

АВТОМАТИЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

004.94:681.3.06

ТРИЩ В. Р.*, КОВАЛЮК Д. О.
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

МОДЕЛЮВАННЯ ОБ'ЄКТІВ З РОЗПОДІЛЕНИМИ ПАРАМЕТРАМИ В СЕРЕДОВИЩІ COMSOL MULTIPHYSICS

У статті розглянуто математичне моделювання процесу три-риформінгу метану (TRM) на основі феномену консервативно-збуреної рівноваги (CPE). Запропоновано комплексний підхід до моделювання реактора TRM в середовищі COMSOL Multiphysics з інтеграцією даних, отриманих у DWSIM та MATLAB. Отримано та досліджено модель реактора ідеального витіснення як об'єкту з розподіленими параметрами, що враховує тепломасообмінні процеси та кінетику хімічних реакцій. Продemonстровано досягнення надрівноважних концентрацій цільового продукту у перехідних CPE-режимах, що суттєво підвищує ефективність процесу. На основі отриманих температурних профілів та аналізу розподілу потоків розроблено стратегію автоматизованого керування реактором, спрямовану на підтримку оптимальних умов проведення реакцій. Встановлено, що застосування запропонованого підходу забезпечує стабільний температурний режим без різких перепадів температур по довжині реактора, що сприяє підвищенню продуктивності та енергоефективності процесу. Отримані результати мають практичне значення для автоматизації складних термохімічних систем з розподіленими параметрами та оптимізації їх температурних режимів.

Ключові слова: моделювання, об'єкти з розподіленими параметрами, три-риформінг метану, програмні засоби, COMSOL Multiphysics, автоматизоване керування, енергоефективність

DOI: 10.20535/2617-9741.2.2025.333974

* Corresponding author: trishch1212@gmail.com

Received 11 February 2025; Accepted 20 March 2025

Постановка проблеми. Моделювання температурних режимів у реакторах і теплообмінниках є одним із ключових завдань хімічної інженерії, оскільки безпосередньо впливає на якість продукції, ефективність процесу та його енергоємність. У зв'язку з цим зазначені апарати необхідно розглядати як об'єкти з розподіленими параметрами (ОРП), що дозволяє враховувати особливості тепломасообмінних процесів. Сьогодні існують методи математичного моделювання ОРП та програмні засоби, які їх реалізують. Проте основною проблемою залишається врахування конкретних особливостей об'єкту: його геометрії, матеріалів, хімічних процесів та подальше представлення результату у формі, зручній для систем керування. Типовим прикладом складного для моделювання технологічного об'єкту є зокрема реактор три-риформінгу метану (TRM), що поєднує паровий (SMR) і сухий (DRM) риформінг та часткове окиснення метану (POX) в одну стадію. Актуальність моделювання даного процесу полягає в тому, що він дозволяє не лише зменшити вуглецевий слід, а й покращити економічну доцільність процесу завдяки можливості використання димових газів електростанцій як сировини без додаткових стадій уловлювання вуглецю. Тому розробка ефективних систем для підтримання температурного профілю TRM є актуальним напрямом досліджень.

Метою роботи є підвищення ефективності керування реактором TRM шляхом його моделювання як об'єкту з розподіленими параметрами.

Аналіз попередніх досліджень. Числові методи, такі як метод кінцевих різниць та метод кінцевих елементів, широко застосовуються для моделювання тепломасообмінних процесів. Вони реалізовані в різних програмних пакетах, таких як MATLAB, ANSYS, COMSOL Multiphysics, що дозволяє здійснювати точні розрахунки динаміки процесів у реакторах [1, 2]. Перевагою MATLAB є можливість власної програмної реалізації математичної моделі з подальшим використанням вбудованих алгоритмів (солверів) для її розв'язання. Проте це вимагає ручного введення параметрів процесу, фізичних констант і не дозволяє

реалізувати складну геометрію об'єкту. ANSYS та COMSOL Multiphysics є досить схожими, проте мають особливості в підходах до моделювання та області використання. Зазначимо, що COMSOL відомий своїми мультифізичними можливостями, які дозволяють користувачам поєднувати різні фізичні явища в одній симуляції. Він об'єднує різні фізичні інтерфейси (наприклад, теплопередачу, динаміку рідини, структурну механіку) в одну модель, що полегшує аналіз складних взаємодій. Оскільки моделювання реактора ТРМ вимагає врахування складних фізико-хімічних явищ, включаючи тепловиділення/поглинання, геометричні параметри апарату, а також фізико-хімічні властивості матеріалів, то COMSOL Multiphysics є найбільш перспективним інструментом.

Аналіз об'єкту моделювання. Об'єктом моделювання є реактор ТРМ, який працює в умовах консервативно збуреної рівноваги (СРЕ), що дозволяє досягти кращого виходу продуктів (H_2 та CO) при меншій довжині реактора. Цей ефект особливо важливий з точки зору промислового застосування, оскільки дає можливість розробки нових типів реакторів та режимів роботи з вищою ефективністю. У попередніх дослідженнях [3-5] було продемонстровано ефект консервативно-збуреної рівноваги: екстремум цільового продукту, точку-СРЕ, оптимізацію початкового складу суміші. Відкритий професором Яблонським Г.С. і вперше описаний в роботах [6-8], цей ефект дозволяє підвищити продуктивність хімічних процесів за рахунок оптимізації початкових концентрацій реагентів. Встановлено, що у перехідних СРЕ-режимах хімічна система змінюється від початкового стану, в якому деякі концентрації відповідають рівноважним, до фінального стану повної рівноваги, проходячи через екстремальне значення (максимум або мінімум). Розглянемо детальніше об'єкт керування – реактор ТРМ. Схема процесу ТРМ зображена на рис. 1.

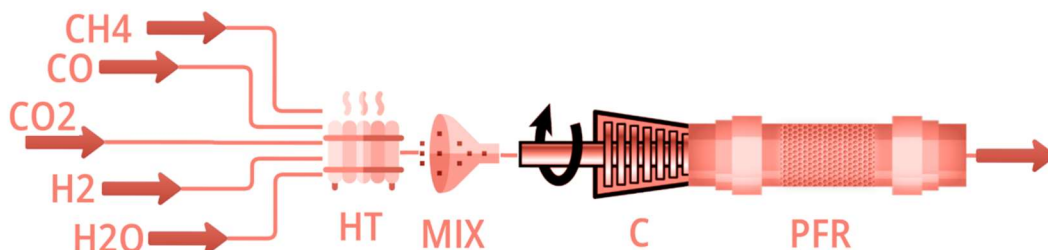


Рис. 1 – Схема три-риформінг метану

де HT – теплообмінник, MIX – змішувач, C – компресор, PFR – реактор ідеального витіснення.

Моделювання процесу ТРМ виконано для реактора ідеального витіснення (РІВ), який демонструє вищу ефективність порівняно з іншими типами реакторів. Кінетичні рівняння сухого та парового риформінгу на нікелевому каталізаторі мають вигляд [5]:

Сухий риформінг:

$$r_1 = k_1 P_{CH_4} \left(1 - \frac{P_{CO}^2 P_{H_2}^2}{P_{CH_4} P_{CO_2} K_{dr}} \right) \quad (1)$$

Паровий риформінг:

$$r_2 = k_2 P_{CH_4} \left(1 - \frac{P_{CO} P_{H_2}^3}{P_{CH_4} P_{H_2O} K_{sr}} \right) \quad (2)$$

де K_{dr} , K_{sr} – константи рівноваги для реакцій сухого та парового риформінгу відповідно; k_1 , k_2 – кінетичні коефіцієнти прямих реакцій для цих процесів.

Моделювання процесу ТРМ в середовищі COMSOL Multiphysics

Для визначення параметрів статичного режиму вхідних потоків було використано програмний комплекс DWSIM, який дозволив розрахувати склад вхідної суміші та теплоносія. Кінетичні рівняння (1) та (2) реалізовано у вигляді скриптів [3]. Розглядалися основні технічні характеристики та параметри об'єкту. На основі цих параметрів було проведено моделювання, яке дозволило визначити розподіл температури в реакторі, напрямок потоку теплоносія і реагенту, а також розподіл температури в секції реактора.

Однак, на відміну від DWSIM, COMSOL Multiphysics надає можливість проводити динамічне моделювання з урахуванням просторового розподілу температури та концентрацій [9, 10], що критично важливо для аналізу розподілених параметрів у хімічних реакторах. Таким чином, об'єднання обох інструментів дозволяє отримати більш точні результати та оптимізувати управління реактором.

Реактор для процесу TPM був змодельований на основі реактора парового риформінгу, який представлений в бібліотеці COMSOL Multiphysics, в тривимірному просторі з урахуванням всіх його конструктивних особливостей. Були задані фізичні властивості матеріалу, такі як теплопровідність, теплоємність та щільність матеріалів, що використовуються в конструкції реактора. Початкові і граничні умови складаються з початкової температури, тиску і витрати теплоносія і реагенту. Більшість основних властивостей матеріалів та реагентів були обрані в бібліотеці COMSOL Multiphysics. На рисунку 2 представлено налаштування хімічних параметрів процесу парового риформінгу метану. Відображено конфігурацію компонентів газової системи, кінетику хімічної реакції та вибір доменів для моделювання.

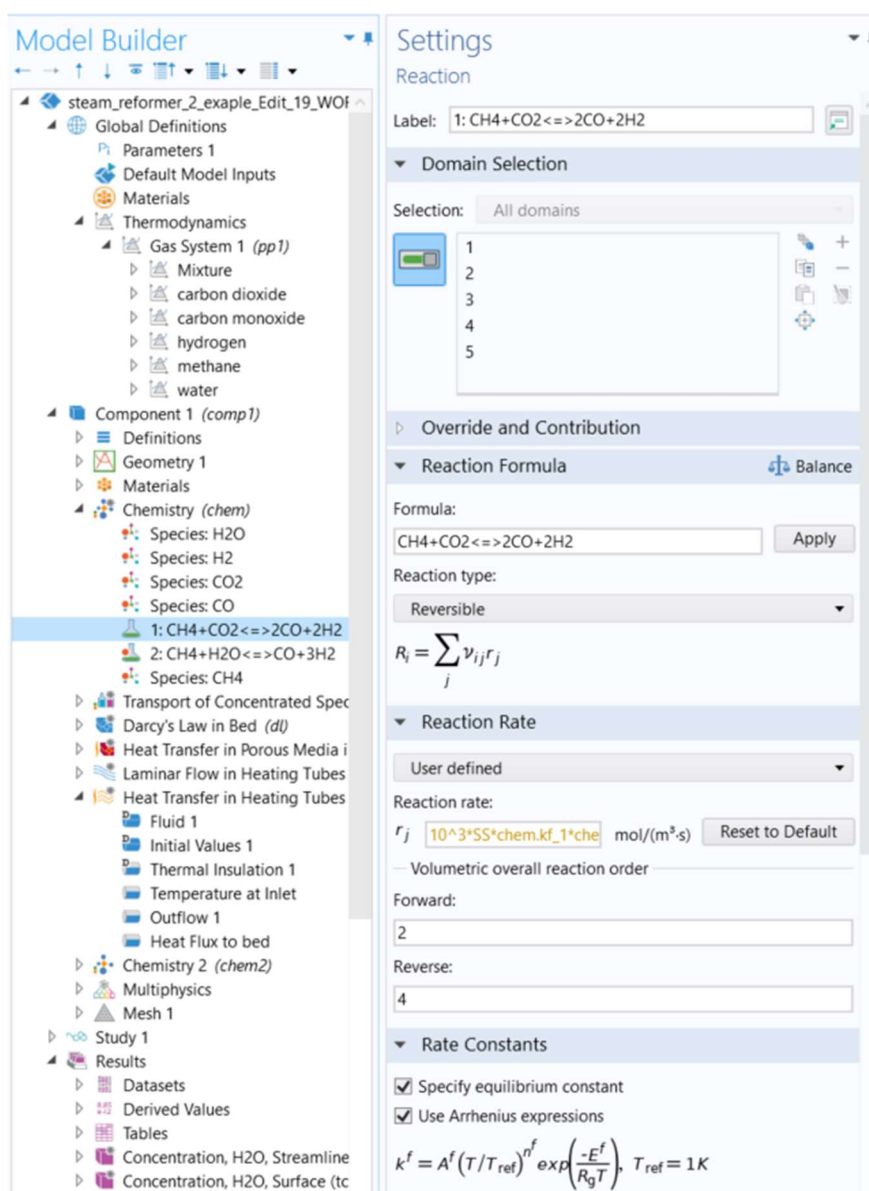


Рис. 2 – Налаштування параметрів процесу в COMSOL Multiphysics

Значення параметрів технологічного процесу в статичному режимі отримано раніше при моделюванні в DWSIM [3-5]. Результати моделювання представлено на рисунку 3. Модель реактора представлена на рисунку 3а, рисунок 3б показує залежність концентрації компонентів від довжини реактора, рисунок 3в – динаміку зміни концентрацій у часі, що демонструє як необхідну довжину реактора, так і час перехідного процесу. На обох рисунках (див. рис. 3 б та в) спостерігається надрівноважна концентрація ключового компонента – H_2 .

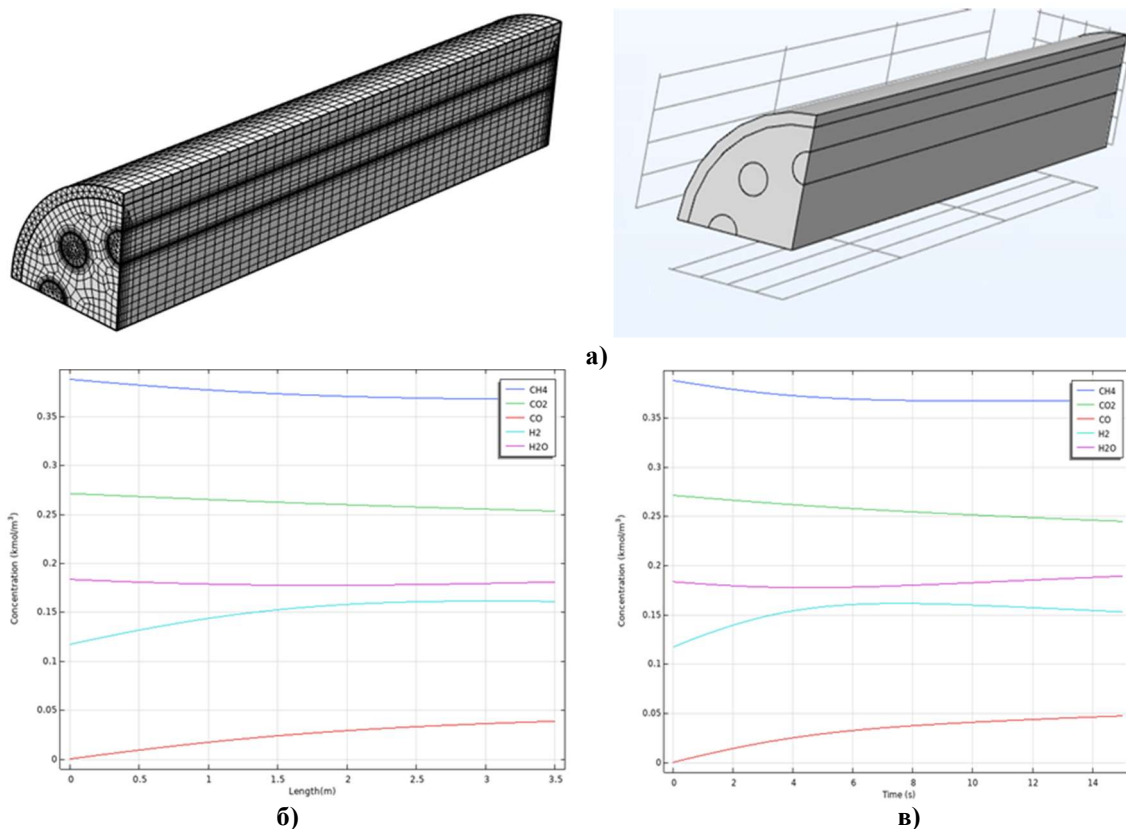


Рис. 3 – Моделювання процесу TPM в COMSOL Multiphysics: а) модель реактора, б) залежність температури від довжини реактора, в) залежність температури від часу

Отримано розподіл потоків та розподіл температури, які наведені на рисунку 4 та 5, відповідно.

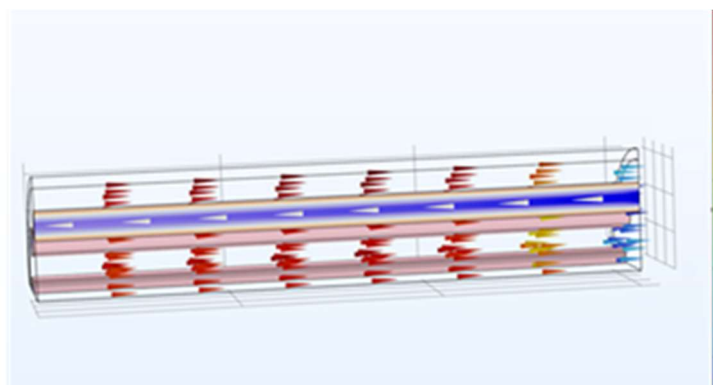


Рис. 4 – Розподіл потоків в реакторі TPM (фрагмент реактора), де синім наведено напрям та швидкість потоків теплоагента, а червоним напрям та швидкість реагентів

Як видно з рис. 4 теплові потоки та теплоагент рухаються в протилежних напрямках, що дозволяє не перегріти реагенти і краще збалансувати температуру в середині реактора. Щоб краще зрозуміти розподіл температури в середині реактора був виконаний його переріз, який зображений на рис. 5 б.

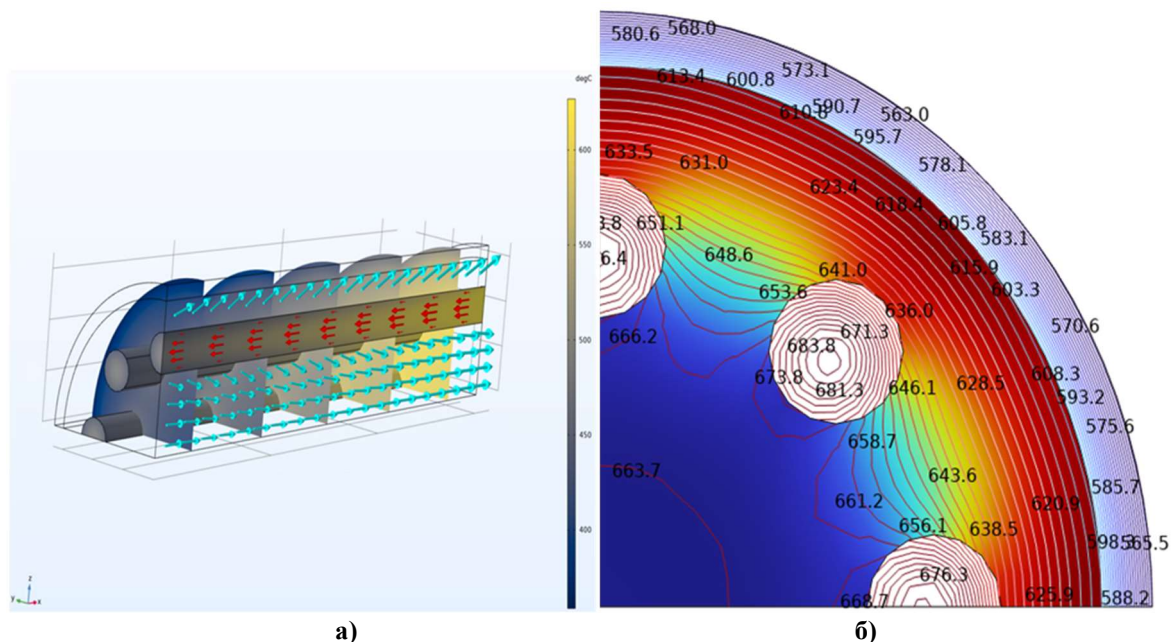


Рис. 5 – Розподіл температури в реакторі TPM, де в трубному просторі протікає теплоагент, а в між трубному просторі – реагенти.

а) розподіл температури по довжині, б) розподіл температури в розрізі реактора

Як видно з рис. 5а, теплові градієнти плавно розподілені вздовж всього реактора, відсутні зони з різким перегрівом або охолодженням, що свідчить про правильно обрану швидкість потоку теплоагенту та реагентів.

Висновки

У статті проведено математичне моделювання реактора три-риформінгу метану як об'єкту з розподіленими параметрами. Запропоновано комплексний підхід до моделювання в середовищі COMSOL Multiphysics з інтеграцією даних, отриманих у DWSIM та MATLAB. Досліджено модель реактора ідеального витіснення, що враховує тепломасообмінні процеси та кінетику хімічних реакцій.

В результаті отримано температурні розподіли теплоносія та газової суміші як по довжині так і в перерізі реактора. Це дозволяє підтримувати оптимальний розподіл температури, уникаючи перегрівання (енергоефективність) так і забезпечити більший вихід цільового продукту завдяки ефекту консервативно-збуреної рівноваги.

Перспективи подальших досліджень

COMSOL є дуже вимогливим до апаратних ресурсів, а сам розрахунок моделі може тривати годинами, що робить неможливим використання в реальному часі в системах автоматичного керування. Тому подальшим кроком є по-перше, отримання аналітичних залежностей, по-друге, використання отриманих результатів моделювання реактору для створення бази даних перебігу процесу. Це дозволить створити набір контрольних точок, що описують зв'язок між вхідними параметрами (температура, концентрація) і відповідними оптимальними керуючими впливами, що значно спростує їх використання у реальних системах керування.

ПОДЯКА. Автори щиро вдячні професору Григорію Яблонському (Університет Вашингтона в Сент-Луїсі, Сент-Луїс, штат Міссурі, США) за цінні консультації, змістовні зауваження та професійні поради, які суттєво сприяли розвитку та вдосконаленню цієї роботи; аспіранту кафедри ТПЗА Михайлу Вільбою та Денісу Консталесу (Гентський університет, Гент, Бельгія) за попередні дослідження явища CPE та консультації з математичного моделювання даного феномену.

Список використаної літератури

1. Kishan R., Singh D., Sharma A. CFD Analysis of Heat Exchanger Models Design Using Ansys Fluent // *Int. J. Mech. Eng. Technol.* 2020. Vol. 11. P. 1–9. doi: <https://doi.org/10.34218/IJMET.11.2.2020.001>.
2. Reddy S.S., Dey T., Haribabu K., Krishnakumar H. Optimization of Shell and Tube Heat Exchangers for Sea Water Cooling by COMSOL Multiphysics // *Int. J. Emerg. Technol. Adv. Eng.* 2012. P. 264–270.
3. Trishch V., Kovalyuk D. Optimization of Technological Parameters of the Methane Tri-Reforming Process Based on the Phenomenon of Conservatively Perturbed Equilibrium // *Bull. NTUU «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute». Ser. Chem. Eng., Ecol. Resour. Sav.* 2024. No. 2. P. 25–32. doi: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2024.307354>.
4. Vilboi M.O., Trishch V.R., Yablonsky G.S. Conservatively Perturbed Equilibrium (CPE)—Phenomenon as a Tool for Intensifying the Catalytic Process: The Case of Methane Reforming Processes // *J. Catal.* 2024. Vol. 14(7). P. 395. doi: <https://doi.org/10.3390/catal14070395>.
5. Trishch V.R., Vilboi M.O., Yablonsky G.S., Kovalyuk D.O. Hydrogen and CO Over-Equilibria in Catalytic Reactions of Methane Reforming // *J. Catal.* 2024. Vol. 14(11). P. 773. doi: <https://doi.org/10.3390/catal14110773>.
6. Yablonsky G.S., Branco D.P., Marin G.B., Constales D. Conservatively Perturbed Equilibrium (CPE) in Chemical Kinetics // *Chem. Eng. Sci.* 2019. Vol. 196. P. 384–390. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.11.010>.
7. Yiming X., Xinquan L., Constales D., Yablonsky G.S. Perturbed and Unperturbed: Analyzing the Conservatively Perturbed Equilibrium (Linear Case) // *Entropy.* 2020. Vol. 22. P. 1160. doi: <https://doi.org/10.3390/e22101160>.
8. Yablonsky G.S., Gorban A.N., Constales D., Galvita V.V., Marin G.B. Reciprocal Relations Between Kinetic Curves // *EuroPhys. Lett.* 2011. Vol. 66. P. 20004. doi: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/93/20004>.
9. Kubakh S., Tsapar V. Simulation of a Shell-Tube Heat Exchanger in the Oil and Gas Industry // *Bull. NTUU «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute». Ser. Chem. Eng., Ecol. Resour. Sav.* 2023. No. 3. P. 9–22. doi: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.3.2023.288245>.
10. Hutovskyi D., Zhuchenko O. Mathematical Modeling of Heat Exchange for Efficient Automated Control Systems // *Bull. NTUU «Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute». Ser. Chem. Eng., Ecol. Resour. Sav.* 2024. No. 2. P. 18–24. doi: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2024.307353>.

Vitaliy Trishch, Dmytro Kovalyuk

MODELING OF DISTRIBUTED PARAMETER OBJECTS IN COMSOL MULTIPHYSICS

The article examines the mathematical modeling of the methane tri-reforming (TRM) process based on the conservative-perturbed equilibrium (CPE) phenomenon. A comprehensive approach to modeling the TRM reactor in the COMSOL Multiphysics environment with integration of data obtained in DWSIM and MATLAB is proposed. A model of a plug flow reactor as an object with distributed parameters was obtained and studied, taking into account heat and mass transfer processes and chemical reaction kinetics on a nickel catalyst. The possibility of achieving super-equilibrium concentrations of the target product in transient CPE modes is demonstrated, which significantly increases the process efficiency.

Based on the obtained temperature profiles and flow distribution analysis, a strategy for automated reactor control has been developed, aimed at maintaining optimal reaction conditions. It was established that the application of the proposed approach provides a stable temperature regime without sharp temperature drops along the reactor, which contributes to increased productivity and energy efficiency of the process. Temperature distributions of the coolant and gas mixture were obtained both along the length and in the cross-section of the reactor. This allows maintaining an optimal temperature distribution, avoiding overheating (energy efficiency) and ensuring a greater yield of the target product due to the conservative-perturbed equilibrium effect.

The numerical methods such as finite difference method and finite element method, widely used for modeling heat and mass transfer processes, are implemented in various software packages, including MATLAB, ANSYS, and COMSOL Multiphysics, which allow for accurate calculations of process dynamics in reactors.

The obtained results have practical significance for the automation of complex thermochemical systems with distributed parameters and optimization of their temperature regimes.

Keywords: modelling, distributed parameter systems, methane tri-reforming, software tools, COMSOL Multiphysics, automated control, energy efficiency

References

1. Kishan, R., Singh, D. and Sharma, A. (2020), "CFD Analysis of Heat Exchanger Models Design Using Ansys Fluent", *International Journal of Mechanical Engineering and Technology*, Vol. 11, pp. 1–9. doi: <https://doi.org/10.34218/IJMET.11.2.2020.001>.
2. Reddy, S. S., Dey, T., Haribabu, K. and Krishnakumar, H. (2012), "Optimization of Shell and Tube Heat Exchangers for Sea Water Cooling by COMSOL Multiphysics", *International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering*, pp. 264–270.
3. Trishch, V., & Kovalyuk, D. (2024), "Optimization of Technological Parameters of the Methane Tri-Reforming Process Based on the Phenomenon of Conservatively Perturbed Equilibrium", *Bulletin of NTUU "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Series "Chemical Engineering, Ecology and Resource Saving"*, No. 2, pp. 25–32. doi: <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2024.307354>.
4. Vilboi, M.O., Trishch, V.R., & Yablonsky, G.S. (2024), "Conservatively Perturbed Equilibrium (CPE)—Phenomenon as a Tool for Intensifying the Catalytic Process: The Case of Methane Reforming Processes", *J. Catal.*, Vol. 14 No. 7, p. 395. doi: <https://doi.org/10.3390/catal14070395>.
5. Trishch, V.R., Vilboi, M.O., Yablonsky, G.S., & Kovalyuk, D.O. (2024), "Hydrogen and CO Over-Equilibria in Catalytic Reactions of Methane Reforming", *J. Catal.*, Vol. 14 No. 11, p. 773. doi: <https://doi.org/10.3390/catal14110773>.
6. Yablonsky, G.S., Branco, D.P., Marin, G.B., & Constales, D. (2019), "Conservatively Perturbed Equilibrium (CPE) in Chemical Kinetics", *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 196, pp. 384–390. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.11.010>.
7. Yiming, X., Xinquan, L., Constales, D., & Yablonsky, G.S. (2020), "Perturbed and Unperturbed: Analyzing the Conservatively Perturbed Equilibrium (Linear Case)", *Entropy*, Vol. 22, p. 1160. doi: <https://doi.org/10.3390/e22101160>.
8. Yablonsky, G.S., Gorban, A.N., Constales, D., Galvita, V.V., & Marin, G.B. (2011), "Reciprocal Relations Between Kinetic Curves", *EuroPhys. Lett.*, Vol. 66, p. 20004. doi: <https://doi.org/10.1209/0295-5075/93/20004>.
9. Kubakh, S., & Tsapar, V. (2023). Simulation of a Shell-Tube Heat Exchanger in the Oil and Gas Industry. *Bulletin of NTUU "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Series "Chemical Engineering, Ecology and Resource Saving"*, (3), 9–22. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.3.2023.288245>
10. Hutovskyi, D., & Zhuchenko, O. (2024). Mathematical Modeling of Heat Exchange for Efficient Automated Control Systems. *Bulletin of NTUU "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Series "Chemical Engineering, Ecology and Resource Saving"*, (2), 18–24. <https://doi.org/10.20535/2617-9741.2.2024.307353>