

в) перепад давления незначителен и также минимален среди других, что позволяет протолкнуть жидкость через пластину с минимальными экономическими и физическими затратами;

г) застойные зоны практически отсутствуют, что обозначает наиболее эффективное использование пространства пластины;

3) В некоторых пластинах присутствуют застойные зоны, характеризующиеся около нулевыми скоростями потока. Предложены следующие варианты нивелирования данной проблемы:

а) Увеличение скруглений каналов. Как показано на рис. 10, застойные зоны образуются непосредственно в местах небольших скруглений, увеличение которых позволит «повторить» направления движения потока, что значительно уменьшит их количество и увеличит полезную площадь реакционного канала.

б) Принципиальное изменение смесевой зоны пластины или отказ от рассмотрения такой модели в качестве наиболее эффективной.

д) деформация под нагружением пластины в 10 МПа сведена к минимуму. На основании вышеперечисленных критериев можно сделать вывод, что данная пластина является лидер-моделью и подлежит воплощению в металл.

ВЫВОДЫ

Приведённый пример моделирования микрореактора позволяет корректно оценить предложенный прототип модели, и, при необходимости, провести её доработку до конструкции, обеспечивающей искомые условия. На основе проделанной работы, выявились дальнейшие шаги исследований в рассматриваемой области, а именно:

- проверка гипотез, выдвинутых в результатах текущих исследований;

- воплощение выбранной пластины в металл и проверка результатов моделирования на практике;

- исследование газо-жидкостных процессов и проверка эффективности микроканалов при их использовании в данном направлении;

- исследование других форматов микрореакторов с использованием принципиально различных конструкций.

Авторы выражают признательность руководству. Передовой инженерной школы химического инжиниринга и машиностроения РХТУ им.

Д.И. Менделеева, за оказанную помощь при проведении данного исследования и написания настоящей статьи.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА

REFERENCES

1. **Brendon J. Doyle, Petteri Elsner, Bernhard Gutmann.** Mini-Monoplant Technology for Pharmaceutical Manufacturing. *Org. Process Res. Dev.* 2020, 24, 2169-2182.
2. **Thomas Wirth.** Microreactors in Organic Chemistry and Catalysis. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12,69469 Weinheim, Germany, 2013.
3. **Tyler D., Peter H.** Applying Flow Chemistry: Methods, Materials, and Multistep Synthesis [et all]. *The Journal of Organic Chemistry.* 2013. N 13. P. 6384-6389. <https://doi.org/10.1021/jo400583m>
4. **Prashant L., Sarang P.A., Bharat A., Shirish H., Makarand S.** Review on microreactors: Reactor fabrication, design, and cutting-edge applications [et all]. *Chemical Engineering Science.* 2018. N 189. P. 431-448. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.03.026>
5. US Patent N 0060152A1. Methods and systems for improved biodiesel production. Brian H.Dennis, Richard E. Billo, Christopher R. Oliver, John W. Priest, Edward S. Kolesar, Elinor Kolesar, 2011.
6. **Mark C. Messner, Guosheng Ye & T.-L. Sham.** A Structural Design Approach Tailored for the Rapid Preliminary Design of Microreactor Components. *Patient Education and Counseling.* 2017. N 100. P. 1634-1642. <https://dx.doi.org/10.1016/j.pec.2017.04.005>
7. Пат. 2429064C2, Российская Федерация, МПК B01J 10/00. Лабораторное устройство для озонлиза поточного типа и способ осуществления реакции озонлиза / Салаи Д., Варга Н., Бонч Ф., Гарвас Ф., Каранчи Т., Гедёрхази Л., Юрге Л; заявитель и патентообладатель TalesNano Nanotechnologiai Zrt.; заявл. 22.12.2006; опубл. 20.09.2011.
8. **Шаблий Л.С., Кривцов А.В., Колмакова Д.А.** Компьютерное моделирование типовых гидравлических и газодинамических процессов двигателей и энергетических установок в Ansys Fluent: учеб. пособие. Самара: Изд-во Самар. ун-та, 2017. 108 с.
9. **Миньков Л.Л., Моисеева К.М.** Численное решение задач гидродинамики с помощью вычислительного пакета Ansys Fluent: учеб. Пособие. Томск: STT, 2017. 122 с.
10. **Ляпков А.А.** Материальные и тепловые расчеты в химической технологии. Учебное пособие. Томск: Изд. ТПУ, 2005. 105 с.
11. **Соколов М.М., Волкова И.В., Мных С.В., Егармин К.А.** Исследование работы железобетонной балки с применением программной системы Abaqus. *Universum.* 2017. № 2. С. 35-44.
12. US Patent N 9302243B2. A continuous-acting microreactor. Norbert Josef Kokmann. 2016.
1. **Brendon J. Doyle, Petteri Elsner, Bernhard Gutmann.** Mini-Monoplant Technology for Pharmaceutical Manufacturing. *Org. Process Res. Dev.* 2020, 24, 2169-2182.
2. **Thomas Wirth.** Microreactors in Organic Chemistry and Catalysis. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Boschstr. 12,69469 Weinheim, Germany, 2013.
3. **Tyler D., Peter H.** Applying Flow Chemistry: Methods, Materials, and Multistep Synthesis [et all]. *The Journal of Organic Chemistry.* 2013. N 13. P. 6384-6389. <https://doi.org/10.1021/jo400583m>
4. **Prashant L., Sarang P.A., Bharat A., Shirish H., Makarand S.** Review on microreactors: Reactor fabrication, design, and cutting-edge applications [et all]. *Chemical Engineering Science.* 2018. N 189. P. 431-448.
5. US Patent N 0060152A1. Methods and systems for improved biodiesel production. Brian H.Dennis, Richard E. Billo, Christopher R. Oliver, John W. Priest, Edward S. Kolesar, Elinor Kolesar, 2011.
6. **Mark C. Messner, Guosheng Ye & T.-L. Sham.** A Structural Design Approach Tailored for the Rapid Preliminary Design of Microreactor Components. *Patient Education and Counseling.* 2017. N 100. P. 1634-1642. <https://dx.doi.org/10.1016/j.pec.2017.04.005>
7. RU Patent N 2429064C2, IPC B01J 10/00. Laboratory device for flow-type ozonolysis and method of ozonolysis reaction / Salai D., Varga N., Bonts F., Garvas F., Karanchi T., Gederhazi L., Jurge L.; applicant and patent holder TalesNano Nanotechnologiai Zrt.; application. 22.12.2006; publ. 20.09.2011.
8. **Shabliy L.S., Krivtsov A.V., Kolmakova D.A.** Computer modeling of typical hydraulic and gas dynamic processes of engines and power plants in Ansys Fluent: textbook. manual. Samara: Publishing House of Samar. un-ta, 2017. 108 p.
9. **Minkov L.L., Moiseeva K.M.** Numerical solution of hydrodynamic problems using the computing package Apsus Fluent: textbook. Manual. Tomsk: STT, 2017. 122 p.
10. **Lyapkov A.A.** Material and thermal calculations in chemical technology. Study guide. Tomsk: TPU Publishing House, 2005. 105 p.
11. **Sokolov M.M., Volkova I.V., Mnykh S.V., Egarmin K.A.** Investigation of the operation of a reinforced concrete beam using the Abaqus software system. *Universum.* 2017. N 2. P. 35-44.
12. US Patent N 9302243B2. A continuous-acting microreactor. Norbert Josef Kokmann. 2016.

Поступила в редакцию 28.05.2023
Принята к опубликованию 19.06.2023

Received 28.05.2023
Accepted 19.06.2023