

А. М. МИРОНОВ, М. В. ІЛЬЧЕНКО, О. О. ГАПОНОВА, Є. Д. ПОНОМАРЕНКО, С. М. БИКАНОВ

МАТЕМАТИЧНЕ ТА ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНОГО РЕАКТОРА ІДЕАЛЬНОГО ВИТІСНЕННЯ ДЛЯ ОПТИМІЗАЦІЇ КІЛЬКОСТІ КАТАЛІЗАТОРА

У статті розглянуто питання поєднання математичного та імітаційного моделювання для аналізу й оптимізації роботи реактора ідеального витіснення (PIB) на прикладі реакції дегідратації метанолу до диметилового ефіру у газовій фазі в присутності каталізатора. Метою дослідження визначено побудову математичної моделі на основі класичних рівнянь матеріального та енергетичного балансу з наступною реалізацією імітаційної схеми у середовищі DWSIM із застосуванням термодинамічного пакету Пенг-Робінсона. Показано, що математична модель дозволяє швидко оцінити базові параметри процесу, проте для високої точності розрахунків, урахування реальної кінетики та каталітичних особливостей доцільно залучати сучасне імітаційне моделювання. На основі імітаційного експерименту доведено, що зміна кількості каталізатора суттєво впливає на конверсію метанолу: збільшення від 0,6 до 2,2 кг/м³ дало змогу підвищити конверсію з 15,53 % до 81,86 %. Це засвідчує значну чутливість PIB до варіації активної поверхні каталізатора та підтверджує важливість точного налаштування параметрів симуляції. Окрему увагу приділено використанню у DWSIM спеціального контролера для оптимізаційного підбору кількості каталізатора відповідно до заданої уставки конверсії. Розроблена імітаційна модель враховує хімічну стехіометрію, кінетику реакції, міжфазний масоперенос та особливості теплового режиму, що дозволяє моделювати реальні виробничі умови та прогнозувати поведінку реактора при зміні умов його експлуатації. Порівняльний аналіз показав, що математичний підхід зручний для первинного проектування та оцінки впливу параметрів, а імітаційна схема забезпечує деталізацію та врахування низки додаткових факторів, що є ключовим для промислової практики. Отримані результати демонструють практичну цінність через поєднання обох підходів у сучасній хімічній інженерії та підтверджують можливість використання розробленої моделі для техніко-економічного обґрунтування та оптимізації роботи каталітичних реакторів без проведення дорогих фізичних експериментів. Представлені результати можна застосовувати для підготовки проектної документації, розробки стратегії автоматизованого керування та навчання фахівців у галузі хімічного виробництва. Запропонована у роботі спрощена методика доводить свою ефективність для визначення ключових елементів у сучасних інжинірингових задачах та вдосконаленні існуючих технологічних рішень.

Ключові слова: математичне моделювання; імітаційне моделювання; хімічний реактор; оптимізація; реактор ідеального витіснення; PIB; PFR; симуляція; DWSIM.

A. M. MYRONOV, M. V. ILCHENKO, O. O. GAPONOVA, Ye. D. PONOMARENKO, S. M. BYKANOV

MATHEMATICAL AND SIMULATION MODELLING OF AN IDEAL PLUG-FLOW CHEMICAL REACTOR FOR CATALYST LOADING VALUE OPTIMIZING

The article presents a comprehensive approach combining mathematical and simulation modelling for the analysis and operational optimization of a plug-flow reactor (PFR), using the example of methanol dehydration to dimethyl ether in the gas phase with a catalyst bed. The main aim of the research is to establish a reliable mathematical model based on classical mass and energy balance equations and to implement this model in the DWSIM simulation environment with the Peng-Robinson thermodynamic package for accurate calculation of gas-phase mixture properties. The paper demonstrates that the analytical model provides rapid estimation of fundamental process parameters but is limited when accounting for realistic reaction kinetics, catalyst performance and detailed thermodynamics. To overcome these constraints, a detailed simulation model was developed in DWSIM, which allows dynamic manipulation of reactor parameters and integration of real operational factors. The conducted simulation showed that increasing the catalyst bed loading from 0.6 kg/m³ to 2.2 kg/m³ leads to a significant improvement in methanol conversion from 15.53% to 81.86%. This highlights the high sensitivity of a PFR to the active catalytic surface and confirms the importance of precise model parameter tuning. Special attention was paid to using the DWSIM controller block for automated regulation of the catalyst loading value to achieve a target conversion with defined accuracy. The simulation model developed in this work accurately integrates reaction stoichiometry, kinetic expressions, interphase mass transfer and the thermal regime, making it possible to closely replicate real industrial process conditions and predict reactor behavior under varying production scenarios. A comparative assessment reveals that while the mathematical framework is convenient for initial design calculations and parameter impact evaluation, the simulation approach ensures advanced detail, flexible adjustments and deeper insights for industrial practice. The combined use of both approaches significantly improves calculation reliability, supports technical and economic decision-making, and reduces the need for expensive pilot testing. The results and techniques described are applicable for preparing design documentation, developing automated process control strategies and training future chemical engineering specialists. The proposed methodology thus demonstrates its high practical value and potential for modern engineering challenges and continuous improvement of industrial reactor technologies.

Keywords: mathematical modelling; simulation modelling; chemical reactor; optimization; Plug-Flow reactor; PIB; PFR; simulation; DWSIM.

Вступ. Процеси хімічного синтезу речовин, які здійснюються у реакторах відповідного задачею типу виступають ядром технологічного ланцюга більшості галузей загально-хімічної і переробної промисловості. Реактори ідеального витіснення (PIB) є одним з широко застосовуваних типів апаратів, які задіяні у безперервному виробництві промислової продукції. Це пояснюється їх високою ефективністю, простотою конструкції та придатністю до зручного аналітичного опису [1]. У теорії хімічної інженерії цей тип реактора характеризується тим, що потоки реагентів рухаються без перемішування в осьовому напрямку, даючи

змогу коректно описувати перебіг усіх реакцій за допомогою системи диференціальних рівнянь [2].

В умовах зростання вимог щодо точності усіх технологічних розрахунків, високої передбачуваності виробничих процесів і проектної енергоефективності обладнання особливої актуальності набувають задачі, пов'язані з моделюванням. Вони здатні дуже суттєво спростити, прискорити та здешевити розробку майже усіх типів обладнання, підвищити якість проектних рішень та надати змогу забезпечити необхідну для прикладних задач варіативність розрахунку окремих характеристик.

Математичне моделювання дозволяє отримувати кількісне уявлення про перебіг реакцій, розподіл концентрацій, температури і інших параметрів уздовж реактора. Водночас сучасне комп'ютерне імітаційне моделювання у програмних середовищах на кшталт Aspen HYSYS, UniSim Design або DWSIM дає змогу реалізувати більш складні випадки, враховувати реальні умови, а також здійснювати багатоваріантні розрахунки взагалі без потреби у здійсненні фізичних експериментів [3].

Незважаючи на інтенсивний розвиток засобів імітаційного моделювання в останні роки, ключовим етапом побудови імітаційної моделі залишається формування коректної математичної основи. Без неї результати моделювання можуть бути некоректними з фізичної точки зору або непридатними для подальшої інженерної інтерпретації [4]. У згаданому контексті виникає потреба в чіткому зв'язку між математичною формалізацією процесу і його цифровою реалізацією.

Метою дослідження, представленого у роботі, є визначення математичної основи для побудови моделі реактора ідеального витіснення у середовищі DWSIM. У свою чергу, основною задачею моделі є оптимізація кількості каталізатора для досягнення бажаних показників продуктивності та конверсії речовин.

Аналіз літератури. Математичне та імітаційне моделювання реакторів ідеального витіснення (у англомовній літературі – PFR, Plug-Flow Reactor) входить до кола вельми популярних тем наукових публікацій у галузі хімічної інженерії. Так, загальні теоретичні основи моделей PIV викладені у ключових роботах Levenspiel [1] та Fogler [2], які формалізували розрахунок матеріальних балансів, кінетику реакцій та розподіл витрат часу, що нині виступають основою майже усіх математичних моделей цього типу.

Зокрема, Levenspiel [1] розглядає PIV як трубний реактор без аксіального перемішування, показуючи, що математичне розв'язання рівнянь балансу мас та кінетики дає одразу декілька аналітичних розв'язків у вигляді реакцій першого порядку. Fogler [2] доповнює ці результати, наводячи аналіз різних факторів, що регулюють нестабільність, тепловий режим та те, як дисперсія здатна змінювати поведінку реактора.

Праці, присвячені неідеальному руху речовин у PIV тільки поглиблюють розуміння впливу аксіальної дисперсії. Наприклад, дослідження Adeniyi [5] щодо неідеальності режиму руху сировини в обладнанні у процесі сапоніфікації демонструє, як розподіл часу перебування у PIV використовується для оцінки числа реакторів ідеального змішування, які будуть здатні його замінити в реальних мовах.

Сьогодні існує цілий клас спеціальних задач, які називаються CFD (від англійської Computational Fluid Dynamics), що являють собою методи комп'ютерного моделювання, які дозволяють здійснювати перевірку інженерних рішень на предмет їхньої працездатності, оцінювати їх ефективність та економічну доцільність до початку будівельних робіт. Огляд [6] підкреслює важливість врахування дисперсії та подальшого введення CFD-моделей для точного моделювання

гідродинаміки, а у дослідженні [7] розглядається трифазний реактор з крапельним шаром та показано модель для опису течії рідини на твердих частинках. Модель враховує механізми примусової конвекції, аксіальної дисперсії та міжфазного масопереносу.

У сфері імітаційного моделювання промислових хімічних виробництв останнім часом суттєво зросла популярність пакетів відкритого коду – зокрема, DWSIM [8]. У багатьох роботах розглянуто систему хімічних процесів у трубчастих реакторах, які допомагають дослідникам визначати раціональні режими роботи реакторів, забезпечуючи відповідність вимогам до ефективності хімічних процесів. Сучасне імітаційне моделювання дозволяє візуалізувати та аналізувати поведінку PIV за допомогою програм. Це особливо корисно для складних систем, де зазвичай важко отримати аналітичні рішення.

У дослідженні [9] розглядається моделювання та імітація промислових реакторів, використаних у хімічній та дубильній технології. У статті [10] представлено моделювання реактора з закрученою трубкою, де аналізуються реакції першого порядку в ламінарних ньютонівських та неньютонівських рідинах. Дослідження показує, яким чином геометрія реактора впливає на ефективність процесу.

У книзі Ranade [11] описується, як моделювання потоків у хімічних реакторах може покращити їхнє проектування, експлуатацію та продуктивність. Вже у 2002 році автор вбачає вкрай великі перспективи у застосуванні обчислювального моделювання потоків для інженерії хімічних реакторів. У дослідженні [12] розглядається моделювання і симуляція промислового трифазного реактора з крапельним шаром, задіяним для гідрогенізації 1,3-бутадієну в н-бутан. У даному випадку моделювання проводиться для оцінки виходу установки. У свою чергу, дослідження [4] демонструє приклад моделювання гідрогенізаційного реактора в DWSIM зі включенням кінетики та термодинаміки, що підкреслює практичну придатність програми для промислових розрахунків та реальних застосунків.

Аналіз літератури чітко показує: як математичне, так і імітаційне моделювання наразі є невід'ємними інструментами для розуміння та оптимізації роботи реакторів ідеального витіснення. Ці методи дозволяють інженерам та дослідникам ефективно проектувати та експлуатувати хімічні реактори, забезпечуючи їх високу продуктивність та загальну безпеку виробничих процесів.

Опис дослідження. PIV належить до числа фундаментальних об'єктів хімічної технології, для яких математична модель може бути отримана з базових законів збереження маси та енергії. Головною перевагою моделі є відносна простота математичного опису й гарна узгодженість з фізичними процесами за низки реалістичних припущень [1, 2].

Основні припущення PIV:

- реакційна суміш рухається через реактор у вигляді «поршня» без аксіального змішування;
- повне поперечне перемішування забезпечує однорідність параметрів у будь-якому перетині;

– реакції протікають тільки уздовж осі реактора;
– швидкість реакцій залежить від місцевих умов (температури та концентрації реагентів).

Рівняння матеріального балансу для незмінного об'єму реактора має вигляд:

$$\frac{dC_A}{dV} = -\frac{r_A}{\nu}, \quad (1)$$

де C_A – концентрація реагенту А, кмоль/м³;

V – реакційний об'єм, м³;

r_A – швидкість реакції, кмоль/(м³·с);

ν – об'ємна витрата, м³/с.

Якщо об'ємна витрата ν – стала, можна записати рівняння через час перебування τ :

$$\tau = \frac{V}{\nu}; \quad \frac{dC_A}{d\tau} = -r_A. \quad (2)$$

Для реакції n -го порядку швидкість реакції буде визначатися як

$$r_A = k \cdot C_A^n, \quad (3)$$

де k – константа швидкості реакції. Для реакції першого порядку отримаємо аналітичний розв'язок

$$C_A = C_{A0} \cdot e^{-k\tau}, \quad (4)$$

де C_{A0} – початкова концентрація реагенту.

Енергетичний баланс (для екзотермічної або ендотермічної реакції) описується рівнянням

$$\rho C_p \frac{dT}{d\tau} = \pm Q_p \cdot r_A, \quad (5)$$

де T – температура, °С;

ρ – густина, кг/м³;

C_p – теплоємність, Дж/кг·°С;

Q_p – теплота реакції, Дж.

Ці рівняння дозволяють описати як ізотермічний, так і адіабатичний режим. Для адіабатичного режиму теплообмін з навколишнім середовищем виключають. У складних випадках додають рівняння теплопередачі між реакційною сумішшю та стінками реактора [2, 5].

Модель РІВ надзвичайно корисна для первинних розрахунків та оптимізації конструкцій реакторів, де характерним є умовно рівномірний ламінарний потік без аксіального змішування. У промисловості такі реактори застосовуються для проведення швидких реакцій, наприклад гідрогенізації чи крекінгу [2, 13]. Модель добре відображає основні залежності між параметрами, що підтверджено експериментами та порівнянням із більш складними CFD-моделями [5]. Водночас, для високоточних інженерних розрахунків часто використовують розширення базової моделі:

– моделі дисперсії для урахування аксіального змішування;

– моделі з перемінною швидкістю потоку;

– моделі з урахуванням каталітичних реакцій у пористому середовищі [7, 13].

На практиці інженери застосовують аналітичні рішення як базу для проектування реактора та підбору технологічних режимів його роботи. Знання часової

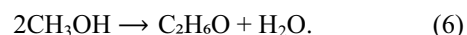
характеристики перебування допомагає визначити оптимальну довжину реактора, температуру та тиск. Розроблені рівняння легко реалізуються у програмних середовищах – на кшталт DWSIM чи Aspen Plus [3, 8]. При цьому математична модель виступає ядром для перевірки точності налаштувань імітаційної схеми. На додачу математичне моделювання дозволяє здійснити аналіз чутливості – оцінку того, як зміни кінетичних параметрів чи витрати вплинуть на кінцеву конверсію реагенту або селективність продукту [2, 13].

Незважаючи на чималу потужність аналітичного апарату, більшість реальних об'єктів очікувано не відповідають ідеальним умовам. Тоді на допомогу приходить імітаційне моделювання, яке фактично базується на наведених рівняннях, але дозволяє враховувати додаткові ефекти: змішування, реальну термодинаміку, багатозначність. Наступний блок цієї статті присвячений побудові імітаційної моделі РІВ та демонструє, як математична база перетворюється у гнучкий комп'ютерний інструмент.

DWSIM дозволяє реалізувати теоретичну модель РІВ, забезпечуючи вкрай високу точність інженерних розрахунків та залишаючи чималий ступінь свободи у налаштуванні низки технологічних параметрів [8].

У цьому дослідженні об'єктом моделювання є отримання диметилового ефіру (C₂H₆O) шляхом дегідратації метанолу (CH₃OH) – з відділенням води (H₂O) у присутності каталізатора (усі у газовій фазі).

Реакція відбувається у газовій фазі і має вигляд:



Ця реакція є ендотермічною та характеризується складною кінетикою, яка залежить від температури, тиску та активності каталізатора [1, 2]. Для імітації використовуватимемо термодинамічний пакет Пенг-Робінсона – це рівняння стану, яке застосовується для точного розрахунку властивостей газових сумішей при середніх та високих тисках, де відхилення від ідеальності є доволі значними [2, 8].

Постановка імітаційної задачі у DWSIM охоплює наступні етапи: вибір компонентів (диметилловий ефір, метанол, вода) та термодинамічного пакету (Peng Robinson), завдання параметрів реакції (учасників, стехіометрії, кінетики) та конфігурування РІВ (режим, об'єм, довжина або діаметр реактора, каталізатор).

Розглянемо приклад на основі таких даних про сировину: витрата – 0,03 кг/с, тиск – 2,5 МПа, температура – 300°С. Вказані характеристики потоку «Живлення РІВ» у моделі наведені на рис. 1.

Математична база моделі у DWSIM формально відповідає класичному рівнянню РІВ:

$$\frac{dC}{dl} = -\frac{r(C,T)}{w}, \quad (7)$$

де l – координата, спрямована уздовж осі реактора;

$r(C,T)$ – швидкість реакції, залежна величина;

w – лінійна швидкість газового потоку.

Для каталітичної реакції кінетика ускладнюється врахуванням активності каталізатора та швидкості

дифузії реагентів у пори носія [1]. Тому наступним кроком задано параметри гетерогенної каталітичної

реакції згідно рівняння (6). Детальні налаштування параметрів реакції наведені на рис. 2.

Рис. 1 – Параметри потоку живлення реактора

Рис. 2 – Параметри гетерогенної каталітичної реакції у РІВ

Для опису кінетики реакції використовується вираз на основі парціальних тисків компонентів:

$$r = k \cdot \left(p_{MeOH} - \frac{p_{DME} \cdot p_W}{p_{DME} \cdot K} \right), \quad (8)$$

де r – швидкість реакції дегідратації метанолу, кмоль/кг(каталізатора)/с;

k – константа швидкості, кмоль/кг(каталізатора)/с/Па;

p – парціальні тиски Па;

$MeOH$, DME та W – метанол, диметиловий ефір і вода, відповідно;

K – константа рівноваги реакції дегідратації.

У свою чергу, згадані константи розраховують як

$$k = -8 - \frac{9680}{T(K)} \text{ та } K = -2,8086 + \frac{3061}{T(K)}. \quad (9)$$

Для використання у DWSIM рівняння (8) слід перетворити до виду, який міститиме лише 2 складові – чисельник та знаменник. Рівняння (8) набуває виду:

$$r = k \cdot \left(p_{MeOH}^2 \cdot K - p_{DME} \cdot p_W \right) / (p_{MeOH} \cdot K). \quad (10)$$

Оскільки DWSIM вимагає кодувати реагенти як $R1$, $R2$ тощо, а продукти реакції – як $P1$, $P2$ тощо, для використання у програмі чисельник з рівняння (10) набуває вигляду (11), а знаменник – вигляду (12):

$$e^{\left(-\frac{9680}{T}\right)} \cdot \left(R1^2 \cdot e^{\left(-\frac{2,8086 + \frac{3061}{T}}{T}\right)} - P1 \cdot P2 \right), \quad (11)$$

$$R1 \cdot e^{\left(-\frac{2,8086 + \frac{3061}{T}}{T}\right)}, \quad (12)$$

де $R1$ – метанол, $P1$ – диметилловий ефір, а $P2$ – вода.

У якості реактора, що моделює режим ідеального витіснення, DWSIM використовує Plug-Flow Reactor (PFR). Перший пуск моделі здійснено з наступними параметрами реактора (рис. 3): об'єм – 5 м³, довжина – 1 м, кількість каталізатора 0,6 кг/м³ з діаметром часток 3 мм і часткою порожнин – 0,3; режим роботи – адіабатичний, без зміни фаз (усі компоненти реакції підтримуються у газоподібному стані).

а

б

в

Рис. 3 – Налаштування реактора:
а – режим роботи; б – габаритні параметри;
в – параметри каталізатора

За замовчуванням при моделюванні схем реактор PFR потребує підключення енергетичного потоку, але у даному випадку (рис. 4) потреби у підведенні енергії до процесу немає, тож його величина дорівнює нулю.

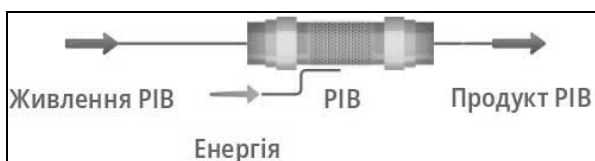


Рис. 4 – Загальний вигляд імітаційної моделі PIB

За результатами першого пуску моделі отримано конверсію метанолу 15,53% (рис. 5, а), тобто його вміст у потоці продукту близько 84,47% (рис. 5, б).

Compound	Conversion (%)
Methanol	15,5292

а

Compound	Amount
Methanol	84,470829
Dimethyl ether	7,7645857
Water	7,7645857

б

Рис. 5 – Результати першого пуску PIB:
а – конверсія метанолу; б – склад продукту реакції

Є очевидним: аби визнати технологічний процес ефективним, конверсія базового компоненту повинна наближатися до максимальної (80-90%). Щоб досягти бажаних показників, до моделі схеми варто додати спеціальний контролер, який матиме відповідну уставку рівня конверсії. У якості параметру, який буде варіюватися, обрано кількість каталізатора, а у якості цільового параметра для оптимізації – конверсію метанолу з бажаним значенням 85% та допустимим відхиленням (похибкою) 5% – рис. 6.

Рис. 6 – Налаштування контролера з уставкою 85(±5)% конверсії метанолу з варіюванням об'єму PIB

Результатом роботи цього контролера є вихід на цільове значення 81,86% конверсії метанолу (рис. 7 а) з пропорційним зростанням частки диметилевого ефіру та води у продукті реактора (рис. 7 б).

Results

Export Profile to New Spreadsheet

General

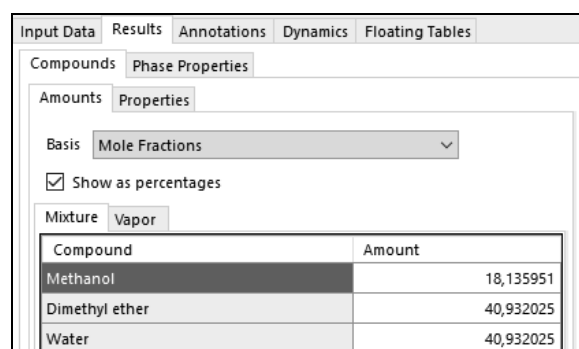
Reactions

Conversions

Concentration Profile

Compound	Conversion (%)
Methanol	81,864

а

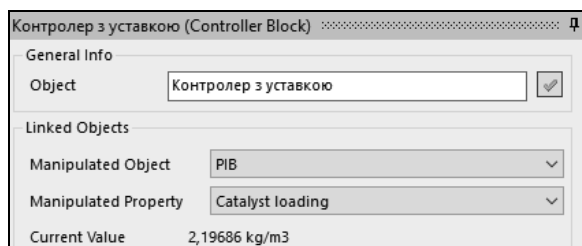


Phase Properties	
Amounts	
Properties	
Basis	Mole Fractions
☒ Show as percentages	
Mixture	Vapor
Compound	Amount
Methanol	18,135951
Dimethyl ether	40,932025
Water	40,932025

б

Рис. 7 – Результати оптимізації реакційного об'єму РІВ:
а – конверсія метанолу; б – склад продукту реакції

Оптимізоване моделлю значення величини маси каталізатора для такого значення конверсії метанолу складає біля 2,2 кг/м³. Результат наведено на рис. 8.



Контролер з уставкою (Controller Block)	
General Info	
Object	Контролер з уставкою
Linked Objects	
Manipulated Object	PIB
Manipulated Property	Catalyst loading
Current Value	2,19686 kg/m3

Рис. 8 – Оптимізована кількість каталізатора

Загальний вигляд розробленої імітаційної моделі РІВ з оптимізованими параметрами подано на рис. 9.

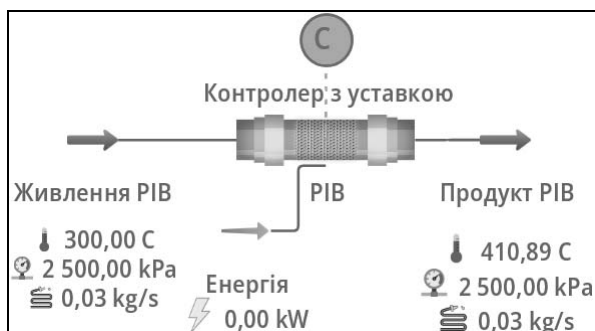


Рис. 9 – Загальний вигляд імітаційної моделі РІВ

Як видно з рис. 9, за визначених параметрів продукт реактора набув температури 410,89 °C, що засвідчує ефективність використання каталізатора.

Обговорення результатів. Наведені результати моделювання реакції дегідратації метанолу у реакторі ідеального витіснення повністю підтвердили високу ефективність поєднання математичних та імітаційних підходів для дослідження та оптимізації хімічних процесів. На підставі моделювання у DWSIM згідно пробних даних встановлено, що вихідна конверсія метанолу за базових параметрів складала лише 15,53 %. Після впровадження контролера з уставкою і регулювання кількості каталізатора від 0,6 кг/м³ до 2,2 кг/м³ вдалося досягти підвищення ступеня конверсії до 81,864 %. Наведені цифри демонструють високу чутливість РІВ до зміни активної поверхні каталізатора та підтверджують необхідність тонкого регулювання технологічних умов.

Порівняльний аналіз математичної та імітаційної моделей засвідчує, що перша здатна забезпечувати швидке отримання оціночних значень конверсії на основі спрощених припущень щодо однорідності потоку та сталої швидкості реакції. Вона залишається корисним інструментом для попереднього розрахунку об'єму реактора, часу перебування та очікуваної продуктивності. Проте у випадках, коли потрібно врахувати реальні фактори – втрати тепла, зміну складу газової фази, обмеження швидкості реакції через дифузію у каталізаторі – математична модель поступається у точності. Натомість, набагато більш гнучка імітація у DWSIM здатна відігравати дуже значну роль на етапі деталізації проєкту та пошуку оптимальних режимів експлуатації.

Отримані значення конверсії відповідають фізично обґрунтованим прогнозам для каталітичних реакторів подібного типу. Крім того, використання контролера у імітаційній моделі чітко показало потенціал автоматизованого керування параметрами процесу у реальному виробництві – такий підхід дозволяє автономно підтримувати заданий рівень перетворення навіть при коливаннях вхідних умов.

Загалом, поєднання аналітичної та імітаційної моделей дозволяє з максимальною ефективністю використовувати обидва підходи: математичний блок швидко окреслює рамки можливих параметрів, тоді як імітація уточнює їх, наближаючи модель до реальності. Це підвищує достовірність розрахунків, скорочує витрати на фізичний експеримент та знижує ризики проєктних помилок.

Висновки. У роботі розглянуто математичне та імітаційне комп'ютерне моделювання РІВ (реактора ідеального витіснення) на прикладі гетерогенної каталітичної реакції розкладання метанолу у газовій фазі. Досліджено аналітичну модель з використанням класичних рівнянь матеріального та енергетичного балансу. У програмі DWSIM реалізовано імітаційну схему, яка враховує більш складні аспекти процесу – вплив термодинаміки, характеристики каталізатора та можливість автоматизованого регулювання з метою пошуку оптимізованого за попередньо визначеним параметром рішення. Результати роботи імітації показали значну відмінність у конверсії при зміні маси каталізатора, що підкреслює практичну цінність

імітаційного моделювання для прогнозування ефективності реактора за різних умов. Доведено, що комбінація математичного та імітаційного підходів забезпечує високий рівень адекватності та точності розрахунків, дозволяє швидко адаптувати модель під виробничі реалії й зменшує залежність від дорогих фізичних експериментів.

Адекватність моделей підтверджується тим, що імітатор реалізує фізично обґрунтовані алгоритми розрахунку потоків та фазових рівноваг. Порівняння результатів імітації з експериментальними даними зазвичай демонструє відхилення у межах кількох відсотків [1, 7, 9]. Це свідчить, що імітаційна модель може ефективно використовуватися у промисловості для прогнозування поведінки реальних реакторів та прийняття рішень щодо його модернізації.

Навіть настільки просту модель РІВ, як була побудована й протестована, можна рекомендувати як надійний інструмент для параметричної оптимізації елементів конструкції, кількості каталізатора та впровадження компонентів систем автоматизованого керування хімічними реакторами у промисловості.

Список літератури / References

1. Levenspiel O. Chemical Reaction Engineering. 3-rd ed. / New York: John Wiley & Sons, 1999. – 688 p. <http://dx.doi.org/10.1021/ie990488g>.
2. Fogler H. S. Elements of Chemical Reaction Engineering (Global Edition). 6-th ed. / Pearson, 2022. – 1080 p.
3. Spoken-Tutorial. Simulating a Plug Flow Reactor (PFR) in DWSIM – Tutorial for DWSIM 4.3, 2021.
4. Buitrago J., Amaya D., Ramos O. Model and Simulation of a Hydrotreatment Reactor for Diesel Hydrodesulfurization in Oil Refining / Contemporary Engineering Sciences, 2017. – Vol. 10. – No. 25. – pp. 1245-1254. <https://doi.org/10.12988/ces.2017.710135>.
5. Adeniyi O.D., Abdulkareem, A., Odigire, J.O. et al. Mathematical Modeling and Simulation of a Non-Ideal

Plug Flow Reactor in a Saponification Pilot Plant / AU Journal of Technology, 2003. – Vol. 7(2). – pp. 65-74.

6. Liotta F., Chatellier P., Esposito G. et al. Hydrodynamic Mathematical Modelling of Aerobic Plug Flow and Nonideal Flow Reactors: A Critical and Historical Review / Environmental Progress & Sustainable Energy, 2013. – Vol. 32(2). – pp. 223-228. <https://doi.org/10.1080/10643389.2013.829768>.
7. Dias J., Silva J. Mathematical modeling of a three-phase trickle bed reactor / Brazilian Journal of Chemical Engineering, 2022. – Vol. 39. – No. 1. – pp. 87-104. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322012000300014>.
8. Medeiros D. DWSIM – Open Source Process Simulator. <https://dwsim.org>
9. Prokopová Z., Prokop R. Modelling and Simulation of Chemical Industrial Reactors / Proceedings of the 23rd European Conference on Modelling and Simulation, 2009. – pp. 1-6. <http://dx.doi.org/10.7148/2009-0378-0383>.
10. Nigam K.D.P., Agrawal S. Modelling of a coiled tubular chemical reactor / Chemical Engineering Journal, 2001. – Vol. 84. – No. 3. – pp. 437-445. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(00\)00370-3](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(00)00370-3).
11. Ranade V.V. Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering / USA, San Diego, CA: Academic Press, 2002. – 452 p. <https://doi.org/10.1002/cjce.5450800222>.
12. Tohidian T., Dehghani O., Rahimpour M.R. Modeling and simulation of an industrial three phase trickle bed reactor responsible for the hydrogenation of 1,3-butadiene: A case study. / Chemical Engineering Journal, 2015. – Vol. 275. – pp. 391-404. <https://doi.org/10.1016/j.ccej.2015.03.035>.
13. Sieniutycz S., Farkas H. Variational and Extremum Principles in Macroscopic Systems / Elsevier, 2010. – 820 p. <http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/39/14/B03>.

Відомості про авторів / About the Authors

Миронов Антон Миколайович (Myronov Anton) – кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів і апаратів, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4250-6259>; e-mail: anton.myronov@khpi.edu.ua

Ільченко Марія Володимирівна (Ilchenko Mariia) – кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів і апаратів, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1353-2108>; e-mail: mariia.ilchenko@khpi.edu.ua

Гапонова Олена Олександрівна (Gaponova Olena) – кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів і апаратів, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9959-355X>; e-mail: olena.gaponova@khpi.edu.ua

Пономаренко Євгенія Дмитрівна (Ponomarenko Yevheniia) – доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів і апаратів, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9878-6093>; e-mail: yevheniia.ponomarenko@khpi.edu.ua

Биканов Сергій Миколайович (Bykanov Serhii) – кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри інтегрованих технологій, процесів і апаратів, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9713-0930>; e-mail: serhii.bykanov@khpi.edu.ua