

# **CHEMICAL BULLETIN**

**2024, Том 7, № 2**

Подписано к публикации: 20.06.2024

# CHEMICAL BULLETIN

*Главный редактор журнала:  
кандидат технических  
наук, доцент*

**Клюев Сергей  
Васильевич**

*Заместитель главного  
редактора:  
кандидат химических  
наук, доцент*

**Саркисян Зара  
Микаэловна**

**«Chemical Bulletin»  
включен в перечень ВАК  
по МБД, РИНЦ (Eli-  
brary.ru)  
и в Международную базу  
данных Chemical  
Abstracts**



**Адрес редакции, издателя:**  
308012,  
г. Белгород, ул. Костюкова 46  
ISSN 2619-0575 (online)  
**E-mail:** chemical@bstu-  
journals.ru  
**Сайт:** <https://cb-journal.ru/>

## **Редакционная коллегия по основным направлениям работы журнала:**

Айзенштадт Аркадий Михайлович (РФ, г. Архангельск) – доктор химических наук, профессор  
Айменов Жубул Талхиевич (Казахстан, г. Тауксхала) – доктор химических наук, профессор  
Алоев Владимир Закиевич (РФ, г. Нальчик) – доктор химических наук, профессор  
Беев Аyes Ахмедович (РФ, г. Нальчик) – доктор химических наук, профессор  
Дейнека Виктор Иванович (РФ, г. Белгород) – доктор технических наук, профессор  
Eleyan Issa Jamal Issa (Палестина, г. Вифлием) – доктор философии (Ph.D.), доцент  
Iyad Alloos (Сирия, г. Дамаск) – кандидат химических наук, доцент  
Колесников Александр Сергеевич (Казахстан, г. Чимкент) – кандидат технических наук, профессор  
Лебедева Ольга Евгеньевна (РФ, г. Белгород) – доктор технических наук, профессор  
Лесовик Валерий Станиславович (РФ, г. Белгород) – доктор технических наук, профессор  
Mahmoud Shakarnah (Палестина, г. Вифлеем) – доктор философии (Ph. D.)  
Мирославов Александр Евгеньевич (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор химических наук, профессор  
Москвин Андрей Вадимович (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор химических наук, профессор  
Оробинская Валерия Николаевна (РФ, г. Пятигорск) – кандидат технических наук, доцент  
Пивинский Юрий Ефимович (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор технических наук, профессор  
Попова Лариса Михайловна (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор химических наук, профессор  
Потапов Алексей Алексеевич (РФ, г. Иркутск) – доктор химических наук, кандидат физико-математических наук, профессор  
Пухаренко Юрий Владимирович (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор технических наук, профессор  
Строкова Валерия Валерьевна (РФ, г. Белгород) – доктор технических наук, профессор  
Трусов Валерий Иванович (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор технических наук, профессор  
Трушников Вячеслав Евстафьевич (РФ, г. Санкт-Петербург) – доктор технических наук, профессор  
Фишер Ханс-Бертрам (Германия, г. Веймар) – Dr.-Ing.  
Хентов Владимир Яковлевич (РФ, г. Новочеркасск) – доктор химических наук, профессор  
Шачнева Евгения Юрьевна (РФ, г. Астрахань) – кандидат химических наук, доцент  
Языев Батыр Меретович (РФ, г. Ростов-на-Дону) – доктор технических наук, профессор  
Ястребинский Роман Николаевич (РФ, г. Белгород) – доктор технических наук, профессор  
Яценко Елена Альфредовна (РФ, г. Новочеркасск) – доктор технических наук, профессор

## Содержание

**Шишанов М.В., Кук Х.Г., Ерёмин В.Б.**

Оптимизация проточной части микрофлюидного канала 4-12

**Сырков А.Г., Кабиров В.Р.**

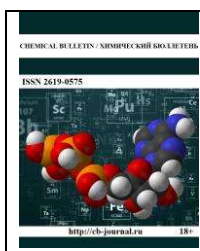
Электрофильно-нуклеофильные и гидрофобные свойства  
поверхностно-модифицированных металлов 13-25

**Турянский В.А.**

Исследование сорбционных свойств диоксида кремния на основе  
вскрышных пород для извлечения красителей из сточных вод 26-42

**Шишанов М.В., Кук Х.Г., Тамбура Б., Чжоу Ю.**

Оптимизация типового процесса конденсации на примере  
синтеза изофорона в микроканале 43-52



Научно-исследовательский журнал «Chemical Bulletin»

<https://cb-journal.ru>

2024, Том 7, № 2 / 2024, Vol. 7, Iss. 2 <https://cb-journal.ru/archives/category/publications>

Научная статья / Original article

УДК 66.011

DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-2-4-12

## Оптимизация проточной части микрофлюидного канала

<sup>1</sup> Шишанов М.В. \*,

<sup>1</sup> Кук Х.Г.,

<sup>1</sup> Ерёмин В.Б.,

<sup>1</sup>Передовая инженерная школа химического инжиниринга и машиностроения,

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

\* Ответственный автор E-mail: [shishanov.m.v@muctr.ru](mailto:shishanov.m.v@muctr.ru)

**Аннотация:** в данной работе рассматриваются особенности оптимизации микрофлюидного канала. Микрофлюидный канал является ключевым компонентом микрореактора, его форма и особенности гидродинамического режима напрямую влияют на успешное протекание проводимых в нём химических реакций. Микрофлюидная отрасль регулирует процессы, протекающие в малых объемах жидкостей – порядка нано литра и меньше. Она применима к различным областям, таким как микроэлектроника, фармацевтика, специальная химия и т.д. В качестве инструмента оптимизации использовали программу вычислительного моделирования Comsol Multiphysics. Она основана на методе конечных элементов, который позволяет в точности моделировать задачи гидродинамического профиля. В данной статье рассмотрена простейшая форма микроканала – канал круглого сечения размером 0.75 мм со смесительной ячейкой. Приведено математическое моделирование процесса, определён критерий оптимальности, адекватный для поставленной задачи. В качестве одного из компонентов данного критерия использовали диодность – критерий, обуславливающий способность пропускать поток в прямом направлении при условии наличия обратного потока. В результате данной работы выявлена наиболее оптимальная форма канала микрореактора, удовлетворяющая требуемым условиям процесса, получены основные гидродинамические параметры и определена зависимость диодности от используемого критерия.

**Ключевые слова:** микроканал, оптимизация, топологическая оптимизация, критерий оптимальности, гидродинамические параметры

**Для цитирования:** Шишанов М.В., Кук Х.Г., Ерёмин В.Б. Оптимизация проточной части микрофлюидного канала // Chemical Bulletin. 2024. Том 7. № 2. С. 4 – 12. DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-2-4-12

Поступила в редакцию: 10 марта 2024 г.; Одобрена после рецензирования: 12 мая 2024 г.; Принята к публикации: 20 июня 2024 г.

## Optimization of the flow part of the microfluidic channel

<sup>1</sup> Shishanov M.V. \*,

<sup>1</sup> Kuk Kh.G.,

<sup>1</sup> Eremin V.B.,

<sup>1</sup> Advanced Engineering School of Chemical Engineering and Mechanical Engineering,

D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology,

\* Corresponding author E-mail: [shishanov.m.v@muctr.ru](mailto:shishanov.m.v@muctr.ru)

**Abstract:** in this paper, the features of microfluidic channel optimization are considered. The microfluidic channel is a key component of the microreactor, its shape and features of the hydrodynamic regime directly affect the successful course of chemical reactions carried out in it. The microfluidic industry regulates processes occurring in small volumes of liquids – on the order of a nano liter or less. It is applicable to various fields such as microelectronics, pharmaceuticals, specialty chemicals, etc. The Comsol Multiphysics computational modeling program was used as an optimization tool. It is based on the finite element method, which allows you to accurately model the problems of the hydrodynamic profile. In this article, the simplest form of a microchannel is considered – a 0.75 mm circular channel with a mixing cell. The mathematical modeling of the process is given, the optimality criterion adequate for the task is determined. As one of the components of this criterion, diodicity was used – a criterion that determines the ability to pass a stream in the forward direction, provided there is a reverse flow. As a result of this work, the most optimal shape of the microreactor channel satisfying the required process conditions was identified, the main hydrodynamic parameters were obtained and the dependence of the diode on the criterion used was determined.

**Keywords:** microchannel, optimization, topological optimization, optimality criterion, hydrodynamic parameters

**For citation:** Shishanov M.V., Kuk Kh.G., Eremin V.B. Optimization of the flow part of the microfluidic channel. Chemical Bulletin. 2024. 7 (2). P. 4 – 12. DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-2-4-12

The article was submitted: March 10, 2023; Approved after reviewing: May 12, 2024; Accepted for publication: June 20, 2024.

## Введение

В настоящее время разработка проточных частей микроканалов обязательно включает в себя этап гидродинамического и топологического ком-

пьютерного моделирования течения жидкости в проточной части канала [1]. Без проведения такой оптимизации с помощью вычислительного моделирования, полученный микрореактор будет не-

конкурентоспособным, а также может не отвечать заданным требованиям к протекаемому в нём процессу. Это может вызвать значительные затраты для проведения серии экспериментов для выявления необходимой формы проточной части. Предлагаемый в данной статье алгоритм по оптимизации проточной части канала позволит значительно сократить проводимые эксперименты, однако полученная модель обязательно должна быть верифицирована – это является завершающим этапом проектирования микрореактора [2].

Цель данной работы – получить оптимальную форму проточной части, используя вычислительное моделирование. Для решения текущей задачи необходимо:

1. Определить необходимые начальные геометрические параметры исследуемого объекта [3].

2. Провести анализ сеточной сходимости твердотельного объекта

3. Численно промоделировать течение жидкости в исследуемом объекте и выявить такие гидродинамические параметры, как градиент скоростей и перепад давлений [4].

4. Выявить критерий оптимальности и функцию оптимизации

5. Численно оптимизировать проточную часть.

#### Материалы и методы исследований

В качестве программы вычислительного моделирования использовали программу Comsol Multiphysics, позволяющую реализовать расчёт с помощью метода конечных элементов.

Для задачи оптимизации проточной части с помощью жиклёров – неподвижных смесителей, находящихся внутри проточной части канала, была использована простейшая ячейка с тремя неподвижными стенками внутри (рис. 1).

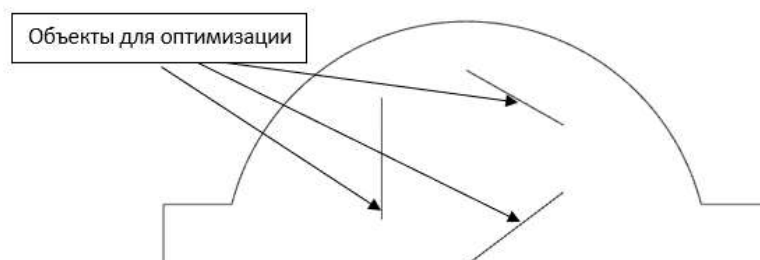


Рис. 1. Простейшая ячейка для оптимизации.

Fig. 1. The simplest cell for optimization.

Для расчёта были выбраны наиболее простые формы жиклёров, их количество обусловлено необходимостью наличия начальной завихрённости потока. Задача оптимизации заключается в усложнении их формы с учётом изменяемости проточной части канала в целях повышения их эффективности.

Comsol Multiphysics для расчёта в микроканале

предлагает модуль Laminar Flow, позволяющий промоделировать ламинарное течение жидкости. Основным уравнением, которое позволяет учесть такое течение, является уравнение Навье – Стокса (1) (выведенное на основе баланса импульса) [5-6]. Уравнение Навье – Стокса позволяет связать скорость ( $w$ ) и абсолютное давление ( $p$ ), с учетом вязкости ( $\mu$ ), плотности среды ( $\rho$ ), нестационарно-

сти, что позволяет рассчитывать параметры модели в 3-х и 4-х мерном пространстве.

$$\rho \left( \frac{\partial w}{\partial t} + w \nabla w \right) + \nabla p + \mu \nabla^2 w = 0 \quad (1)$$

В ряде случаев для упрощения решения можно задавать условие неразрывности (2), которое не всегда выполняется в действительности (плёночное течение может переходить в пробковое и наоборот).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(w\rho) = 0 \quad (2)$$

При моделировании допускается, что на границе впуска скорость постоянна, а давление и скорость экстраполируются на всю расчётную область оптимизации. На границе выпуска статическое давление равно нулю. Для адекватности проведенных расчётов было принято условие отсутствия скольжения вдоль внутренних стенок канала, а ввиду отсутствия явлений кавитации, перепад давлений не ограничивался.

Для расчётов использовали модуль оптимизации формы. Критерий оптимизации использовали следующий (3):

$$\text{Result} = \text{comp1.Di if Re} = 100 \text{ else } 0 \quad (3)$$

При этом,

$$Di = \frac{P_{i2} - P_{j2}}{P_{i1} - P_{j1}} \quad (4)$$

Здесь, уравнение (3) так называемое условное выражение. Оно означает следующее: если Re равно 100, то результат равен comp1.Di, в противном случае результат равен 0. А уравнение (4) представляет собой выражение диодности, или, по-другому, противотока. В нём, P – давление, индекс  $i$  отвечает за распределение значений на пра-

вой границе,  $j$  – для левой. Индексы 1 и 2 обозначают прямоток и противоток соответственно.

Диодность – известный критерий оптимальности, зачастую применяющийся в микроклапанах и электрике. Способность микроклапана пропускать поток в прямом направлении при торможении потока в обратном направлении – это диодность клапана.

Поскольку микроклапаны имеют большее сопротивление потоку в обратном направлении в направлении, отличном от прямого, они производят однонаправленный чистый поток в направлении вниз по потоку даже при наличии противодавления. В оставшаяся часть мгновенного потока – это колебательный всплеск потока. По электрической аналогии, мгновенный ток представляет собой сумму переменного ток (плавный расход) и постоянный ток (чистый расход) [7].

Таким образом, Уравнение (4) представляет собой отношение перепада давления в обратном потоке к падению давления в прямом потоке при одинаковой скорости потока прохождения через канал в двух случаях. Приведённое выше уравнение показывает, что падение давления не зависит от направления потока и снижает значение диодности, следовательно, должно быть сведено к минимуму. Диодность для микроканалов составляет обычно небольшие значения ( $1 < Di < 2$ ) [8].

### Результаты и обсуждения

В результате проведённой сеточной сходимости был выявлен наиболее оптимальный вариант сетки с количеством элементов равном 4949 средним качеством сетки 0,79 (рис. 2).

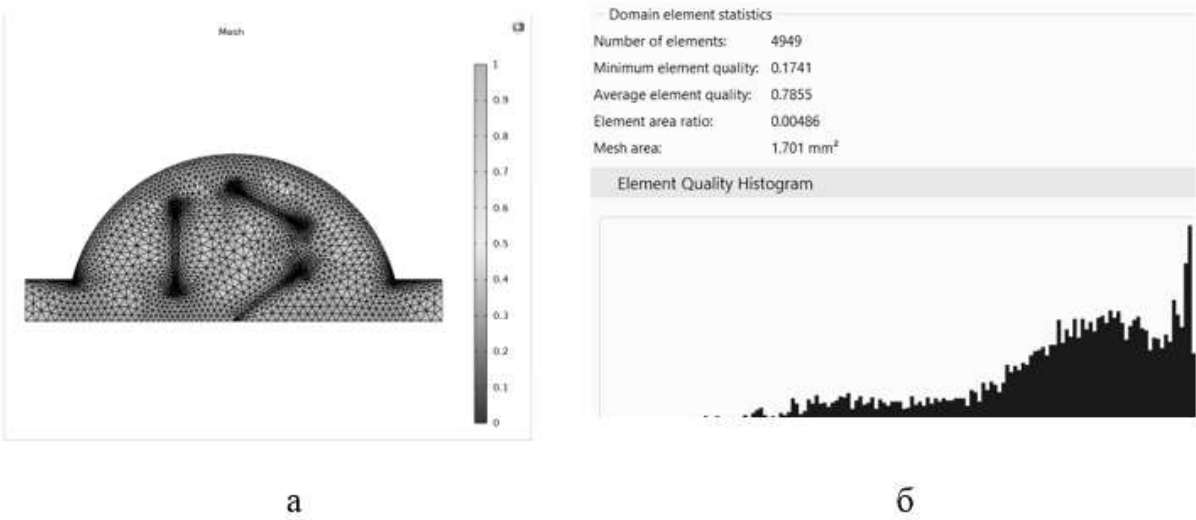


Рис. 2. Результаты сеточной сходимости (а – визуализация, б – параметры сетки).  
Fig. 2. Results of grid convergence (a – visualization, b – grid parameters).

Результаты топологической оптимизации простейшей ячейки проточного канала (частного случая, с рассмотрением жиклёров) представлены ниже (рис. 3), при этом канал симметричен относительно продольной плоскости.

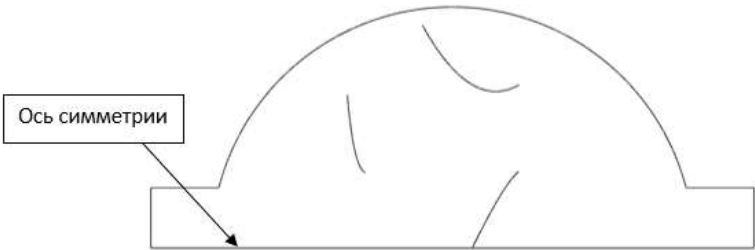


Рис. 3. Жиклёры в оптимизированной ячейке.  
Fig. 3. Jets in an optimized cell.

В этой модели, из-за изменения угла жиклёров, областей с более сильным вращением, потери давления выше при обратном потоке (табл. 1).

Таблица 1

Диодность для микроканала при различных условиях.

Table 1

Diode capacity for a microchannel under various conditions.

|                 |       |      |     |      |
|-----------------|-------|------|-----|------|
| ΔР обратное, Па | 1.7   | 3.4  | 4.8 | 5.7  |
| Диодность       | 1.009 | 1.05 | 1.1 | 1.12 |



Также на рис. 4 представлены графики зависимости критерия Рейнольдса от функции диодичности для двух форм проточной части.

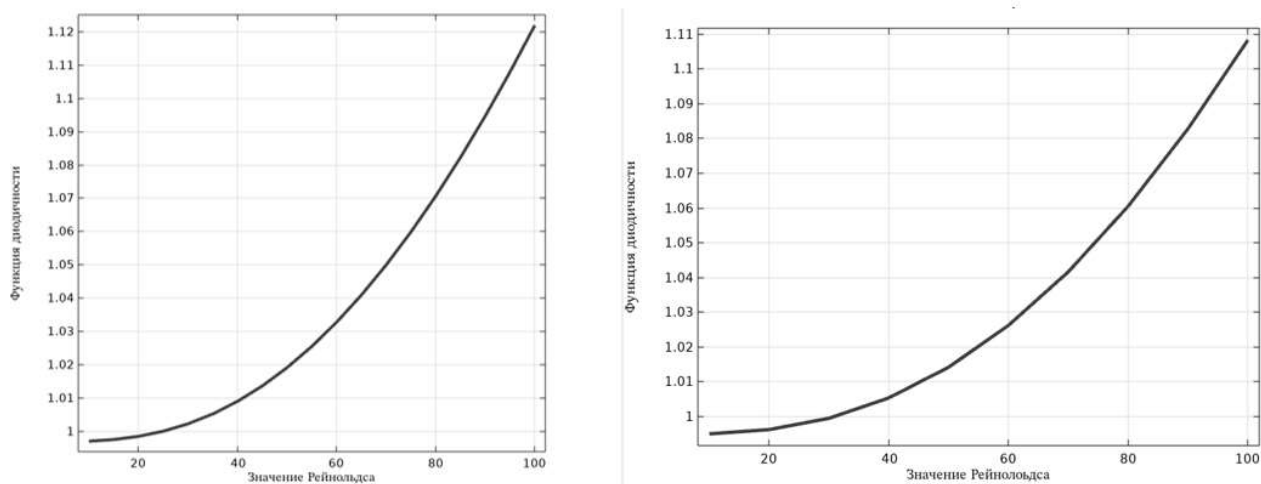


Рис. 4. Зависимость Re от Di (слева – для круглой формы, справа – для прямоугольной).

Fig. 4. Dependence of Re on Di (on the left – for a round shape, on the right – for a rectangular one).

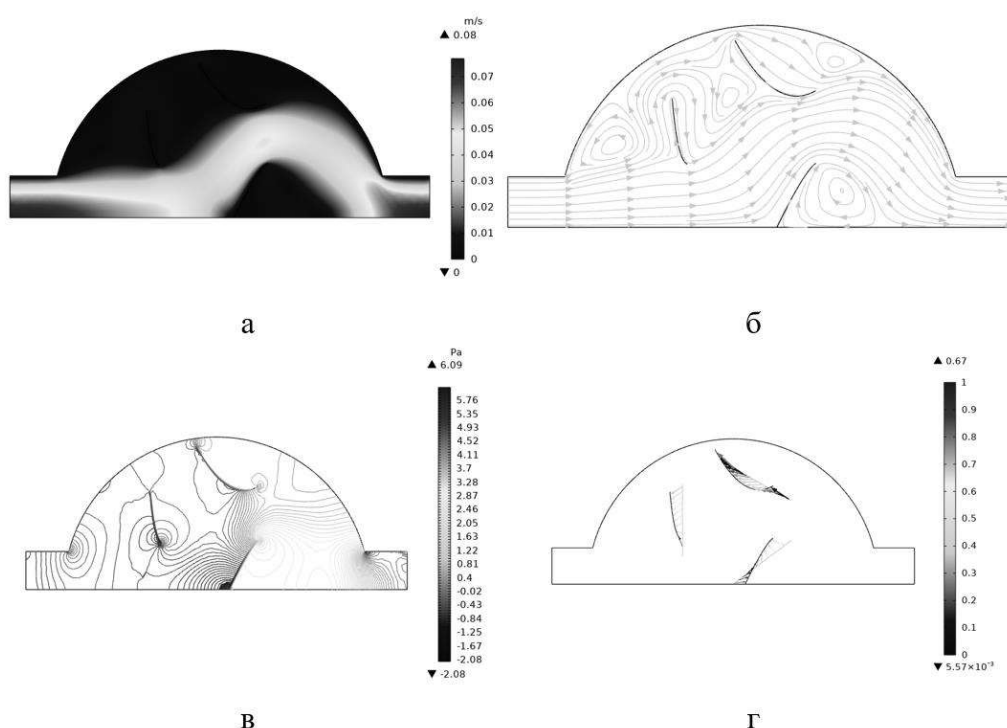


Рис. 5. Гидродинамические параметры (а – градиент скорости, б – контуры скоростей, в – контур давлений, г – оптимизированная форма жиклёров, описываемая кривой 2-го порядка).

Fig. 5. Hydrodynamic parameters (a – velocity gradient, b – velocity contours, c – pressure contour, d – optimized shape of jets described by a curve of the 2nd order).

На рис. 5 предоставлены основные гидродинамические параметры оптимизированной ячейки.

Поле скоростей показало, что при прямом течении струя образуется в выходном канале, обратное течение практически нивелируется, а области с вращением обеспечивают энергетические потери в окружающую область. Поле давления показали, что падения давления в обратном потоке сильнее, чем в прямом.

В этой модели из-за изменения угла междубочковые и главные каналы, влияние потерь в ламинарной струе и создание областей с более сильным вращением,

потери давления выше при обратном потоке.

Данный результат может быть оценен степенью равномерности профиля скорости в поперечном сечении канала реактора. Очевидно, идеальным является равномерное распределение осредненной скорости в поперечном сечении, что возможно лишь в условиях потенциального течения при скольжении потока около стенки [9]. В результате параметрической оптимизации, помимо увеличения скорости сдвига, возникает зона обратных течений.

В результате этого часть смеси совершает движение в обратном направлении. Тем самым увеличивается время ее пребывания в реакторе по сравнению с необходимым. Следовательно, эффективным следует считать тот профиль образующей микрореактора, который кроме обеспечения

наибольшего значения критерия обуславливает еще и наименьший относительный объем смеси, вовлекаемой в обратное течение [10].

### Выводы

Таким образом, в результатах данной работы была получена оптимизированная форма микрофлюидного канала, обеспечивающая необходимые характеристики, а именно, увеличение тангенсального вектора скорости, а также минимизацию обратного потока.

При этом, только около двух третей работы давления теряется, поэтому эффекты вязкости преодолевают эффекты энергии при низком числе Рейнольдса в таких микроканалах. Выбранный параметр оптимизации – число Рейнольдса – оптимален для выбранной геометрии проточной части, поскольку исходя из полученных гидродинамических параметров можно сделать вывод, что именно такая форма полученных жиклёров способствует качественному перемешиванию как при условии прямого течения, так и обратного потока. Наиболее оптимальное значение Рейнольдса – 100.

Кроме этого, при увеличении количества ячеек вследствие разницы давлений диодность увеличивается. На диодность также влияет форма проточной части – например, для прямоугольного сечения при тех же значениях  $Re$  она меньше.

Разработанная модель может быть использована для проектирования и расчета модульной установки проточного реактора.

### Список источников

1. Шишанов М.В., Кук Х.Г., Досов К.А., Яшунин Д.В., Большаков И.А., Морозов Н.В. Моделирование проточных микрореакторов // Современные наукоемкие технологии .Региональное приложение. 2023. № 75 (3). С. 97 – 106.
2. Шишанов М.В., Кук Х.Г., Досов К.А., Яшунин Д.В., Большаков И.А., Морозов Н.В. Смешение в микрофлюидике // Современные наукоёмкие технологии. Региональное приложение. 2023. № 4 (76). С. 103 – 109.
3. Данилов Ю.М., Мухаметзянова А.Г., Кульментьева Е.И., Петровичева Е.А. Исследование турбулентного смешения двухкомпонентной смеси в трубе с периодически меняющимся сечением // Вестник Казанского технологического университета, 2018. № 2. С. 172 – 179.
4. Данилов Ю.М., Дьяконов Г.С., Мухаметзянова А.Г., Бергман А.Н., Ильина И.М. Оптимизация формы проточной части трубчатых турбулентных реакторов // Вестник Казанского технологического университета. 2013. № 1. С. 116 – 124.
5. Mohammadi B., Pironneau O. Applied shape optimization for fluid s// OUP Oxford. 2009.
6. Andrea M., Alfio Q., Gianluigi R. Shape optimization for viscous flows by reduced basis methods and free-form deformation // Numerical methods of fluids. 2012. № 70 (5). P. 646 – 670. DOI: 10.1002/fld.2712
7. Bardell R.L. The diodicity mechanism of Tesla-type no-moving parts valves, Ph.D. Thesis, University of Washington, USA, 2019.
8. Nobaknt A.Y., Shahsavan M., Paykani A., Numerical Study of Diodicity Mechanism in Different Tesla-Type Microvalves // Journal of Applied Research and Technology, 2019. № 11 (6). P. 876 – 885.
9. Wang P., Hu P., Liu L., Xu Z., Wang W., Benoit S. On the diodicity enhancement of multistage Tesla valves // Physics of Fluids, 2023. № 35 (5). P. 113 – 124.
10. Doddamani H., Tapas K.D., Manabu T., Abdus S. Design Optimization of a Fluidic Diode for a Wave Energy Converter via Artificial Intelligence-Based Technique // Arabian Journal for Science and Engineering, 2022. № 48. P. 11407 – 11423.

### References

1. Shishanov M.V., Kuk H.G., Dosov K.A., Yashunin D.V., Bolshakov I.A., Morozov N.V. Modeling of flow microreactors. Modern high-tech technologies. Regional application. 2023. No. 75 (3). P. 97 – 106.
2. Shishanov M.V., Kuk H.G., Dosov K.A., Yashunin D.V., Bolshakov I.A., Morozov N.V. Mixing in microfluidics. Modern science-intensive technologies. Regional application. 2023. No. 4 (76). P. 103 – 109.
3. Danilov Yu.M., Mukhametzyanova A.G., Kulmenteva E.I., Petrovicheva E.A. Study of turbulent mixing of a two-component mixture in a pipe with a periodically changing cross-section. Bulletin of the Kazan Technological University, 2018. No. 2. P. 172 – 179.
4. Danilov Yu.M., Dyakonov G.S., Mukhametzyanova A.G., Bergman A.N., Ilyina I.M. Optimization of the shape of the flow part of tubular turbulent reactors. Bulletin of the Kazan Technological University. 2013. No. 1. P. 116 – 124.

5. Mohammadi B., Pironneau O. Applied shape optimization for fluids. OUP Oxford. 2009.
6. Andrea M., Alfio Q., Gianluigi R. Shape optimization for viscous flows by reduced basis methods and free-form deformation. Numerical methods of fluids. 2012. No. 70 (5). P. 646 – 670. DOI: 10.1002/fld.2712
7. Bardell R.L. The diodicity mechanism of Tesla-type no-moving parts valves, Ph.D. Thesis, University of Washington, USA, 2019.
8. Nobakht A.Y., Shahsavani M., Paykani A., Numerical Study of Diodicity Mechanism in Different Tesla-Type Microvalves. Journal of Applied Research and Technology, 2019. No. 11 (6). P. 876 – 885.
9. Wang P., Hu P., Liu L., Xu Z., Wang W., Benoit S. On the diode enhancement of multistage Tesla valves. Physics of Fluids, 2023. No. 35 (5). P. 113 – 124.
10. Doddamani H., Tapas K.D., Manabu T., Abdus S. Design Optimization of a Fluidic Diode for a Wave Energy Converter via Artificial Intelligence-Based Technique. Arabian Journal for Science and Engineering, 2022. No. 48. P. 11407 – 11423.

### *Информация об авторах*

Шишанов М.В., кандидат химических наук, исполняющий обязанности заведующего кафедрой химической технологии природных энергоносителей и углеродных материалов, <https://orcid.org/0000-0003-2861-5878>, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, [shishanov.m.v@muctr.ru](mailto:shishanov.m.v@muctr.ru)

Кук Х.Г., <https://orcid.org/0009-0005-7115-6760>, Передовая инженерная школа химического инжиниринга и машиностроения, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, д. 9, [kuk.khristofor@inbox.ru](mailto:kuk.khristofor@inbox.ru)

Ерёмин В.Б., ассистент, Передовая инженерная школа химического инжиниринга и машиностроения, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская площадь, дом 9, [eremin.v.b@muctr.ru](mailto:eremin.v.b@muctr.ru)

© Шишанов М.В., Кук Х.Г., Ерёмин В.Б., 2024