УДК 004.942+66.061.35

В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, А.О. Ушаков

Метод блочно-компонентных цепей и его перспективы в компьютерном моделировании химико-технологических систем

Рассматривается возможность разработки моделей для аппаратов химической промышленности с использованием метода блочно-компонентных цепей. Предполагается, что разрабатываемые модели будут реплицировать функциональность и поведение реальных аппаратов химической промышленности при проведении химико-технологического процесса. Метод блочно-компонентных цепей (МБКЦ) посредством использования неоднородных векторных связей позволяет создавать модели для различных сложных химико-технологических систем, включая устройства, в которых протекают сложные физико-химические и массообменные процессы. Разработка подобных моделей может помочь в оптимизации и автоматизации работы аппаратов химической промышленности, а разработанные на основе метода блочно-компонентных цепей модели химических аппаратов могут быть использованы для обучения или тренировки операторов технологических установок при проведении симуляции различных сценариев эксплуатации промышленного оборудования. В работе приведены схемы и алгоритмы работы разработанного условного объекта-блока химико-технологической системы, которые используются при создании моделей в среде моделирования МАРС (моделирование и автоматический расчет систем) для автоматизации моделирования химико-технологических процессов с учетом оказываемых на объект воздействий.

Ключевые слова: химический аппарат, химическая промышленность, метод блочно-компонентных цепей, моделирование и анализ, автоматизация.
DOI: 10.21293/1818-0442-2024-27-4-116-121

В настоящее время одним из актуальных направлений развития и совершенствования технологии различных физико-химических процессов является разработка и практическое применение моделей реальных аппаратов химического производства [1–5]. Помимо непосредственной возможности повышения уровня автоматизации и управления технологическим процессом, подобные модели могут выступать в качестве основы для разработки цифровых двойников, используемых в качестве тренажеров для операторов технологического оборудования, позволяя им подготовиться к различным сценариям без риска повреждения реального оборудования [6, 7].

В данной работе рассматривается разработка моделей аппаратов и систем химической промышленности в среде моделирования МАРС (моделирование и автоматический расчет систем) в формате метода блочно-компонентных цепей (МБКЦ), являющемся развитием метода компонентных цепей (МКЦ) [6] с неоднородными векторными связями [8–10]. В основе разработанной модели конкретного технологического аппарата, представленного в виде блока с входящими и выходящими вещественными многокомпонентными потоками, лежит учет влияния различных параметров и переменных процесса: скорости потоков, концентрации веществ в потоках, температуры процесса и др. [9].

Перед созданием модели блока технологического аппарата необходимо структурировать и алгоритмизировать его работу в рамках рассматриваемого метода блочно-компонентных цепей. В связи с этим появляется проблема структурного и визуального описания и представления разрабатываемых моделей, которую предлагается решить путем построения соответствующей программно-алгоритмической структуры для последующей интеграции в среду моделирования МАРС.

Успешная реализация данного метода возможна за счет нескольких преимуществ, проявляющихся при его применении для моделирования сложных химико-технологических систем (ХТС). Среди основных преимуществ можно выделить простую программную реализацию различных физико-химических процессов посредством использования неоднородной векторной связи, возможность интеграции метода в отечественное программное обеспечение, а также наличие собственной базы данных физико-химических параметров и коэффициентов для различных физико-химических процессов.

Основы метода блочно-компонентных цепей

МБКЦ принадлежит к универсальным методам компьютерного моделирования сложных мультифизических объектов и систем с информационными, энергетическими и многокомпонентными вещественными потоками. Он отличается объектно-ориентированным подходом с возможностью моделировать сложные системы при учете информационно-энергетических и неоднородных векторных связей. Элементы модели блока могут иметь различные свойства и природу, соединяясь в общую комплексную модель [8, 9]. При использовании данного метода появляется возможность автоматического формирования моделей блоков с учетом геометрического, топологического, физико-химического и математического аспектов. Посредством геометрического аспекта модель блока описывается в схемном топологическом редакторе при формировании компьютерной модели исследуемого технологического оборудования, а также на визуальном уровне

для визуализации результатов вычислительных экспериментов. При помощи топологического аспекта дается определение связям в моделируемой химико-технологической системе с рассматриваемым блоком и многокомпонентными вещественными потоками. Физико-химический аспект позволяет описать процессы физико-химической природы с учетом влияния различных параметров и условий проведения процесса на его протекание. Математический аспект предполагает математическое описание рассматриваемого процесса и алгоритма его проведения.

На кинетику процесса в любом аппарате химико-технологической системы влияют параметры его геометрии, теплопроводности, а также свойства и характеристики веществ, составляющих входящие в аппарат потоки [11–14], поэтому форма моделей блоков и их структура могут видоизменяться в соответствии с условиями проведения процесса.

Универсальное вычислительное ядро [15], лежащее в основе программного комплекса МАРС, обеспечивает автоматизированный анализ химико-технологических систем с моделями блоков технологических аппаратов и устройств.

Особенности и отличительные признаки МБКЦ

По сравнению с ранее представленным методом компонентных цепей МБКЦ обладает рядом преимуществ. Использование МБКЦ позволяет моделировать не только отдельный аппарат или устройство, но также учитывать влияние многокомпонентных вещественных потоков. Каждый компонент-вещество, в соответствии со справочными данными, имеет собственное наименование и параметры. С учетом особенностей протекания моделируемого процесса, который может иметь физическую, химическую или физико-химическую природу, осуществляется соответствующая классификация блока. Модель каждого блока предполагает наличие уравнений материального и теплового баланса, а также уравнений, описывающих тепло- и массоперенос.

В процессе моделирования учитывается зависимость кинетики процесса, а также характеристик тепло- и массопередачи как от параметров блока, так и от параметров и переменных компонент потока. Одним из главных отличий от МКЦ в данном случае будет выступать разбиение операции параметризации в процессе автоматизированного эксперимента на первичную и вторичную. Первичные переменные многокомпонентного вещественного потока входят в состав вектора-решения и представляют собой данные, полученные в процессе расчета в соответствующих моделях. Вторичные переменные находятся в зависимости от первичных и могут быть вычислены непосредственно через них. Для расчета вторичных переменных реализуется библиотека функций расчета. Подобная классификация переменных на первичные и вторичные позволяет существенно сократить размер вычислительной модели, формируемой и решаемой универсальным вычислительным ядром, оптимизируя процесс вычислительного эксперимента и позволяя уменьшить время на анализ всех ХТС.

В МБКЦ включаются методики решения уравнений массопереноса, теплопередачи, а также уравнений состояний (уравнения Менделеева–Клапейрона, Пенга–Робинсона, Соава–Редлиха–Квонга и др.), необходимых для расчета коэффициентов уравнений модели.

Использование неоднородной векторной связи при разработке моделей химико-технологических систем

Использование неоднородной векторной связи [9], являющейся основным теоретическим положением МБКЦ, дает возможность формировать и анализировать обширный набор компьютерных моделей химико-технологических систем, а также осуществлять их декомпозицию на составляющие ее отдельные блоки, представленные моделями-заменителями реального технологического аппарата [8].

При реализации в среде моделирования МАРС модели объекта со сложными процессами, протекающими в теплообменных и массообменных аппаратах, возможно образование дополнительных подцепей, состоящих из компонентов с неоднородными векторными связями и включающих в себя модели устройств измерения и исполнения. Значения выходных переменных данных блоков будут определяться в ходе проведения автоматизированного вычислительного эксперимента, алгоритм которого представлен на рис. 1.

Формирование математической модели при помощи МБКЦ осуществляется через соединение нескольких неоднородных векторных связей, образующих узел, в соответствие которому ставятся потенциальные переменные (например, давление, температура, концентрации веществ). Также в каждом узле выполняется основной топологический закон, согласно которому алгебраическая сумма потоковых переменных (массовых, объемных или мольных расходов, тепловых потоков, энтальпий, энтропий), входящих в каждый из узлов, в любой момент времени равна нулю. Количество данных переменных будет определяться структурой неоднородной векторной связи соответствующего векторного узла. Каждому узлу в соответствие ставится некоторое число топологических уравнений, равное числу энергетических связей, участвующих в коммутации.

При разработке модели блока химико-технологического аппарата с подключенными моделями блоков исполнительных и измерительных устройств происходит образование узлов N_v, описывающих процессы обмена информацией о многокомпонентных вещественных потоках в технологической системе. Данные узлы содержат информацию об энергетических S_{E1}, S_{E2},…, S_{En} и информационных S_{I1}, S_{I2},…, S_{Im} связях компонентов. Каждый подобный узел N_v может быть автоматически разбит на n энергетических узлов N_e и m информационных узлов N_I

соответственно. Векторные узлы $\mathbf{n}_n$, $\mathbf{n}_{n+i}$ и ветви $\mathbf{b}_n$ входят в общие совокупности соответствующих им множеств векторов $\mathbf{n}_k$ и $\mathbf{b}_k$. Каждому узлу и ветви из множеств $\mathbf{n}_k$ и $\mathbf{b}_k$ соответствуют свои информационные S_{Ii} и энергетические S_{En} связи, образующие в совокупности единую неоднородную векторную связь $\mathbf{S}_{Vk}$.

Рис. 1. Алгоритм автоматизированного эксперимента в среде моделирования МАРС

Общий вид структуры неоднородной векторной связи $\mathbf{S}_{Vk}$ может быть представлен в виде разветвленной сети ветвей и узлов, входящих в энергетические или информационные связи (рис. 2). Зависимость ориентации ветви-вектора $\mathbf{b}_k$ относительно узла-вектора $\mathbf{n}_k$ описывается через инцидентность η. Отношение инцидентности положительно (η^+), если ветвь ориентирована в сторону узла, и отрицательно (η^-) в обратном случае.

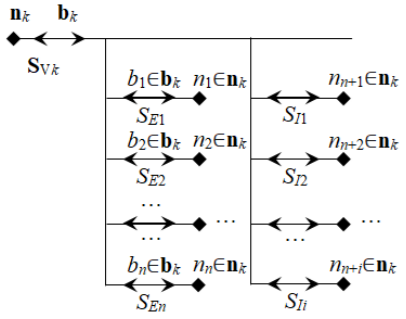

Рис. 2. Структура неоднородной векторной связи

Использование метода блочно-компонентных цепей применительно к разработке имитационной компьютерной модели химико-технологического аппарата предполагает, что рассматриваемый компонент-модель имеет заданное число связей на входе и выходе, характеризующих различные физико-химические процессы в соответствующих потоках, которые зависят от свойств самих потоков и от свойств аппарата. Такие связи будут образованы набором узлов и ветвей на входе $\{n_{\text{ВХ. }1}, b_{\text{ВХ. }1}, \ldots, n_{\text{ВХ. }n1}, b_{\text{ВХ. }n1}\}$ и выходе $\{n_{\text{ВЫХ. }1}, b_{\text{ВЫХ. }1}, \ldots, n_{\text{ВЫХ. }n2}, b_{\text{ВЫХ. }n2}\}$ соответственно.

Предполагается, что вещественные потоки могут образовываться одним веществом или несколькими веществами, называемыми далее *компонентами*. Если поток образован только одним компонентом, то он будет называться однокомпонентным и концентрация этого компонента в потоке приравнивается к единице, а концентрации иных компонентов – к нулю. В случае, когда вещественный поток представлен совокупностью нескольких компонентов, то содержание отдельного компонента может быть представлено как его концентрация в рассматриваемом потоке. Сумма концентраций компонентов в каждом потоке рассматриваемой модели химико-технологической системы в каждый момент времени равна 1.

Процессы, протекающие в химико-технологической системе с рассматриваемым аппаратом, могут быть описаны математически в форме уравнений с учетом переменных связей, образующих вектор (1):

$$\mathbf{V}_{\text{K_XTC}} = \left[\mathbf{P}_{\text{K}}, \mathbf{G}_{\text{K}}, \mathbf{T}_{\text{K}}, \mathbf{Q}_{\text{K}}, \mathbf{C}_{\text{K}}\right]^T, \qquad (1)$$

где $\mathbf{P}_{\text{K}}$ – вектор давлений; $\mathbf{G}_{\text{K}}$ – вектор расходов вещества; $\mathbf{T}_{\text{K}}$ – вектор температур; $\mathbf{Q}_{\text{K}}$ – вектор тепловых потоков; $\mathbf{C}_{\text{K}}$ – вектор концентраций компонентов (К) в связях рассматриваемого аппарата с другими аппаратами.

Общий вид структуры блока химико-технологического аппарата при его программно-алгоритмической реализации в среде моделирования МАРС может быть представлен в виде схемы из нескольких секций (рис. 3).

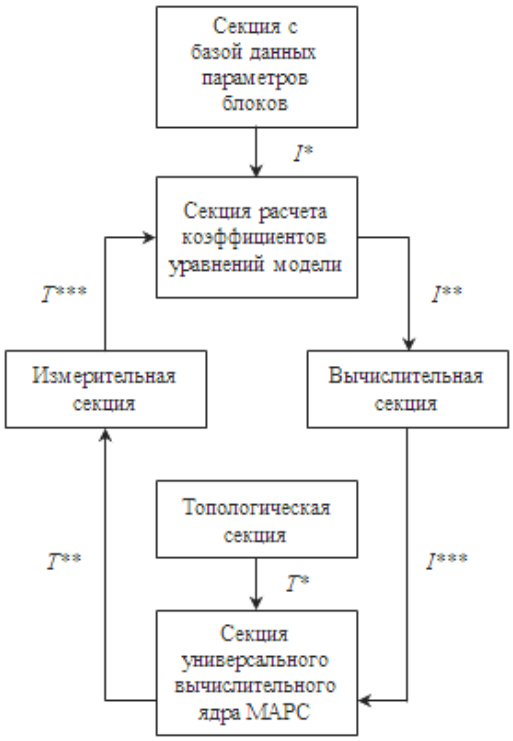

Рис. 3. Обобщенная структурная схема расчета блока химико-технологического аппарата: *I** – информация о физико-химических свойствах веществ; *I*** – информация о значениях параметрических коэффициентов; *I**** – информация об уравнениях; *T** – передача топологических характеристик; *T*** – передача вектора решений; *T**** – передача значений переменных связей основных параметров

Большая часть информации рассматриваемого блока, включая данные о свойствах веществ и параметры протекающего химико-технологического процесса для последующего расчета характеристик компонента, может быть занесена в единую базу данных, откуда в дальнейшем она будет передаваться в секцию расчета коэффициентов вычислительной модели рассматриваемого блока.

В секции расчета коэффициентов уравнений модели осуществляется вычисление, изменение и уточнение значений коэффициентов на основе различных методик обработки результатов компьютерного моделирования и данных измерительного блока.

Посредством топологической секции производится передача вычислительному ядру совокупности топологических данных взаимосвязанных компонентов в формате соотношений с топологическими координатами компонентной цепи, включая топологические характеристики интегрируемого в нее нового блока. Переданные топологические данные используются для автоматического формирования топологических уравнений анализируемой модели химико-технологической системы.

В вычислительной секции осуществляется непосредственное формирование уравнений модели блока химико-технологического аппарата на основе значений его параметров и коэффициентов. Информация о полученных уравнениях передается далее в вычислительное ядро МАРС.

На основе данных, полученных из топологической и вычислительной секций универсальным вычислительным ядром МАРС, формируется и решается общая система уравнений модели исследуемой химико-технологической системы. Результатом этого шага является общий вектор решений цепи.

В измерительную секцию включены функции расчета вторичных характеристик многокомпонентного потока на основе значений первичных характеристик, входящих в вектор решения модели. С помощью данной секции из общего вектора решения цепи осуществляется выбор значений необходимых параметров процесса для всех связей блока химико-технологического аппарата и их вывод на компоненты обработки и визуализации результатов решения модели химико-технологической системы.

Перспектива развития МБКЦ

Использование современных вычислительных инструментов и программных комплексов дает возможность активно развивать направление разработки моделей для различного технологического оборудования химической промышленности, что имеет большой потенциал в области оптимизации и автоматизации технологий, используемых на конкретных предприятиях. Разработка моделей реального технологического оборудования позволит повысить эффективность его эксплуатации, а разработанные на их основе цифровые аналоги будут обладать высоким потенциалом для реализации компьютерных тренажеров, выступая в качестве платформ для обучения операторов работе с производственным оборудованием и проведения различных экспериментов.

Реалистичность данного подхода была рассмотрена в настоящей работе на примере разработки и реализации алгоритмов расчета моделей химико-технологических систем в формате метода блочно-компонентных цепей в среде моделирования МАРС. Данный программный комплекс позволяет автоматизировать моделирование различных технологических процессов с учетом варьируемых параметров, оказывающих непосредственное влияние на производительность процесса.

Предложенный метод обладает рядом преимуществ перед ранее разработанным методом компонентных цепей, в том числе за счет расширенной классификации на первичные и вторичные переменные, позволяющей оптимизировать процесс вычислительного эксперимента. Использование неоднородной векторной связи дает возможность создавать компьютерные модели химико-технологических аппаратов и устройств, позволяя анализировать и прогнозировать их производительность при различных условиях эксплуатации.

В дальнейшем предполагается, что МБКЦ будет использоваться для построения и анализа компьютерных моделей химико-технологических систем ядерно-топливного цикла [16], в том числе с использованием уже имеющихся наработок при разработке компьютерных моделей сложных химико-технологических систем газоперерабатывающей промышленности на основе МКЦ [8].

Литература

1. Kiziltas H. The Energy and Exergy Analysis of the Reactor Unit of Boric Acid Production Process with ChemCAD Simulation // Brilliant Engineering. – 2021. – Vol. 3, No. 2. – P. 1–6. DOI: 10.36937/ben.2022.4617.

2. Мефедова Ю.А. Моделирование системы регулирования давления пара в деаэраторе АЭС в SIMINTECH / Ю.А. Мефедова, А.В. Бизов // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. – 2022. – № 2. – С. 628–633. DOI: 10.24412/2071-6168-2022-2-628-633.

3. Dynamic Simulation of an Oil and Gas Plant Using Aspen-HYSYS®: A Real Start-Up Process / R. Valdés, C. Sotelo, F. Muñoz-Torres, A. Favela-Contreras // Arabian Journal for Science and Engineering. – 2024. – No. 2. – P. 229–241. DOI: 10.1007/s13369-024-09051-0.

4. Sidi-Yacoub I. ASPEN-HYSYS Simulation of AREW's Multi-Stage Adiabatic Reactor with Inter-Stage Quenching for Methanol Synthesis / I. Sidi-Yacoub, F. Ahmed, K. Ikram // Improved Oil and Gas Recovery. – 2023. – Vol. 7. – P. 1255. DOI: 10.14800/iogr.1255.

5. Santos Bartolome P. A comparative study on Aspen Hysys interconnection methodologies / P. Santos Bartolome, T. Van Gerven // Computers & Chemical Engineering. – 2022. – Vol. 162. – P. 107785. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2022.107785.

6. Дмитриев В.М. Автоматизация моделирования промышленных роботов / В.М. Дмитриев, Л.А. Арайс, А.В. Шутенков. – М.: Машиностроение, 1995. – 304 с.

7. Кафаров В.В. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств: методология проектирования и теория разработки оптимальных технологических схем / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин, В.Л. Перов. – М.: Химия, 1979. – 320 с.

8. Дмитриев В.М. Среда многоуровневого компьютерного моделирования химико-технологических систем / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2017. – 332 с.

9. Дмитриев В.М. Принципы построения моделей сложных технологических объектов с неоднородными векторными связями / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, С.К. Важенин // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. – 2014. – Т. 41, № 1. – С. 104–111.

10. Кочергин М.И. Структура многоуровневой модели механической системы для 3D-визуализации результатов моделирования / М.И. Кочергин, А.А. Дрозд // Информационные технологии в моделировании и управлении: подходы, методы, решения: матер. VI Всерос. науч. конф. с междунар. участием, Тольятти, 18–20 апреля 2023 г. – Тольятти: Тольят. гос. ун-т, 2023. – С. 72–80.

11. Математическое моделирование и анализ функционирования цилиндрического пиролизного реактора с радиальным нагревом / А.В. Митрофанов, О.В. Сизова, Н.С. Шпейнова, В.А. Катюшин // Вестник Ивановского гос. энергет. ун-та. – 2021. – № 5. – С. 60–67. DOI: 10.17588/2072-2672.2021.5.060-067.

12. Численное моделирование гиперзвукового обтекания полусферы с учетом неравновесных физико-химических процессов в высокотемпературном воздухе / К.Н. Волков, В.А. Гимадиев, Ю.В. Добров, А.Г. Карпенко // Вычислительные методы и программирование. – 2022. – Т. 23, № 3. – С. 248–274. DOI: 10.26089/NumMet.v23r316.

13. Еникеева Л.В. Метод регуляризации Тихонова при решении обратных задач химической кинетики / Л.В. Еникеева, И.М. Губайдуллин, Д.А. Дубовцев // Вестник Башкирского ун-та. – 2022. – Т. 27, № 3. – С. 643–649. DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2022.3.28.

14. Математическое моделирование процесса диффузии и кинетики массопереноса веществ в различных средах / А.А. Ганюков, И.А. Кадырова, А.С. Кадыров, Д.Д. Маратов // Междунар. журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2021. – № 4. – С. 86–91.

15. Дмитриев В.М. Архитектура универсального вычислительного ядра для реализации виртуальных лабораторий / В.М. Дмитриев, А.В. Шутенков, Т.В. Ганджа // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. – 2004. – № 2. – С. 24–28.

16. Компьютерная модель экстракционного реактора идеального смешения в формате метода компонентных цепей с неоднородными векторными связями / А.О. Ушаков, Т.В. Ганджа, В.М. Дмитриев, П.Б. Молоков // Компьютерные исследования и моделирование. – 2024. – Т. 16, № 3. – С. 599–614. DOI: 10.20537/2076-7633-2024-16-3-599-614.

Дмитриев Вячеслав Михайлович
Д-р техн. наук, проф. каф. компьютерных систем
в управлении и проектировании (КСУП)
Томского государственного ун-та
систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР)
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID: 0000-0002-1089-6993
Тел.: +7 (382-2) 70-15-15
Эл. почта: dmitriewvm@gmail.com

Ганджа Тарас Викторович
Д-р техн. наук, проф. каф. КСУП ТУСУРа
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Тел.: +7 (382-2) 41-39-15
Эл. почта: gandgatv@gmail.com

Ушаков Александр Олегович
Аспирант отд. ядерно-топливного цикла (ОЯТЦ)
Томского политехнического ун-та (ТПУ)
Ленина пр-т, 30, г. Томск, Россия, 634050
Инж.-исследователь Северского технологического ин-та
Национального ядерного университета «МИФИ»
Коммунистический пр-т, 65, г. Северск, Россия, 636036
Тел.: +7-952-896-99-19
Эл. почта: 1alexander6@mail.ru

Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Ushakov A.O.

Block-component circuit method and its prospects in computer modeling of chemical-engineering systems

The article considers the possibility of developing models for chemical industry devices using the block-component circuit method. It is assumed that the developed models will replicate the functionality and the behavior of real devices used in chemical industry during the chemical-technological process. Through the use of heterogeneous vector connections, the block-component circuit method (BCM) allows creating models for various complex chemical-technological systems, including devices where complex physicochemical and mass-exchange processes occur. The development of such models can help in optimizing and automating the operation of devices used in chemical industry. In addition, the models of chemical devices developed on the basis of the block-component circuit method can be used to teach or train operators of process plants when simulating various scenarios of industrial

equipment operation. The paper presents the schemes and the algorithms of the developed conditional object-block of the chemical-technological system used to create models in MARS (Modeling and Automatic Research of Systems) environment to automate the modeling of chemical-technological processes, taking into account the impacts exerted on the object.

Keywords: chemical apparatus, chemical industry, block-component circuit method, modeling and analysis, automation.
DOI: 10.21293/1818-0442-2024-27-4-116-121

References

1. Kiziltas H. The Energy and Exergy Analysis of the Reactor Unit of Boric Acid Production Process with Chem-CAD Simulation. *Brilliant Engineering*, 2021, vol. 3, no. 2, pp. 1–6. DOI: 10.36937/ben.2022.4617.

2. Mefedova Yu.A. Modelirovanie sistemy regulirovaniya davleniya para v deaeratore AES v SIMINTECH [Modeling of the steam pressure regulation system in the NPP deaerator in SIMINTECH]. *Bulletin of Tula State University. Technical Sciences*, 2022, no. 2, pp. 628–633. DOI: 10.24412/2071-6168-2022-2-628-633 (in Russ.).

3. Valdés R., Sotelo C., Muñoz-Torres F., Favela-Contreras A. Dynamic Simulation of an Oil and Gas Plant Using Aspen-HYSYS®: A Real Start-Up Process. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2024, no. 2, pp. 229–241. DOI: 10.1007/s13369-024-09051-0.

4. Sidi-Yacoub I., Ahmed F., Ikram K. ASPEN-HYSYS Simulation of AREW's Multi-Stage Adiabatic Reactor with Inter-Stage Quenching for Methanol Synthesis. Improved Oil and Gas Recovery, 2023, vol. 7. p. 107785. DOI: 10.14800/iogr.1255.

5. Santos Bartolome P.A. Comparative study on Aspen Hysys interconnection methodologies. *Computers & Chemical Engineering*, 2022, vol. 162. p. 107785. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2022.107785.

6. Dmitriev V.M., Arais L.A., Shutenkov A.V. *Avtomatizaciya modelirovaniya promyshlennykh robotov* [Automation of modeling of industrial robots]. Moscow, Scientific and technical publishing house «Machine Building», 1995, 304 p. (in Russ.).

7. Kafarov V.V. Matematicheskie osnovy avtomatizirovannogo proektirovaniya himicheskih proizvodstv: Metodologiya proektirovaniya i teoriya razrabotki optimalnyh Tehnologicheskih skhem [Mathematical foundations of sound design of industrial production: Design methodology and theory of development of optimal technological schemes]. Moscow: *Chemistry*, 1979, 320 p. (in Russ.).

8. Dmitriev V.M., Gandzha T.V. *Sreda mnogourovnevogo kompyuternogo modelirovaniya* [Environment for multi-level computer modeling of chemical-technological systems]. Tomsk, Publishing house Tomsk State University, 2017, 332 p. (in Russ.).

9. Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Vazhenin S.K. *Principy postroeniya modelej slozhnykh tekhnologicheskikh objektov s neodnorodnymi vektornymi svyazyami* [Principles of constructing models of complex technological objects with heterogeneous vector connections]. *Modern Technologies. System Analysis. Modeling*, 2014, vol. 41, no. 1, pp. 104–111 (in Russ.).

10. Kochergin M.I. *Struktura mnogourovnevoj modeli mekhanicheskoj sistemy dlya 3D-vizualizacii rezultatov modelirovaniya* [Structure of a multi-level model of a mechanical system for 3D visualization of modeling results]. *Information Technologies in Modeling and Control: Approaches, Methods, Solutions: Proceedings of the VI All-Russian Scientific Conference with International Participation*, Togliatti, April 18-20, 2023. Togliatti, Togliatti State University, 2023, pp. 72–80 (in Russ.).

11. Mitrofanov A.V., Sizova O.V., Shpeinova N.S., Katyushin V.A. Mathematical modeling and analysis of the functioning of a cylindrical pyrolysis reactor with radial heating. *Bulletin of the Ivanovo State Power Engineering University*, 2021, no. 5, pp. 60–67. DOI: 10.17588/2072-2672.2021.5.060-067 (in Russ.).

12. Volkov K.N., Gimadiev V.A., Dobrov Yu.V., Karpenko A.G. Numerical simulation of hypersonic flow around a hemisphere taking into account nonequilibrium physicochemical processes in high-temperature air. *Computational Methods and Programming*, 2022, vol. 23, no. 3, pp. 248–274. DOI: 10.26089/NumMet.v23r316 (in Russ.).

13. Enikeeva L.V. *Metod regulyarizacii Tihonova pri reshenii obratnyh zadach himicheskoj kinetiki* [Tikhonov's regularization method for solving inverse problems of chemical kinetics]. *Bulletin of the Bashkir University*, 2022, vol. 27, no. 3, pp. 643–649. DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2022.3.28 (in Russ.).

14. Ganyukov A.A., Kadyrova I.A., Kadyrov A.S., Maratov D.D. Mathematical modeling of the diffusion process and kinetics of mass transfer of substances in various media. *International Journal of Applied and Fundamental Research*, 2021, no. 4, pp. 86–91 (in Russ.).

15. Dmitriev V.M. *Arhitektura universalnogo vychislitelnogo yadra dlya realizacii virtualnyh laboratorij* [Architecture of a universal computing core for implementing virtual laboratories]. *Devices and Systems. Management, Control, Diagnostics*, 2004, No. 2, pp. 24–28 (in Russ.).

16. Ushakov A.O., Gandzha T.V., Dmitriev V.M., Molokov P.B. Computer model of an ideal mixing extraction reactor in the format of the method of component chains with inhomogeneous vector connections. *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 3, pp. 599–614. DOI: 10.20537/2076-7633-2024-16-3-599-614 (in Russ.).

Vyacheslav M. Dmitriev
Doctor of Science in Engineering, Professor,
Department of Computer Control and Design Systems,
Tomsk State University of Control Systems
and Radioelectronics (TUSUR)
40, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Phone: +7 (382-2) 70-15-15
Email: dmitriewvm@gmail.com

Taras V. Gandzha
Doctor of Science in Engineering, Professor,
Department of Computer Control and Design Systems, TUSUR
40, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
ORCID: 0000-0002-4996-8114
Phone: +7 (382-2) 41-39-15
Email: gandgatv@gmail.com

Alexander O. Ushakov
Postgraduate student, Nuclear Fuel Cycle Department,
Tomsk Polytechnic University
30, Lenin pr., Tomsk, Russia, 634050
Research Engineer, Seversk Technological Institute
National Research Nuclear University «MEPHI»
65, Kommunisticheskiy pr., Seversk, Russia, 636036
Phone: +7-952-896-99-19
Email: 1alexander6@mail.ru