

## 6. Выводы

Таким образом, получена графическая картина распространения нестационарной волны в стержне прямоугольного сечения. Она позволила исследовать прифронтовую зону и выявить новые трехмерные эффекты вблизи нее.

Проанализировано сложное явление двойной перестройки волнового процесса в стержне прямоугольного поперечного сечения, в процессе которого последовательно чередуются трехмерные, двумерные и одномерные явления. Общеизвестные одномерные результаты оказываются медленно изменяющейся асимптотикой для сложного пространственного процесса.

### Литература

1. Бабаков, И. М. Теория колебаний [Текст] / И. М. Бабаков. — М.: Наука, 1968. — 559 с.
2. Векуа, И. Н. К вопросу распространения упругих волн в бесконечном слое, ограниченном двумя параллельными плоскостями [Текст] / И. Н. Векуа // Тр. Тбилисс. Геофизич. Ин-та. — 1937. — Т. 2. — С. 23–50.
3. Слепян, Л. И. Нестационарные упругие волны [Текст] / Л. И. Слепян. — Л.: Судостроение, 1972. — 376 с.
4. Шамровський, О. Д. Дискретна модель поширення нестационарної подовжньої хвилі в пружному стержні [Текст] / О. Д. Шамровський, А. І. Веселов, Ю. О. Лимаренко // Нові матеріали та технології в металургії та машинобудуванні. — 2008. — № 1. — С. 98–102.
5. Шамровський, А. Д. Вывод динамических уравнений продольной деформации стержня при помощи двойного упрощения уравнений теории упругости [Текст] / А. Д. Шамровський, Л. Н. Егармина // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. — 2009. — № 2. — С. 111–115.
6. Шамровський, А. Д. Моделирование распространения продольной волны в стержне с помощью уточненных динамических уравнений [Текст] / А. Д. Шамровський, Л. Н. Егармина // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. — 2010. — № 2. — С. 139–145.
7. Тимошенко, С. П. Колебания в инженерном деле [Текст] / С. П. Тимошенко. — М.: Наука, 1967. — 444 с.
8. Шамровський, А. Д. Асимптотико-групповой анализ дифференциальных уравнений теории упругости [Текст] / А. Д. Шамровський. — Запорожье: ЗГИА, 1997. — 169 с.
9. Скрышник, И. А. Двумерное моделирование трехмерных продольных волн в плоском слое [Текст] / И. А. Скрышник, А. Д. Шамровський // Математическое моделирование физико-математических полей и интенсификация промышленного производства. — Запорожье, 1995. — С. 43–50.
10. Скрышник, И. А. Графическое моделирование волновых процессов в пластинах и оболочках [Текст]: тез. докл. Междунар. конф. / И. А. Скрышник, А. Д. Шамровський // Современные проблемы геометрического моделирования. — Мелитополь, 1995. — 164 с.

### ДОСЛІДЖЕННЯ ЕФЕКТУ ПОДВІЙНОЇ ПЕРЕБУДОВИ НЕСТАЦІОНАРНОЇ ПОВЗДОВЖНЬОЇ ХВИЛІ У СТЕРЖНІ ПРЯМОКУТНОГО ПЕРЕРІЗУ

Проаналізовано отриманий у попередніх роботах новий ефект подвійної перебудови нестационарної хвилі, яка виникає у стержні прямокутного поперечного перерізу під час динамічного повздовжнього навантаження. Показана картина отримана на основі дослідження тривимірних динамічних рівнянь теорії пружності і відповідає процесам, що відбувається поблизу фронту нестационарної хвилі.

**Ключові слова:** асимптотико-груповий, динамічне навантаження, фронт хвилі, квазіфронт, нестационарна хвиля.

*Егарміна Лариса Николаевна, кандидат технических наук, доцент, и. о. заведующего кафедрой высшей и прикладной математики, Запорожская государственная инженерная академия, Украина, e-mail: l.yegarmina@gmail.com.*

*Егарміна Лариса Миколаївна, кандидат технічних наук, доцент, в. о. завідувача кафедри вищої та прикладної математики, Запорізька державна інженерна академія, Україна.*

*Yegarmina Larisa, Zaporozhye State Engineering Academy, Ukraine, e-mail: l.yegarmina@gmail.com*

УДК 66.023.2

DOI: 10.15587/2312-8372.2015.41070

**Мірошниченко Ю. А.,  
Безносик Ю. О.,  
Бондаренко О. С.**

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ В МІКРОРЕАКТОРАХ

*В даній роботі проведено огляд літературних даних по застосуванню мікроструктурних реакторів для оптимізації хіміко-технологічних процесів та реакцій, детальний опис яких можливий з використанням сучасних методів та засобів моделювання. На основі встановлених техніко-економічних переваг мікросистемних приладів доведено доцільність їх впровадження у виробництво.*

**Ключові слова:** мікрореактор, структурований реактор, мікроканал, кінетика, моделювання.

### 1. Вступ

Зрушення технічного прогресу в область мікротехнологій являється пріоритетним напрямком дослідження для багатьох галузей науки й виробництва (рис. 1) [1]. В наш час застосування мікроструктурних реакторів замість традиційних апаратів являється новим альтернативним підходом, який інтенсивно розвивається в багатьох наукових центрах США, Канади, Нідерландів,

Німеччини, Швеції [2]. Тут було проведено дослідження процесів і реакцій у мікрореакторах та створено довідники з детальним описом методик виконання експериментів. При цьому науковий та практичний інтерес полягає в можливості оптимальної організації різних процесів хімічної технології.

Незважаючи на мініатюрність мікрореакторів, їх об'єм залишається занадто великим для того, щоб речовини взаємодіяли між собою на молекулярному рівні.

Все це пов'язано з наявністю у мікрореакторів особливих властивостей, що досягаються мікромасштабуванням.



Рис. 1. Галузі застосування мікроструктурних реакторів [2]

Мікрореактори вносять великий внесок у подальший розвиток хімічного машинобудування в мікромасштабі, в той час як хімізм та механізм реакції в значній мірі залишаються незмінними. Головні переваги мікрореактора — покращення режиму течії потоку і забезпечення інтенсифікації масо- і теплопереносу. Зменшення лінійних розмірів збільшує відповідний градієнт для заданих величин параметрів процесу. Це відноситься до таких параметрів, як тиск, температура і концентрація, які особливо важливі для проведення процесу та обробки даних в реакторах. Використання мікрореакторів для отримання нових речовин надає можливість синтезувати нові матеріали із наперед заданими властивостями.

Реалізація даних процесів у мікрореакційній системі вимагає попереднього математичного моделювання операцій, що надає значні технологічні та економічні переваги.

## 2. Аналіз літературних даних

Переваги мікроструктурних пристроїв, які забезпечують більш ефективне ведення хімічних і біохімічних реакцій, було продемонстровано багатьма авторами [2–6]. Застосування мікросистем для хімічних і біохімічних реакцій обговорювалося на симпозиумі в 1995 році в Німеччині, який поклав початок розвитку мікрореакційної техніки у всьому світі [7]. З 1997 року організована конференція з мікротехнології IMRET [8].

Мікроструктурними реакторами називають хімічні апарати, внутрішні розміри яких менші 1 мм [6, 9]. Характерні розміри внутрішніх каналів у мікроструктурних реакторах знаходяться в діапазоні від мікрометра до міліметра (табл. 1).

У 1995 році мікрореакційна техніка була вперше використана в промислових хімічних лабораторіях. О. Верц та ін. [11, 12] описали неповне окиснення спирту в альдегід, що дозволило розробити цей процес у промис-

ловому масштабі. При цьому розглядалася можливість застосування отриманої в мікрореакторі інформації для оптимізації самого процесу в класичних реакторах, а з іншого боку використання самого мікрореактору з метою підвищення селективності процесу. Тільки таке безпосереднє порівняння реакторів між собою дозволяє оцінити потенціал мікрореакційної техніки для промислового застосування.

Пізніше Я. Я. Лероу та ін. провели ряд каталітичних газозфазних реакцій в лабораторіях DuPont для дослідження високотемпературних, небезпечних, каталітичних та фотохімічних газорідних процесів [13].

Для дослідження ефективності технології неперервних проточних реакторів ОАО «Татнефтехиминвест-Холдинг» та компанією Wingspeed AG (Німеччина) було створено лабораторну установку неперервної дії MR-Lab [14]. Дане обладнання призначене для дослідної роботи на мікроструктурних реакторах в вищих та середніх спеціальних навчальних закладах хімічного спрямування. Для вузів з поглибленим вивченням хімії та хімічної технології з метою фундаментальних досліджень було запропоновано автоматизовану установку модульного типу Qmix [14].

Таблиця 1

Порівняння розмірів внутрішніх каналів макро-, мікро- і наноприладів [10]

Параметр	Макро	Мікро	Нано
Діапазон розмірів	$(1 \div 10^{-3})$ м	$(10^{-3} \div 10^{-6})$ м	$(10^{-6} \div 10^{-9})$ м
Одиниці вимірювання	1 мм	1 мкм	1 нм
Відношення величини робочої поверхні до об'єму	100–1000 м <sup>2</sup> /м <sup>3</sup>	10000–50000 м <sup>2</sup> /м <sup>3</sup>	~100000 м <sup>2</sup> /м <sup>3</sup>

Системи з використанням мікрореакторів можуть застосовуватися для промислових, так і для дослідницьких цілей, вони стають ланцюгом між досягненнями в промисловості та лабораторії. Таким чином, застосування мікрореакторів робить можливим знаходити оптимальні умови ведення процесу і проводити теоретичні дослідження практично у експлуатаційному режимі промислових реакторів [15, 16].

Сьогодні майже кожна хімічна фірма має установку, що відноситься до мікрореакційної технології. Особливо цією технологією зацікавилися фірми, що займаються тонким органічним синтезом. Очікується, що промисловий інтерес до мікрореакторів буде і далі зростати.

Але варто відмітити, що на даний час в літературі не представлено наукового обґрунтування застосування існуючих методів математичного моделювання та пакетів комп'ютерних програм для нових об'єктів хімічної технології — мікроструктурних реакторів. При цьому слід враховувати той факт, що при розробці фундаментальних основ для математичного опису процесів, що відбуваються в мікрореакторах, в деяких випадках необхідно удосконалити існуючу методику або розви-

вати якісно нові комплекси комп'ютерних програм із застосуванням сучасної технології математичного моделювання та обчислювального експерименту.

### 3. Об'єкт, мета та задачі дослідження

*Об'єкт дослідження* — технологічні характеристики основних процесів — хімічна кінетика, гідродинаміка, масоперенос, теплоперенос — які протікають в мікрореакторах.

*Мета дослідження* — вивчення технологічних характеристик мікроструктурного реактора для розробки математичної моделі хімічного процесу та проведення теоретичного експерименту.

Для досягнення поставленої мети необхідно виконати такі задачі:

1. Визначити основні переваги застосування мікрореакторів для синтезу нових речовин.

2. Обґрунтувати вид математичної моделі мікрореактора.

3. Дослідити підходи до моделювання різних реакцій та процесів у мікрореакторі з використанням спеціальних програмних засобів.

### 4. Основні переваги мікрореакційних систем

Серед ключових переваг мікрореакційної техніки виділимо такі.

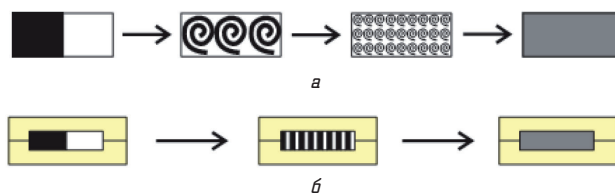
**Зменшення лінійних розмірів.** В результаті зменшення лінійних розмірів системи, рушійні сили для масо-, теплопереносу чи дифузійного потоку в розрахунок на одиницю об'єму чи одиницю поверхні зростають [6, 9]. У зв'язку з цим при масштабуванні виникає проблема відводу теплоти реакції, особливо для сильно екзотермічних та швидкопротікаючих реакцій. Оскільки коефіцієнт теплообміну обернено пропорційний діаметру каналу, то в мікроструктурних реакторах з мікроканалами, ширина яких зазвичай знаходиться в діапазоні 50–500 мкм, а стінка між каналом для проведення реакції і каналом теплопереносу при необхідності може бути зменшена до 20–50 мкм, він досягає величини до 25000 Вт/м<sup>2</sup>·К. Отримане значення коефіцієнта, виміряне в мікропристроях, перевищує, у крайньому разі, на один порядок значення, що відповідають стандартним теплообмінним апаратам [17]. Максимально ефективний теплообмін повинен забезпечувати миттєве нагрівання та охолодження реакційних сумішей, підтримуючи ізотермічні умови реакції в усіх точках системи.

**Збільшення відношення величини поверхні до об'єму.**

В результаті зменшення розмірів мікроканалів відношення величини поверхні до об'єму помітно зростає. Як показано в табл. 1, специфічна поверхня каналів мікрореактора перевищує поверхню стандартних приладів більше, ніж у 50 разів. Це може бути використано для інтенсифікації процесів, наприклад, у каталітичних газофазних реакторах, де внутрішні стінки апарату покривають активною речовиною.

**Зростання коефіцієнта масопереносу.** Основною відмінністю мікроструктурних реакторів від стандартних об'ємних полягає в ламінарності руху потоків рідин та газів, що визначається числом Рейнольдса [1, 14]. Застосування капілярів дозволяє досягти практично ідеального перемішування реагентів за рахунок пов-

торного циркуляційного перемішування крапель рідини під впливом тертя сегментованої рідини об стінки мікроканалів (рис. 2) [14, 15].



**Рис. 2.** Схематичне представлення процесу перемішування в мікрореакторі: *а* — турбулентне перемішування; *б* — ламінарне перемішування

**Багатократне збільшення числа елементів.** Характерною властивістю мікроструктурних приладів є багатократне повторення основних елементів. Вони можуть працювати як послідовно, що застосовується в приладах попереднього відбору, так і паралельно, використовуючи спільну лінію живлення [9].

**Гнучкість виробництва.** На відміну від класичних виробничих установок, збільшення продуктивності мікрореакторів досягається не за рахунок збільшення їх розмірів, а шляхом збільшення кількості установок [16]. Сполучення окремих приладів виконується з допомогою каналів та зон з рівним розподілом потоку. Зростання числа установок гарантує, що бажані характеристики основного приладу зберігаються при зростанні загальному об'єму системи.

**Безпека та екологічність.** Мінімальна кількість реакційної суміші в мікрореакторі мінімізує небезпеку вибуху при проходженні термічно складних реакцій. Тому структуровані мікрореактори неперервної дії називають глобальним рішенням екологічних проблем для хімічних процесів та технологій. Також важливу роль відіграє значне зменшення кількості реагентів, як для лабораторних досліджень, так і при масштабуванні та масовому виробництві.

### 5. Практичне впровадження мікрореакторів у виробництво

На основі розглянутих переваг можна виділити області, в яких мікроапарати являються серйозними конкурентами традиційного хімічного обладнання [14]:

- лабораторні установки — для підвищення точності вимірювань;
- виробництво речовин та матеріалів (в тому числі наноматеріалів) — для досягнення тонкого дозування реагентів, забезпечення швидкого та ефективного перемішування в малих об'ємах;
- мобільні установки — завдяки значному зменшенню масогабаритних характеристик;
- крупнотоннажне хімічне виробництво — покращення ряду показників: якість перемішування, ефективність тепло- та масопереносу, селективність реакції та вихід, час проходження процесу.

В наш час багато відомих європейських і американських хімічних та фармацевтичних компаній активно впроваджують нову передову технологію для багатотоннажного виробництва [9, 14, 16]:

- *Degussa*, Німеччина (оксид пропілену складає до 50 000 т/год);

- Eurodyn G mbH, Німеччина (нітрогліцерин, до 16 000 т/год);
- Xi'an Huian Chemical, Китай (нітрогліцерин для медицини, 120 т/год);
- Siemens Axiva, Німеччина (поліакрилат, 2000 т/год);
- DSM Fine Chemicals, Австрія (вітамін D, 100 т/год);
- Synthacon GmbH, Німеччина (ряд продуктів тонкого органічного синтезу, до 200 т/год);
- Sigma Aldrich GmbH, Швейцарія (ряд продуктів тонкого органічного синтезу, до 20 т/год);
- Clariant, Німеччина (пігменти, 10 т/год);
- Schering, Німеччина (синтез стероїдів, 15 кг/день).

## 6. Моделювання хімічних процесів у мікрореакторі

Для усунення проблем, які виникають при проектуванні та оптимізації структури мікрореакторів, важливим аспектом є детальний опис процесів та реакцій, що відбуваються в робочому середовищі. Однак, вимірювання всередині самих реакторів у випадку малорозмірних приладів стає складним завданням, яке успішно вирішується шляхом математичного моделювання кінетики хімічних процесів. Попередній розрахунок з використанням сучасних програмних засобів дозволяє передбачити умови проведення дослідів, виконати планування експерименту і, таким чином, значно зменшити об'єм експериментальних робіт, витрату матеріалів та часу.

Але на даний час у літературі присутня обмежена кількість інформації про методи та підходи теоретичного дослідження мікрореакційних систем. Тому дана задача є актуальною і потребує детального вивчення. Так, у роботі [18] розроблено математичну модель мікрореактора, що описує гідродинамічні особливості процесу змішування реагентів та перенесення маси, з урахуванням перебігу хімічної реакції (на прикладі реакції омилення етилацетату). Система рівнянь була вирішена чисельним методом кінцевих елементів з використанням програмного продукту ANSYS (CFX).

Оцінку молекулярного змішування двофазного рідинного потоку в середовищі мікроканалів було проведено в [19] шляхом вирішення рівнянь Нав'є-Стокса та рівнянь конвекції-дифузії з використанням комерційного програмного пакету COMSOL Multiphysics.

Для аналізу складних реакцій в багатофазних системах в роботі [20] було запропоновано плівкову модель для швидких реакцій на межі поділу фаз газ-рідина та модель мікрозмішування в об'ємі. Тут авторами при моделюванні було застосовано підхід Ейлера-Лагранжа, реалізований у відкритому для вільного доступу ресурсі — CFD-пакет «OpenFOAM».

У джерелі [21] наведено порівняння моделей руху потоків реагентів за ендотермічних та екзотермічних умов у режимі прямо- і протитечії в каталітичному мікрореакторі. До складу моделей входили рівняння матеріального, теплового та імпульсного балансів, а також рівняння перетворення реагентів і кінетичні рівняння реакцій, що відбувалися в системі. Реакційну систему було змодельовано в стаціонарному режимі з використанням програмного забезпечення COMSOL Multiphysics.

Боровинською К. С. [9] було представлено спеціальну розроблений комплекс програм Kinetic для побудови кінетичних моделей процесів, що відбуваються в мікрореакторах, коли лімітуючою стадією є кінетика

реакції. У дисертації [9] наведено математичну модель рідкофазного процесу алкілування фенілацетонітрилу, запропоновано модифіковані методи знаходження інтервальних оцінок кінетичних параметрів та проведено пошук оптимального режиму ведення процесу.

За рахунок малих поперечних розмірів каналів мікросистем радикальним чином змінюється співвідношення силових, енергетичних та масових потоків. Зокрема, послаблюється роль масових (об'ємних) факторів (гравітаційні, відцентрові, інерційні сили) та зростає роль поверхневих сил (капілярних, в'язких). Це зміщення балансу потоків можна регулювати шляхом математичного моделювання процесів, і таким чином вдається багатократно інтенсифікувати процеси для створення комбінацій технологічних умов, які є не можливими у звичайному обладнанні, а також для отримання унікальних продуктів та матеріалів.

На основі хоч і нечисленних, але ґрунтовних, теоретичних досліджень різних процесів у мікροструктурному реакторі стало зрозуміло, що макроскопічна характеристика руху робочого середовища як неперервного середовища стає неповноцінною і вимагає застосування мікроскопічного підходу, що описує взаємодію на молекулярно-кінетичному рівні. Тому повноцінна модель повинна включати рівняння матеріального та теплового балансів для прогнозованої системи, базові рівняння для фізичних параметрів перетворення реагентів, а також кінетичні рівняння для реакцій, що відбуваються в системі:

$$\Sigma G_i = 0 \text{ — матеріальний баланс;}$$

$$\Sigma Q_i = 0 \text{ — тепловий баланс;}$$

$$dX_i/d\tau = kC_A^m C_B^n \text{ — кінетика хімічних реакцій;}$$

$$dY_i/dZ = f(\text{Re, Pr, Ar}) \text{ — гідродинаміка.}$$

Така система включає набір рівнянь різного типу, від лінійних до диференціальних рівнянь в частинних похідних, і потребує спеціальних математичних методів для вирішення конкретних задач. Крім того, важливим етапом моделювання є визначення граничних умов та встановлення припущень. При цьому повна модель процесу може виявитися занадто складною для розв'язку. В такому випадку доцільним є застосування спеціальних засобів моделювання із залученням сучасних комп'ютерних технологій. На сьогодні існує багато успішних комерційних пакетів для моделювання складних хімічних процесів, найбільш відомими з яких є Aspen HYSYS, Aspen Plus, ANSYS, CHEMCAD, Pro II, Mathcad, COMSOL Multiphysics.

## 7. Висновки

В результаті проведених досліджень:

1. Показано потенційні переваги застосування мікрореакторів в контексті сталого виробництва і їх впровадження для синтезу нових матеріалів.
2. Проведено аналіз підходів до моделювання процесів, які протікають в мікрореакторах.
3. Показано, що математична модель процесу включає систему рівнянь різного типу і потребує для рішення сучасні комп'ютерні програми.

## Література

1. Гербст, А. Микрореакторы и нанотехнологии [Текст] / А. Гербст, В. Е. Шудегов, Р. С. Ярулин, Л. В. Наземцев // Нанотехнологии. Экология. Производство. — 2012. — № 3(16). — С. 78–82.

2. Hessel, V. Chemical Micro Process Engineering. Processing and Plants [Text] / V. Hessel, H. Löwe, A. Müller, G. Kolb. — Wiley-VCH Verlag, 2005. — 651 p. doi:10.1002/3527603581
3. Hessel, V. Gas / Liquid Microreactors for Direct Fluorination of Aromatic Compounds Using Elemental Fluorine [Text] / V. Hessel, W. Ehrfeld, K. Golbig, V. Haverkamp, H. Löwe, M. Storz, Ch. Wille, A. E. Guber, K. Jähnisch, M. Baerns // Microreaction Technology: Industrial Prospects. — Springer Science + Business Media, 2000. — P. 526–540. doi:10.1007/978-3-642-59738-1\_55
4. Hessel, V. Mikroverfahrenstechnik: Komponenten — Anlagenkonzeption — Anwenderakzeptanz — Teil 2 [Text] / V. Hessel, H. Löwe // Chemie Ingenieur Technik. — 2002. — Vol. 74, № 3. — P. 185–207. doi:10.1002/1522-2640(200203)74:3<185::aid-cite185>3.0.co;2-7
5. Herskowits, D. Characterization of a two-phase impinging jet absorber — II. Absorption with chemical reaction of CO<sub>2</sub> in NaOH solutions [Text] / D. Herskowits, V. Herskowits, K. Stephan, A. Tamir // Chemical Engineering Science. — 1990. — Vol. 45, № 5. — P. 1281–1287. doi:10.1016/0009-2509(90)87120-h
6. Jähnisch, K. Chemistry in Microstructured Reactors [Text] / K. Jähnisch, V. Hessel, H. Löwe, M. Baerns // Angewandte Chemie International Edition. — 2004. — Vol. 43, № 4. — P. 406–446. doi:10.1002/anie.200300577
7. Ehrfeld, W. DECHEMA [Text]: Monographs / W. Ehrfeld. — Frankfurt: DECHEMA, 1995. — 132 p.
8. Krummradt, H. Experiences with the use of microreactors in organic synthesis [Text] / H. Krummradt, U. Koop, J. Stoldt // Microreaction Technology: Industrial Prospects. — Springer Science + Business Media, 2000. — P. 181–186. doi:10.1007/978-3-642-59738-1\_17
9. Боровинская, Е. С. Математические модели и комплексы программ для исследования и оптимизации жидкофазных реакций в микрореакторах [Текст]: дис. канд. тех. наук / Е. С. Боровинская. — Санкт-Петербург, 2008. — 190 с.
10. Herwig, H. Flow and Heat Transfer in Micro Systems: Is Everything Different or Just Smaller? [Text] / H. Herwig // Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. — 2002. — Vol. 82, № 9. — P. 579–586. doi:10.1002/1521-4001(200209)82:9<579::aid-zamm579>3.0.co;2-v
11. Wörz, O. Microreactors — A New Efficient Tool for Reactor Development [Text] / O. Wörz, K.-P. Jäckel, T. Richter, A. Wolf // Chemical Engineering & Technology. — 2001. — Vol. 24, № 2. — P. 138–142. doi:10.1002/1521-4125(200102)24:2<138::aid-ceat138>3.0.co;2-c
12. Wörz, O. Winzlingemitgroßer Zukunft-Mikroreaktoren für die Chemie [Text] / O. Wörz, K. P. Jäckel // Chem. Tech. — 1997. — Vol. 26. — P. 130–134.
13. Lerou, J. J. Microsystem Technology for Chemical and Biological Microreactors [Text] / J. J. Lerou // DECHEMA Monographs. — VHC: Weinheim, 1996. — Vol. 132. — P. 51–69.
14. Яруллин, Р. Непрерывные проточные микрореакторы [Текст] / Р. Яруллин, А. Гербст // Микрореакторы и нанотехнологии. — 2012. — С. 44–49.
15. Ehrfeld, W. Microreactors. New technology for modern chemistry [Text] / W. Ehrfeld, V. Hessel, H. Löwe. — Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 2000. — 651 p. doi:10.1002/3527601953
16. Ehrfeld, W. Encyclopedia of Industrial Chemistry [Text] / W. Ehrfeld, V. Hessel, H. Löwe. — Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH, 1999. — 583 p.
17. Schubert, K. Realization and testing of microstructure reactors. Micro heat exchangers and micromixers for industrial applications in chemical engineering [Text] / K. Schubert, W. Ehrfeld, I. H. Rinard, R. S. Wegeng // Proceeding of the conference on Process Minutiarization: 2nd International Conference on Microreaction Technology — IMRET 2. — 1998. — P. 88–95.
18. Хайдаров, В. Г. Математическое моделирование режимов течения потока в микроструктурных системах [Текст]: дис. к. тех. наук / В. Г. Хайдаров. — Санкт-Петербург, 2013. — 125 с.
19. Zhang, Z. Quantitative characterization of micromixing simulation [Text] / Z. Zhang, C. Yim, M. Lin, X. Cao // Biomicrofluidics. — 2008. — Vol. 2, № 3. — P. 034104. doi:10.1063/1.2966454
20. Radl, S. Fast Reactions in Bubbly Flows: Film Model and Micromixing Effects [Text] / S. Radl, D. Suzzi, J. G. Khinast // Industrial & Engineering Chemistry Research. — 2010. — Vol. 49, № 21. — P. 10715–10729. doi:10.1021/ie100539g
21. Vaccaro, S. Results of modeling of a catalytic micro-reactor [Text] / S. Vaccaro, P. Ciabelli // 31st Meeting on Combustion. — 2012. — P. 1–6.

#### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МИКРОРЕАКТОРАХ

В данной работе проведен обзор литературных данных по применению микроструктурных реакторов для оптимизации химико-технологических процессов и реакций, детальное описание которых возможно с использованием современных методов и средств моделирования. На основе установленных технико-экономических преимуществ микросистемных приборов доказана целесообразность их внедрения в производство.

**Ключевые слова:** микрореактор, структурный реактор, микроканал, кинетика, моделирование.

*Мірошніченко Юлія Анатоліївна, аспірант, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна, e-mail: Ju1ianna@ukr.net.*

*Безносик Юрій Олександрович, кандидат технічних наук, доцент, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна, e-mail: yu\_beznosyk@ukr.net.*

*Бондаренко Олена Сергіївна, кандидат технічних наук, доцент, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна, e-mail: kxtp@kpi.ua.*

*Мірошніченко Юлія Анатоліївна, аспірант, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна.*

*Безносик Юрій Олександрович, кандидат технічних наук, доцент, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна.*

*Бондаренко Олена Сергіївна, кандидат технічних наук, доцент, кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут», Україна.*

*Myroshnychenko Yuliia, National Technical University of Ukraine «Kyiv Polytechnic Institute», Ukraine, e-mail: Ju1ianna@ukr.net. Beznosyk Yuriy, National Technical University of Ukraine «Kyiv Polytechnic Institute», Ukraine, e-mail: yu\_beznosyk@ukr.net. Bondarenko Olena, National Technical University of Ukraine «Kyiv Polytechnic Institute», Ukraine, e-mail: kxtp@kpi.ua*