

**"ReacModeler": программное обеспечение для моделирования химического реактора
Безруких П.Д., (ИТМО), Хмелёв А.П. (ИТМО), Верхозин М.А. (ИТМО),
Гриценко Е. Ф. (НИ ТПУ)**

**Научный руководитель – кандидат технических наук, Щемелинин В.Л.
(ИТМО)**

Введение. Математическое моделирование химических процессов является ключевым этапом при проектировании и оптимизации в химической технологии. Современные химические реакторы характеризуются сложностью взаимодействия физико-химических процессов, что требует создания специализированного программного обеспечения для их точного анализа. В рамках разработки нового инструмента — программного обеспечения "ReacModeler" — были определены основные задачи, которые должен решать данный продукт, прописаны алгоритмы оптимизации и обоснована общая архитектура системы. Это особенно важно в условиях усложнения технологических процессов и повышения требований к эффективности и экологичности производства [1].

Основная часть. На текущем этапе разработки технического задания для программного обеспечения "ReacModeler" были выполнены следующие ключевые работы:

1. Прописаны алгоритмы оптимизации: Разработаны методики для моделирования процессов на основе ориентированного на уравнения подхода, расчёта термодинамических и кинетических параметров.

2. Определена архитектура системы: Создана модульная структура ПО, которая позволяет гибко адаптировать программу под различные типы реакторов и технологических процессов. Архитектура предусматривает использование библиотек данных по термодинамическим свойствам веществ и химическим реакциям, протекающим для каждого типа реактора.

3. Рассчитана экономическая выгода: Произведена оценка потенциальной эффективности применения "ReacModeler". Было показано, что использование данного программного обеспечения может сократить затраты на физические эксперименты, повысить точность прогнозирования процессов и оптимизировать режимы работы реакторов, что приведет к снижению издержек производства и увеличению выхода целевой продукции.

На данном этапе разработки особое внимание уделяется формированию функциональных требований к программе, которые позволят обеспечить ее универсальность и применимость в различных областях химической промышленности.

Выводы. На основе проведенного анализа были прописаны алгоритмы оптимизации и разработана архитектура программного обеспечения "ReacModeler", предназначенного для моделирования химических реакторов. Рассчитана экономическая выгода от внедрения данного продукта, что подтверждает его высокую перспективность для использования в современных технологических процессах. Дальнейшие работы будут направлены на детальную проработку технического задания и начало практической реализации проекта.

Список использованных источников:

1. Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие. — 2-е изд., перераб. и доп. — СПб.: Издательство «Лань», 2014. — 176 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература). — ISBN 978-5-8114-1533-5.

2. Щербаков И. Н., Любченко С. Н., Туполова Ю. П., Бородкин С. А. Численные методы в физико-химическом эксперименте. Программирование в MS Excel. В 2 ч. Ч. 1: учебное пособие / И.Н. Щербаков, С.Н. Любченко, Ю.П. Туполова, С.А. Бородкин; Южный федеральный университет. — Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2024. — 138 с.
3. Ушева Н. В. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие / Н.В. Ушева, О.Е. Мойзес, О.Е. Митяннина, Е.А. Кузьменко; Томский политехнический университет. — Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. — 135 с.