

doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-3-640-651

УДК 004.415.2

Архитектура программного комплекса для моделирования химических процессов в микрореакторах на основе модели С4

Даниил Константинович Ершов¹✉, Екатерина Сергеевна Боровинская²

¹ АО «Атомэнергопроект», Санкт-Петербург, 197183, Российская Федерация

² Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург, 190013, Российская Федерация

¹ daniilershov2015@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0001-6608-8891>

² melik_v@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5507-1226>

Аннотация

Введение. Микрореакторы требуют интенсивного вычислительного моделирования для анализа сложных многофазных химических процессов, однако существующие программные решения обладают ограниченной функциональностью или отличаются высокой стоимостью. На сегодняшний день отсутствует комплексная архитектурная платформа, объединяющая моделирование, идентификацию параметров, анализ чувствительности и гидродинамические расчеты в едином программном комплексе. Такая платформа необходима для оптимизации конструкций микрореакторов и повышения эффективности их проектирования. **Метод.** Применена методология архитектурного проектирования программного обеспечения С4, на основе которой была разработана клиент-серверная архитектура с модульным разделением на подсистемы. В качестве технологического стека использованы JavaScript для клиентской части и Python с Django REST Framework для серверной части, что обеспечивает кроссплатформенность и масштабируемость решения. **Основные результаты.** Разработана масштабируемая архитектура программного комплекса, предназначенного для решения прямых и обратных кинетических задач произвольных химических реакций, идентификации и оптимизации параметров процессов, а также анализа чувствительности с целью выявления ключевых факторов системы. Особое внимание уделено подсистеме гидродинамического моделирования, архитектура которой включает парсер входных данных, генератор динамических систем уравнений, а также решатели многофазных потоков и химических реакций на границе раздела фаз. Модульная структура обеспечивает независимую разработку компонентов и возможность расширения функциональности программного комплекса за счет внедрения новых или модификации существующих контейнеров. Проведена апробация разработанного программного комплекса на примере моделирования трехстадийной реакции перезетирификации для производства биодизельного топлива в Т-образном микросмесителе. Результаты численного моделирования подтвердили корректность работы подсистемы гидродинамического моделирования. **Обсуждение.** Предложенная архитектура формирует основу для создания открытого программного комплекса, доступного инженерам-проектировщикам микрореакторов, исследователям в области химии и студентам химико-технологических специальностей. Использование модели С4 обеспечивает четкое разделение ответственности между компонентами системы и упрощает ее масштабирование. Клиент-серверная организация позволяет эффективно распределять вычислительную нагрузку и обеспечивает доступность системы для пользователей с различными аппаратными возможностями. Разработанная архитектура может служить основой для дальнейшей разработки специализированных программных средств в области проектирования микрореакторных систем и интеграции с системами автоматизированного проектирования.

Ключевые слова

архитектура ПО, модель С4, прямая кинетическая задача, обратная кинетическая задача, анализ чувствительности, проектирование микрореакторов, вычислительная гидродинамика

Ссылка для цитирования: Ершов Д.К., Боровинская Е.С. Архитектура программного комплекса для моделирования химических процессов в микрореакторах на основе модели С4 // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2026. Т. 26, № 3. С. 640–651. doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-3-640-651

© Ершов Д.К., Боровинская Е.С., 2026

Architecture of a software package for modeling chemical processes in microreactors based on the C4 model

Daniil K. Ershov¹✉, Ekaterina S. Borovinskaya²

¹ Atomenergoproekt JSC, Saint Petersburg, 197183, Russian Federation

^{1,2} Saint Petersburg State Technological Institute (Technical University), Saint Petersburg, 190013, Russian Federation

¹ daniilershov2015@gmail.com✉, <https://orcid.org/0000-0001-6608-8891>

² melik_v@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5507-1226>

Abstract

Microreactors require intensive computational modeling to analyze complex multiphase chemical processes, but existing software solutions either have limited functionality or are expensive. To date, there is no comprehensive architectural platform that combines modeling, parameter identification, sensitivity analysis, and hydrodynamic calculations in a single software package. Such a platform is necessary for optimization and increasing the efficiency of the microreactors design process. The study uses the C4 software architectural design methodology based on which client-server architecture with a modular division into subsystems was developed. JavaScript for the client part and Python with Django REST Framework for the server part were used as a technology stack, which ensures the cross-platform and scalable nature of the implementation. A scalable architecture of a software package has been developed which is able to solve direct and inverse kinetic problems of arbitrary chemical reactions, to identify and to optimize process parameters, and to make sensitivity analysis for identification of key factors of the system. Particular attention is paid to the hydrodynamic modeling subsystem the architecture of which includes an input data parser, a generator of dynamic systems of equations, and solvers for multiphase flows and chemical reactions at the phase boundary. The modular structure ensures independent development of components and the ability to expand the functionality of the software package by introducing new or modifying existing containers. The software package was tested using a three-stage transesterification simulation for biodiesel fuel production in a T-shaped micromixer. The results of the computational study confirmed the correct operation of the hydrodynamic subsystem. The proposed architecture forms the basis for creating an open software package available to microreactor design engineers, chemistry researchers, and students of chemical engineering specialties. The use of the C4 model ensures a clear division of responsibilities between the system components and simplifies its scaling. The client-server organization allows for efficient distribution of the computational load and ensures the availability of the system for users with different hardware capabilities. The developed architecture can serve as a basis for further development of specialized software tools in the field of microreactor system design and integration with computer-aided design systems.

Keywords

software architecture, C4 model, direct kinetic problem, inverse kinetic problem, sensitivity analysis, microreactor design, computational fluid dynamics

For citation: Ershov D.K., Borovinskaya E.S. Architecture of a software package for modeling chemical processes in microreactors based on the C4 model. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2026, vol. 26, no. 3, pp. 640–651 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-3-640-651

Введение

Современное развитие химической промышленности сопровождается повышенными требованиями к эффективности и безопасности производственных процессов, что усиливает интерес к технологиям микрореакторов. Проектирование микрореакторов требует детального анализа сложных многофазных процессов, протекающих в реакторных системах.

Численное моделирование гидродинамики основано на решении уравнений в частных производных и представляет собой вычислительно трудоемкую задачу. Прямое моделирование уравнений Навье–Стокса и уравнений конвекции-диффузии-реакции требует значительных вычислительных ресурсов [1–3]. Дополнительную сложность создает решение обратных задач для идентификации кинетических параметров, особенно в условиях неполной информации о начальных условиях процесса.

Существующие программные продукты для моделирования химических процессов (например, ANSYS или COMSOL) ограничены по функциональности или требуют значительных затрат на лицензирование и

обучение персонала. При этом отсутствует комплексное решение, объединяющее в единой архитектуре кинетическое моделирование, идентификацию параметров, анализ чувствительности и гидродинамические расчеты.

Цель данной работы заключается в разработке архитектуры программного комплекса для комплексного моделирования химических процессов в микрореакторах с использованием модели «контекст-контейнер-компонент-код» (Context Container Component Code, C4). Предлагаемый подход обеспечивает решение прямых и обратных кинетических задач для химических реакций произвольного вида, проведение анализа чувствительности системы и поддержку гидродинамического моделирования с целью оптимизации конструкций микрореакторов.

Требования к программному комплексу. В рамках гидродинамических вычислений при проектировании микрореакторов решение прямой задачи заключается в решении динамически формируемой для заданной химической реакции системы уравнений конвекции-диффузии-реакции. Эти уравнения могут быть записаны в общем виде для компонента i [4]:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_{i-f} \Delta c_i - v \nabla c_i + R(c_i, k_i, t \dots), \quad (1)$$

где c_i — скалярное поле концентрации вещества i некоторой химической реакции; D_{i-f} — коэффициент диффузии вещества i относительно фазы f , в которой оно находится; v — векторное поле скорости потока, рассчитываемое на основе нестационарных уравнений Навье–Стокса в частных производных; $v \nabla c_i$ — конвекционный член уравнения; $D_{i-f} \Delta c_i$ — диффузионный член уравнения; R — кинетический (реакционный) член уравнения, зависящий от концентраций веществ реакции, констант скорости реакции k_i , времени t и других параметров.

На практике не всегда известны все значения параметров для моделирования процесса химической реакции. В таких случаях для идентификации параметров решают обратную задачу, которая требует решения прямой задачи на каждой итерации.

Итеративное решение систем уравнений конвекции-диффузии-реакции является крайне вычислительно затратным, что делает целесообразным ограничение вычислений только кинетическими членами уравнений $R(c_i, k_i, t \dots)$. Это сводит задачу на каждом шаге к решению классической прямой задачи химической кинетики.

При увеличении сложности реакций размерность системы уравнений конвекции-диффузии-реакции (1) может существенно возрастать. Однако не все вещества оказывают значимое влияние на ход реакции и образование конечных продуктов. В подобных случаях оправдано проведение предварительного анализа чувствительности, который позволяет оценить вклад отдельных веществ в формирование продуктов реакции [5]. На основе такого анализа можно сократить размерность системы, и уменьшить вычислительные затраты на моделирование.

Исходя из аспектов математического моделирования, необходимого для анализа и оптимизации конструкций микрореакторов, сформулированы основные требования к программному комплексу. Программный комплекс должен обеспечивать: численное решение прямой кинетической задачи для химических реакций; численное решение обратной задачи для идентификации и оптимизации параметров кинетических членов уравнений конвекции-диффузии-реакции; проведение анализа чувствительности параметров произвольной химической реакции на основании решения прямой и обратной кинетических задач; выполнение гидродинамического моделирования реакционных процессов с целью выявления застойных зон в микрореакторе.

Подход к проектированию архитектуры программного комплекса

Модель С4. Согласно международному стандарту ISO/IEC/IEEE 42010:2022¹, архитектура определяется как совокупность концепций или свойств объекта

¹ ISO/IEC/IEEE 42010:2022. Systems and software engineering — Architecture description. 2nd ed. Geneva: International Organization for Standardization (ISO), 2022. 62 p.

(сущности) в его окружении и руководящие принципы реализации и развития данного объекта и связанных с ним процессов жизненного цикла.

Архитектура программного комплекса может рассматриваться как набор структур, необходимых для описания программного обеспечения, и как дисциплина, направленная на построение этих структур и систем. Каждая структура включает программные элементы, отношения между ними и характеристики как самих элементов, так и их взаимодействий [6, 7].

В работе [8] показано наличие прямой зависимости между моментом внесения дефекта, временем его обнаружения и стоимостью устранения. На рис. 1 представлена зависимость величины затрат от этапа внесения дефекта и момента его обнаружения.

Проектирование архитектуры является одним из начальных этапов разработки программного обеспечения. Из зависимости, представленной на рис. 1, очевидно, что появление дефекта на данном этапе может очень существенно увеличить затраты на его устранение, что подтверждает необходимость тщательного архитектурного проектирования программного комплекса.

Для описания архитектуры программных систем существует множество подходов, среди которых можно отметить модель Захмана [9], IDEF, ATAM [10], «4+1» [11] и C4 [12]. Модель C4 представляет собой метод графической нотации, обеспечивающий наглядный способ описания архитектуры программного обеспечения.

Название модели C4 связано с четырьмя уровнями абстракции, используемыми в этой модели для обеспечения различной степени детализации архитектуры программного обеспечения от верхнего уровня к нижнему [12, 13].

В настоящей работе для подсистемы гидродинамических расчетов представлены уровни контекста, контейнеров и компонентов, что обеспечивает достаточное понимание архитектурных решений и взаимодействий внутри системы.

Детализация уровня кода требует отдельного технического рассмотрения, выходящего за рамки работы, посвященной верхнеуровневой архитектуре программного комплекса, и может быть предметом будущих публикаций.



Рис. 1. Зависимость величины затрат от этапа внесения дефекта и момента его обнаружения [8].

ПО — программное обеспечение

Fig. 1. The costs dependence vs. the stage of defect introduction and moment of its detection [8].

ПО — software

Результаты

Уровень контекста. Верхний уровень архитектуры С4 программного обеспечения, описывает систему в целом, ее назначение и роль во взаимодействии с пользователями и внешним миром.

Для представления уровня контекста на основании формализованных требований была разработана схема сценариев использования (рис. 2). Выбор данного инструмента обоснован его способностью обеспечить систематическое описание различных характеристик системы посредством [14]: формализации функциональных требований к программному комплексу; визуализации ролевой структуры пользователей и механизмов их взаимодействия с системой; установления четких границ системы за счет разграничения внутрисистемных компонентов и элементов внешней среды.

На рис. 2 отражены ключевые функциональные требования к программному комплексу: решение прямой кинетической задачи, идентификация/оптимизация параметров кинетической задачи, возможность проведения анализа чувствительности параметров кинетической задачи и возможность поиска оптимальных режимов в микрореакторе (гидродинамическое моделирование химической реакции, протекающей в микрореакторе). Также обозначено, что у каждой из основных функций программного комплекса есть «Extend» — возможность сохранения результата моделирования в базе данных.

Рис. 2 определяет ключевые группы пользователей разрабатываемого программного комплекса: инженеры-проектировщики микрореакторов, химики-иссле-

дователи и студенты направлений, связанные с современными технологиями химической промышленности. Другие заинтересованные стороны отсутствуют, поскольку программный комплекс разрабатывается в соответствии с принципами открытого исходного кода, что подразумевает отсутствие коммерческого интереса во взаимодействии с третьими лицами.

В предъявленных требованиях к программному комплексу все группы пользователей обладают при работе с ним равными возможностями. Из чего следует отсутствие уникального функционала программного комплекса для какой-либо из групп пользователей.

Кроме того, в разработанных требованиях отсутствует необходимость интеграции с внешними системами или базами данных, что отражается на рис. 2 в отсутствии зависимостей программного комплекса от внешних объектов.

Уровень контейнеров. Данный уровень модели С4 описывает высокоуровневую структуру и компоновку элементов программного комплекса.

Гидродинамические расчеты относятся к числу наиболее ресурсоемких вычислительных задач, что накладывает повышенные требования к производительности аппаратного обеспечения. Решение сложных задач требует применения высокопроизводительных вычислительных систем, а в отдельных случаях — использования суперкомпьютеров [2, 3]. Таким образом, целесообразно разделить программный комплекс на две глобальные независимые части: клиентскую и серверную. Клиентская часть отвечает за представление пользователю средств ввода и валидации исходных данных, необходимых для проведения моделирования, тогда как серверная часть выполняет вычислительные задачи.

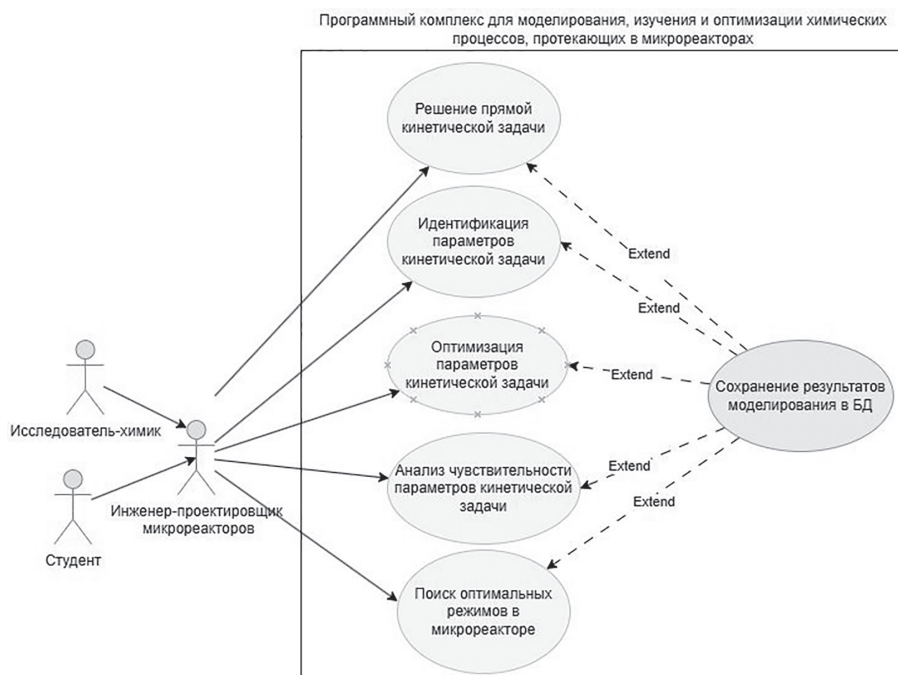


Рис. 2. Уровень контекста: схема сценариев использования программного комплекса.

БД — база данных; Extend — расширение

Fig. 2. Context level: use case diagram of software package.

БД — database

Для реализации масштабируемости функционала проекта в контексте разработки программного обеспечения по принципам открытого исходного кода и для удобства организации и отладки программного кода было принято решение о представлении каждой из частей программного комплекса в виде модулей.

Разработанная модульная архитектура обладает высоким потенциалом расширяемости: добавление новых подсистем или детализация существующих могут быть выполнены без нарушения целостности системы. Ключевым условием масштабирования является корректное определение требований к потокам данных, а также уточнение зависимостей между модулями.

В соответствии с этим подходом построена схема уровня контейнеров программного комплекса (рис. 3).

Модули уровня контейнеров представлены следующими подсистемами.

Подсистема формирования входных данных. Обеспечивает прием и предварительную обработку данных, вводимых пользователем. Подсистема относится к клиентской части и не зависит от других подсистем.

Подсистема валидации входных данных. Выполняет проверку корректности введенных пользователем в пользовательском интерфейсе (UI) параметров. Подсистема относится к клиентской части и принимает данные от подсистемы формирования входных данных. Если данные корректны, подсистема передает их на обработку серверной части. При обнаружении ошибок выводит пользователю сообщение об ошибке.

Подсистема обработки и визуализации результатов моделирования. Представляет результаты, поступающие от серверной части. Подсистема относится к клиентской части. Методы визуализации данных зависят от формата выходных данных каждой серверной подсистемы.

Подсистема валидации и маршрутизации запросов. Повторно проверяет входные данные, полученные из клиентской части. Подсистема относится к серверной части. Она направляет запросы в соответствующие рас-

четные подсистемы и координирует их взаимодействие. Например, запросы от подсистемы идентификации и оптимизации параметров к подсистеме решения прямой кинетической задачи. Кроме того, эта подсистема проверяет базу данных и предотвращает повторные расчеты, если нужный набор параметров уже был вычислен ранее. Данная подсистема является наиболее зависимой в комплексе: любое изменение формата данных в расчетных подсистемах требует ее модификации.

Подсистема решения прямой кинетической задачи. Реализует численное решение системы обыкновенных дифференциальных уравнений для прямой задачи химической кинетики. Подсистема относится к серверной части, не зависит от других расчетных подсистем и обеспечивает выполнение функционального требования к программному комплексу «решение прямой кинетической задачи».

Подсистема идентификации и оптимизации параметров кинетической задачи. Предназначена для решения обратной задачи кинетики (идентификация параметров) и оптимизации параметров прямой задачи. Она относится к серверной части, зависит от подсистемы решения прямой задачи и обеспечивает выполнение функциональных требований «идентификация/оптимизация параметров кинетической задачи».

Подсистема анализа чувствительности. Реализует алгоритм анализа чувствительности параметров модели. Подсистема относится к серверной части, зависит от подсистем решения прямой кинетической задачи, идентификации и оптимизации параметров. Она обеспечивает выполнение функционального требования «анализ чувствительности параметров кинетической задачи».

Подсистема гидродинамического моделирования. Предназначена для моделирования гидродинамических процессов и химических реакций на границе раздела фаз. Она относится к серверной части и не зависит от других расчетных подсистем. Подсистема обеспечивает выполнение функционального требования «поиск оптимальных режимов в микрореакторе».

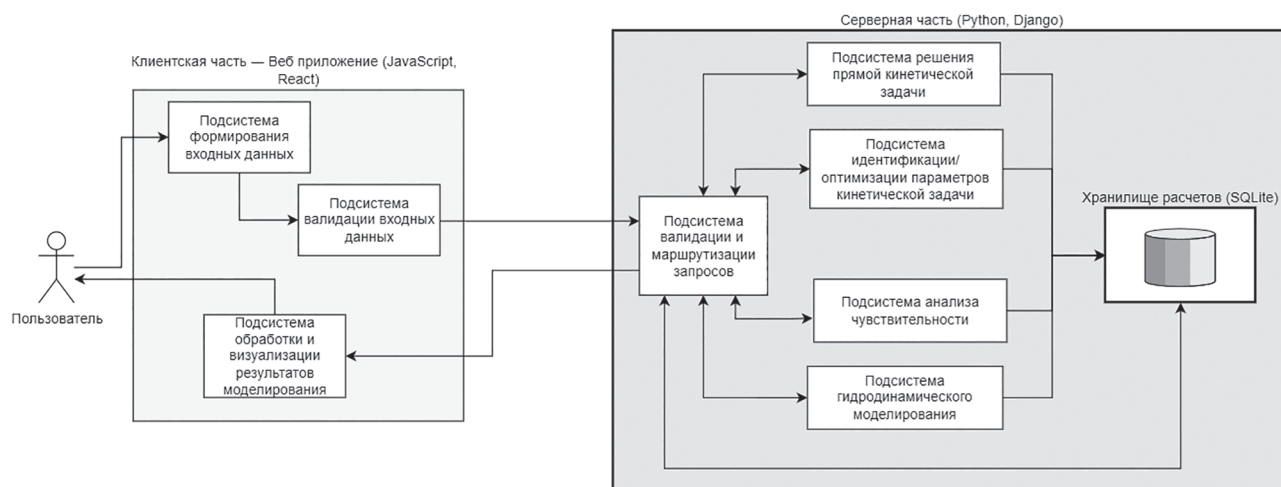


Рис. 3. Уровень контейнеров: схема взаимодействия подсистем в рамках клиент-серверной архитектуры.

Стрелками обозначены направления обмена данными между подсистемами программного комплекса

Fig. 3. Containers level: a diagram of how subsystems interact within the client-server architecture.

The arrows indicate the directions of data exchange between the subsystems of the software package

Хранилище расчетов. Обеспечивает работу со встроенной базой данных SQLite и предназначено для хранения введенных пользователем начальных параметров и результатов моделирования, получаемых любой из расчетных подсистем.

Для реализации клиентской и серверной частей программного комплекса были использованы языки программирования — JavaScript и Python соответственно. Каждый из этих языков является лидером в своей специализированной области: JavaScript — разработка UI для веб-приложений, Python — в области научных и инженерных вычислений. Для решения уравнений в частных производных применена библиотека FiPy.

Уровни компонентов и кода из модели C4 обеспечивают более глубокую детализацию архитектуры программного комплекса. Все подсистемы, кроме подсистемы гидродинамического моделирования, являются примерами типовых задач, решаемых разработчиками на регулярной основе. Исходя из этого, на уровне компонентов будет рассмотрена только архитектура подсистемы гидродинамического моделирования.

Уровень компонентов: подсистема гидродинамического моделирования. Третий уровень модели C4, ориентирован на описание внутреннего устройства каждого контейнера.

На основании разработанных требований к системе, представленной верхнеуровневой архитектуры (рис. 2 и 3), и алгоритмических принципов вычислительной гидродинамики разработана архитектура подсистемы гидродинамического моделирования (рис. 4).

Подсистема гидродинамического моделирования (рис. 4) состоит из следующих компонентов.

Парсер входных данных формата JavaScript Object Notation (JSON) — набор функций, предназначенный для данных обработки файла входных данных, поступившего со стороны клиента в формате JSON.

Генератор динамической системы уравнений — набор функций, динамически формирующий объекты системы уравнений Навье–Стокса для многофазового течения и динамической системы модифицированных уравнений конвекции-диффузии-реакции, описывающих протекающую в микрореакторе реакцию. Сформированные объекты передаются в решатель уравнений Навье–Стокса для многофазного потока и решатель многофазной модели химической реакции на границе раздела фаз.

Генератор граничных условий — класс, задающий начальные и граничные условия для объектов, описывающих системы гидродинамических уравнений. Он получает и обновляет объекты от генератора динамической системы уравнений.

Решатель уравнений Навье–Стокса для многофазного потока — класс, численно решающий на каждой итерации моделирования динамическую систему уравнений Навье–Стокса для многофазового течения, на каждой итерации возвращает векторное поле скорости решателю многофазной модели химической реакции на границе раздела фаз.

Менеджер физических скалярных полей — множество классов, определяющих скалярные и векторные поля, и операции над ними (динамическую плотность, вязкость, фазы и др.).

Калькулятор концентраций на выходе из микрореактора — набор функций, реализующий алгоритм



Рис. 4. Уровень компонентов: схема взаимодействия компонентов подсистемы гидродинамического моделирования.

«→» — передача данных от одного компонента к другому (источник передает данные, но сам не зависит от получателя);

«↔» — взаимозависимость компонентов

Fig. 4. Components level: diagram of interactions between components of the hydrodynamic modeling subsystem.

“→” — data transfer from one component to another (the source transmits data, but it does not depend on the recipient);

“↔” — component interdependence

расчета количества каждого вещества, вышедшего из микрореактора за время моделирования.

Конвертер результатов моделирования в JSON — набор функций, конвертирующий результаты численного моделирования в JSON-формат для отправки обратно на клиентскую часть и для сохранения в хранилище расчетов.

Решатель многофазной модели химической реакции на границе раздела фаз — набор функций, реализующих численное моделирование системы модифицированных уравнений конвекции-диффузии-реакции. Эти уравнения описывают протекание химических реакции на границе раздела фаз. На каждой итерации расчет зависит от данных, поступающих от решателя уравнений Навье–Стокса и менеджера физических скалярных полей. По завершении каждой итерации решатель передает данные в калькулятор концентраций на выходе из микрореактора.

Апробация программного комплекса. Ключевой особенностью программного комплекса, отличающей его от других программных решений (ANSYS, COMSOL, OpenFOAM) является целостная архитектура, спроектированная для решения задач моделирования химических реакций, протекающих в микрореакторах: начиная с кинетического моделирования до поиска оптимальных режимов в микрореакторе на основе анализа гидродинамических эффектов. В соответствии с функциональными требованиями, перечисленными в разделе «Введение» и подсистемами, показанными на рис. 2, программный комплекс обеспечивает: решение прямой кинетической задачи (подсистема решения прямой кинетической задачи); идентификацию и оптимизацию параметров кинетической задачи (подсистема идентификации и оптимизации параметров); проведение анализа чувствительности параметров (подсистема анализа чувствительности); поиск оптимальных режимов в микрореакторе (подсистема гидродинамического моделирования); сохранение результатов моделирования в базе данных (хранилище расчетов).

Первые три подсистемы предназначены для решения классических задач химической кинетики. На этапе предварительного анализа они позволяют получить начальные приближения параметров реакции, провести их идентификацию и оценить вклад отдельных компонентов. Эти подсистемы позволяют формировать качественные входные данные для последующего проведения гидродинамического моделирования, снижая вычислительные затраты и повышая надежность конечных результатов.

Стандартные программные пакеты для вычислительной гидродинамики (ANSYS, COMSOL, OpenFOAM) не поддерживают возможность прямого сопряженного моделирования гидродинамических процессов и кинетики химических реакций, протекающих на границе раздела фаз. Это ограничение не позволяет использовать указанные инструменты для анализа и оптимизации процессов в микрореакторах по ключевому параметру — площади границы раздела фаз. Для преодоления данного ограничения и обеспечения возможности целенаправленной оптимизации конструкций и режимов работы микрореакторов была

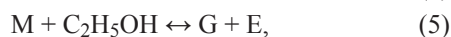
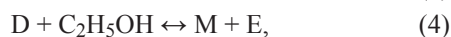
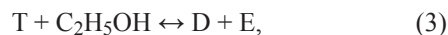
разработана специализированная гидродинамическая модель, учитывающая протекание реакции на границе раздела фаз. Эта модель лежит в основе подсистемы гидродинамического моделирования и является центральным элементом программного комплекса.

Разработанная гидродинамическая модель реакции включает в себя модифицированную версию метода объема жидкости и модифицированные уравнения конвекции-диффузии-реакции. Эти уравнения являются ключевыми для моделирования процесса химической реакции в микрореакторе, они описывают пространственно-временное распределение концентрации вещества в микрореакторе и имеют вид:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_{i-f} \Delta c_i - v \nabla c_i + R_i \alpha_{\text{int}}, \quad (2)$$

где α_{int} — скалярное поле, определяющее на основании модифицированного метода объема жидкости положение границы раздела фаз в расчетном пространстве. Величина α_{int} в формуле (2) является ключевым отличием от классической формулы (1) конвекции-диффузии-реакции, и определяет, что химическая реакция R_i протекает только на границе раздела фаз между заданными несмешиваемыми жидкостями.

Для тестирования подсистемы гидродинамического моделирования использовалась химическая реакция перэтерификации, при помощи которой в микрореакторах производится биодизельное топливо. Это сложная химическая реакция, состоящая из трех стадий, протекающих на границе раздела фаз параллельно друг другу:



где T — триглицериды; D — диглицериды; M — моноглицериды; G — глицерин; E — свободные жирные кислоты (биодизель); C_2H_5OH — этанол.

Математическая модель, лежащая в основе подсистемы гидродинамического моделирования, требует определения фаз системы, как некой совокупности химических веществ. Важно отметить, что данное определение фазы не соответствует устоявшемуся понятию фазы из вычислительной гидродинамики. Для указанной реакции перэтерификации фазы были сформированы следующим образом: фаза триглицеридов состоит из веществ T, D, M и E; фаза этанола из C_2H_5OH и G.

Реакция перэтерификации протекает в изотермических условиях при температуре 40 °C [15]. Физические параметры, необходимые для проведения гидродинамического моделирования, такие как плотность и вязкость веществ, были получены путем интерполяции значений для заданной температуры из работ [16, 17] (табл. 1). Значения констант скорости химических реакций (3)–(5) были взяты из [18] при количестве катализатора равном 1 % (табл. 2), а коэффициенты диффузии для веществ из [19] (табл. 1).

Также для проведения гидродинамического моделирования была подготовлена геометрическая модель, описывающая в виде расчетной сетки пространство

Таблица 1. Физические параметры химических веществ

Table 1. Physical parameters of chemical substances

Параметр	Вещество					
	T	C ₂ H ₅ OH	D	M	E	G
Плотность ρ , кг·м ⁻³	916,3	789,1	950,3	980,7	875,2	1261,5
Динамическая вязкость μ , Па·с	0,052	$1,144 \times 10^{-3}$	$1,5 \times 10^{-2}$	$2,5 \times 10^{-2}$	$4,4 \times 10^{-3}$	1200
Коэффициенты диффузии для уравнений конвекции-диффузии-реакции веществ (3)–(5), мкм ² /с	1580	118,2	1380	1380	1380	1380

микрореактора. Подсистема гидродинамического моделирования работает с любыми моделями формата «msh», созданными в специализированной программе с открытым исходным кодом gmsh, предназначенной для создания 2D- и 3D-моделей, и их расчетных сеток.

Для сокращения затрат на процесс отладки и тестирования использованы 2D-вариации геометрических моделей микрореакторов, так как это существенно сокращает время выполнения численных алгоритмов решения гидродинамической модели. На рис. 5 представлены схема (рис. 5, а) и разработанная 2D геометрическая модель с расчетной сеткой микрореактора (рис. 5, б), которые были использованы для моделирования процесса протекания химической реакции перестерификации в микрореакторах.

При разработке 2D-модели и ее расчетной сетки было принято, что модель продольного сечения Т-образного микросмесителя имеет вид сверху.

Расчетная сетка (рис. 5, а), имеет четыре типа граничных условий: вход 1, вход 2, выход и стенки. Программный комплекс принимает на вход модели сетки в виде файлов формата «msh».

Ключевым подготовительным шагом гидродинамического моделирования является настройка граничных условий системы, от которых зависит итоговое со-

стояние системы. Для стенок задавалось стандартное граничное условие — условие прилипания. Граничные значения скалярных полей давления, концентрации C₂H₅OH и T и векторного поля скорости представлены в табл. 3, на каждый из входов подается чистое вещество без примесей, поэтому значения концентраций остальных веществ на входах равно 0 моль/л. В начальный момент времени t_0 : пространство микросмесителя полностью заполнено C₂H₅OH — в каждом расчетном объеме значение концентрации C₂H₅OH равно 1 моль/л; значения концентраций веществ во всем расчетном объеме, кроме C₂H₅OH 0 моль/л; начальное численное приближение поле давления 0 Па во всем расчетном объеме; векторное поле скорости задано векторами вида (0,0) для всего расчетного объема. Система до начала моделирования находится в состоянии покоя.

Последним подготовительным этапом является настройка параметров численного моделирования. К таким параметрам относятся: шаг моделирования по времени dt — 0,01 с; коэффициент релаксации скорости — 0,7; коэффициент релаксации давления — 0,3; нижний и верхний численные индикаторы границы раздела фаз — 0,45 и 0,55. Коэффициенты релаксации для численного решения уравнений Навье–Стокса были взяты как стандартные значения из [21].

Таблица 2. Константы скорости химических реакций, л²/(моль²·с)Table 2. Kinetics constants, l²/(mol²·s)

Прямая реакция (3), k_1	Обратная реакция (3), k_{-1}	Прямая реакция (4), k_2	Обратная реакция (4), k_{-2}	Прямая реакция (5), k_3	Обратная реакция (5), k_{-3}
$2,45 \times 10^{-1}$	$8,65 \times 10^{-1}$	$1,22 \times 10^{-1}$	$3,75 \times 10^{-2}$	$5,37 \times 10^{-2}$	$1,26 \times 10^{-2}$

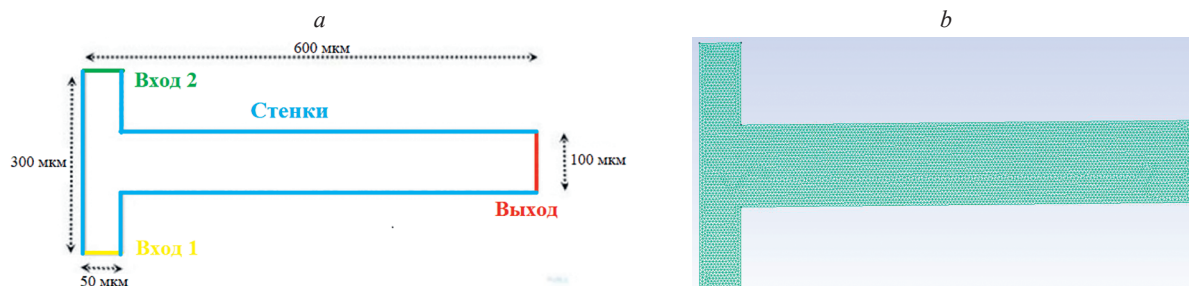


Рис. 5. Схема [21] (а) и 2D-модель [20] (б) Т-образного смесителя.

На рис. 5, б изображена расчетная сетка (10 284 расчетных объемов (ячеек)), созданная в gmsh

Fig. 5. Diagram [21] (a) and 2D model [20] (b) of a T-shaped mixer.

Fig. 5, b shows the calculated grid (10,284 calculated volumes (cells)) created in gmsh

Таблица 3. Граничные условия моделируемой системы

Table 3. Boundary conditions of the modeling system

Граница	Параметр			
	Скорость, мкм/с	Давление, Па	T, моль/л	C ₂ H ₅ OH, моль/л
Вход 1	(0; 500)	—	0	1
Вход 2	(0; -500)	—	1	0
Выход	(0; 0)	0	—	—

После проведения настроек граничных и начальных условий скорости, давления, концентраций веществ,

физических параметров веществ, а также численных параметров моделирования было проведено моде-

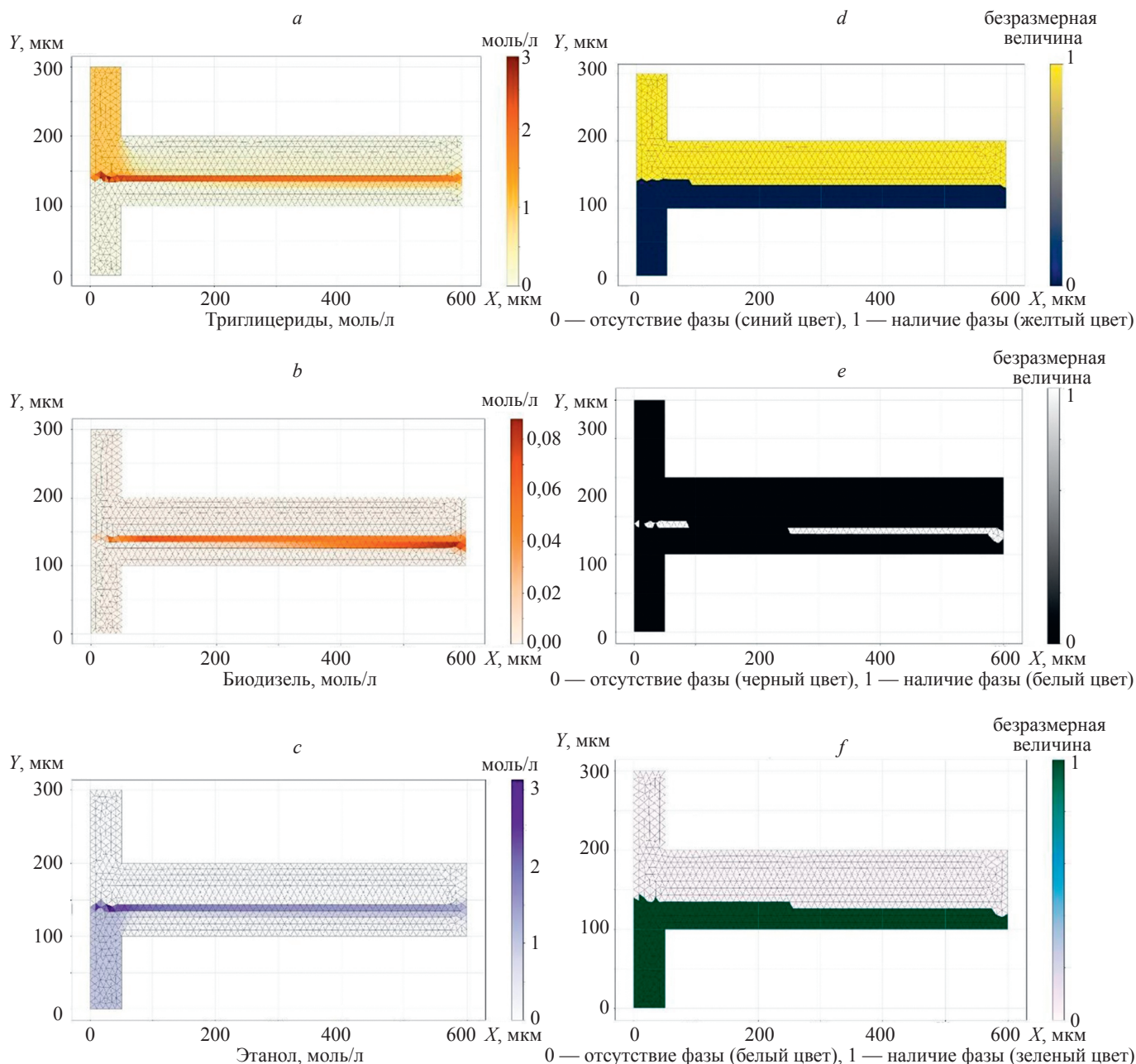


Рис. 6. Распределение концентраций веществ реакции переэтерификации в пространстве Т-образного микросмесителя после установления стационарного состояния: триглицериды (а); биодизель (б); этанол (с); фаза триглицеридов (d); граница раздела фаз (e); фаза этанола (f)

Fig. 6. Substances concentrations distribution of the transesterification reaction in the space of a T-shaped micromixer after establishing a steady state: triglycerides (a); biodiesel (b); ethanol (c); triglyceride phase (d); interface (e); ethanol phase (f)

лирование химической реакции переэтерификации, протекающей на границе раздела фаз в Т-образном микросмесителе. Учитывая допущение о 2D-модели продольного сечения (без учета вертикальной оси z), сила гравитации была исключена из правой части нестационарных уравнений Навье–Стокса.

На рис. 6 представлено пространственное распределение всех концентраций веществ реакции переэтерификации в Т-образном микросмесителе после достижения стационарного состояния системы. В пространство микросмесителя со входа 1 поступает C_2H_5OH (рис. 6, *c*), а со входа 2 — Т (рис. 6, *a*), остальные вещества — D, M, G, этиловые эфиры (E, рис. 6, *b*) образуются только в зоне границы раздела фаз (белая зона на рис. 6, *e*). Помимо распределения концентраций веществ во времени и пространстве программный комплекс также рассчитывает и выводит графики пространственно-временного распределения фаз (рис. 6, *g, f*), и позволяет рассчитать площадь границы раздела фаз. Данные результаты предполагается использовать в качестве критерия при проектировании микрореакторов. Полученное в стационарном режиме распределение фаз в пространстве соответствует теоретическим описаниям ламинарного течения для системы этанол-соевое масло в Т-образном микросмесителе при числе Рейнольдса Re приблизительно равном 0,21 [22]. График распределения и образования биодизельного топлива (рис. 6, *b*) соответствует теоретическим ожиданиям о протекании реакции только на границе раздела фаз.

Обсуждение

Практическая значимость работы заключается в создании открытого программного комплекса, доступного для инженеров-проектировщиков микрореакторов, химиков-исследователей и студентов химических специальностей. Программный комплекс состоит из клиентской части (React с TypeScript) и серверной части (Python с Django REST Framework), исходный код которых размещен в публичных репозиториях GitHub¹. Разработанная архитектура может служить основой для создания специализированных программных решений в области проектирования и оптимизации микрореакторов.

Использование технологического стека JavaScript/Python совместно с Django REST Framework обеспечивает кроссплатформенность решения и возможность интеграции с существующими системами. Модульная

архитектура позволяет использовать отдельные компоненты как для управления технологическими процессами, так и для проведения научных исследований.

Дальнейшие исследования могут быть направлены на расширение библиотеки математических моделей, интеграцию с системами автоматизированного проектирования и разработку алгоритмов машинного обучения для прогнозирования свойств новых химических процессов в микрореакторах.

Заключение

Представлена архитектура программного комплекса для моделирования химических процессов в микрореакторах, разработанная с использованием модели C4. Предложенная архитектура обеспечивает масштабируемость, модульность и возможность независимой разработки отдельных компонентов системы благодаря четкому разделению на уровни контекста, контейнеров и компонентов. Разработанная архитектура позволяет объединить в одном комплексе полный набор инструментов для многоэтапного моделирования — от кинетического анализа до гидродинамического расчета, что принципиально отличает его от специализированных пакетов ANSYS, COMSOL и OpenFOAM.

Апробация программного комплекса проведена на примере моделирования процесса переэтерификации триглицеридов этанолом для производства биодизельного топлива в Т-образном микросмесителе. Численное моделирование трехстадийной химической реакции, протекающей на границе раздела фаз, подтвердило корректность работы гидродинамической модели и подсистемы моделирования. Полученное в стационарном режиме распределение фаз в объеме микрореактора соответствует теоретическим описаниям ламинарного течения системы «этанол-соевое масло» при числе Рейнольдса приблизительно равном 0,21, что подтверждает валидность предложенных архитектурных решений и их практическую применимость для решения задач проектирования микрореакторов.

Предложенный программный комплекс не только реализует полный набор функциональных требований — от решения прямой кинетической задачи до гидродинамического моделирования, — но и предоставляет пользователю возможность моделирования химических реакций, протекающих на границе раздела фаз, недоступную в классических программных пакетах вычислительной гидродинамики. Комплексный подход позволяет проводить предварительную оптимизацию и анализ на упрощенных моделях, что повышает эффективность и точность гидродинамического моделирования. Такой подход способствует не только повышению функциональности разработанного решения, но и практической ориентированности инструмента, направленной на проектирование микрореакторов.

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://github.com/danibord/minm-ui> — клиентская часть программного комплекса (дата обращения: 13.04.2026). [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://github.com/danibord/minm-server> — серверная часть программного комплекса (дата обращения: 13.04.2026).

Литература

References

1. Фомин А.А., Фомина Л.Н. Численное решение уравнений Навье–Стокса при моделировании двумерных течений вязкой несжимаемой жидкости // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2014. №3 (29). С. 94–108.
2. Лашкин С.В., Козельков А.С., Ялозо А.В., Герасимов В.Ю., Зеленский Д.К. Исследование эффективности параллельной реализации алгоритма SIMPLE на многопроцессорных ЭВМ // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т. 9. № 3. С. 298–315. doi: 10.7242/1999-6691/2016.9.3.25
3. Беляев К.В., Гарбарук А.В., Стрелец М.Х., Шур М.Л., Спаларт П.Р. Опыт прямого численного моделирования турбулентности на суперкомпьютерах // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции. М.: Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова (Издательский Дом (Типография), 2016. С. 357–364.
4. Khaydarov V. Reaktionstechnische und CFD-Untersuchungen der Mikrovermischung in Mikroreaktoren unterschiedlicher Struktur und ihr Einfluss auf chemische Reaktionen zweiter Ordnung. Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doctor rerum naturalium. Technische Universität Dresden, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften. Dresden, 2018. 203 s.
5. Очирова А.А., Ершов Д.К. Применение метода Морриса для оценки чувствительности параметров моделей // Информационные технологии в науке, образовании и производстве (ИТНОП-2023): Сборник трудов IX Международной научно-технической конференции. Белгород, 2023. С. 245–248.
6. Clements P., Bachmann F., Bass L., Garlan D., Ivers J., Little R., Merson P., Nord R., Stafford J. Documenting Software Architectures: Views and Beyond. Addison-Wesley Professional, 2010. 592 p.
7. Ганди Р., Ричардс М., Форд Н. Head First. Архитектура ПО. СПб: Питер, 2025. 480 с.
8. Макконнелл С. Совершенный код: мастер-класс. СПб.: БХВ, 2022. 867 с.
9. Zachman J.A. A framework for information systems architecture // IBM Systems Journal. 1987. V. 26. N 3. P. 276–292. doi: 10.1147/sj.263.0276
10. Richards M., Ford N. Fundamentals of Software Architecture: An Engineering Approach. O'Reilly Media, 2020. 422 p.
11. Kruchten P. Architecture blueprints — the “4+1” view model of software architecture // Tutorial Proceedings on TRI-Ada ‘95: Ada’s role in Global Markets: Solutions for a Changing Complex World. 1995. P. 540–555. doi: 10.1145/216591.216611
12. Brown S. The C4 Model: for Visualising Software Architecture. Leanpub, 2022. 106 p.
13. Enríquez R., Salazar A. Software Architecture with Spring 5.0: Design and Architect Highly Scalable, Robust, and High-Performance Java Applications. Packt Publishing, 2018. 372 p.
14. Jacobson I., Spence I., Kerr B. Use-case 2.0: the hub of software development // Queue. 2016. V. 14. N 1. P. 95–123. doi: 10.1145/2898442.2912151
15. Portha J.-F., Allain F., Coupard V., Dandeu C., Girot E., Schaer E., et al. Simulation and kinetic study of transesterification of triolein to biodiesel using modular reactors // Chemical Engineering Journal. 2012. V. 207–208. P. 285–298. doi: 10.1016/j.cej.2012.06.106
16. Sotiriadou S., Ntonti E., Velliadou D., Antoniadis K.D., Assael M.J., Huber M.L. Reference correlation for the viscosity of ethanol from the triple point to 620 K and pressures up to 102 MPa // International Journal of Thermophysics. 2023. V. 44. N 3. P. 40. doi: 10.1007/s10765-022-03149-z
17. Zongo A.S., Vařtilingom G., Daho T., Caillol C., Hoffmann J.-F., Piriou B., et al. Temperature dependence of density, viscosity, thermal conductivity and heat capacity of vegetable oils for their use as biofuel in internal combustion engines // Advances in Chemical Engineering and Science. 2019. V. 9. N 1. P. 44–64. doi: 10.4236/aces.2019.91004
18. Richard R., Thiebaut-Roux S., Prat L. Modelling the kinetics of transesterification reaction of sunflower oil with ethanol in microreactors // Chemical Engineering Science. 2013. V. 87. P. 258–269. doi: 10.1016/j.ces.2012.10.014
19. Pontes P.C., Naveira-Cotta C.P., Quaresma J.N.N. Three-dimensional reaction-convection-diffusion analysis with temperature influence for biodiesel synthesis in micro-reactors // International Journal of Thermal Sciences. 2017. V. 118. P. 104–122. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.03.022
20. Rasouli M.R., Abouei Mehrizi A., Lashkaripour A. Numerical study on low Reynolds mixing of T-Shaped micro-mixers with obstacles.
1. Fomin A.A., Fomina L.N. Numerical solution of the Navier - Stokes equations in the modeling of two-dimensional viscous incompressible fluid flows. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2014, no.3 (29), pp. 94–108. (in Russian)
2. Lashkin S.V., Kozelkov A.S., Yalozo A.V., Gerasimov V.Y., Zelensky D.K. Efficiency analysis of parallel implementation of SIMPLE algorithm on multi-processor computers. *Computational Continuum Mechanics*, 2016, vol. 9, no. 3, pp. 298–315. (in Russian). doi: 10.7242/1999-6691/2016.9.3.25
3. Belyaev K.V., Garbaruk A.V., Strelets M.Kh., Shur M.L., Spalart P.R. Experience in direct numerical simulation of turbulence on supercomputers. *Proc. of the Russian Supercomputing Days*, 2016, pp. 357–364. (in Russian)
4. Khaydarov V. *Reaktionstechnische und CFD-Untersuchungen der Mikrovermischung in Mikroreaktoren unterschiedlicher Struktur und ihr Einfluss auf chemische Reaktionen zweiter Ordnung*. Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doctor rerum naturalium. Technische Universität Dresden, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften. Dresden, 2018. 203 s. (in German)
5. Ochirova A.A., Ershov D.K. Application of the Morris method to assess the sensitivity of model parameters. *Proc. of the 9th International Scientific and Technical Conference „Information Technologies in Science, Education and Production“ (ITNOP-2023)*, 2023, pp. 245–248. (in Russian)
6. Clements P., Bachmann F., Bass L., Garlan D., Ivers J., Little R., Merson P., Nord R., Stafford J. *Documenting Software Architectures: Views and Beyond*. Addison-Wesley Professional, 2010, 592 p.
7. Gandhi R., Richards M., Ford N. *Head First Software Architecture: A Learner’s Guide to Architectural Thinking*. O’Reilly Media, 2024. 483 p.
8. McConnell S. *Code Complete*. Microsoft Press, 2004, 960 p.
9. Zachman J.A. A framework for information systems architecture. *IBM Systems Journal*, 1987, vol. 26, no. 3, pp. 276–292. doi: 10.1147/sj.263.0276
10. Richards M., Ford N. *Fundamentals of Software Architecture: An Engineering Approach*. O’Reilly Media, 2020, 422 p.
11. Kruchten P. Architecture blueprints — the “4+1” view model of software architecture. *Tutorial Proceedings on TRI-Ada ‘95: Ada’s role in Global Markets: Solutions for a Changing Complex World*, 1995, pp. 540–555. doi: 10.1145/216591.216611
12. Brown S. *The C4 Model: for Visualising Software Architecture*. Leanpub, 2022, 106 p.
13. Enríquez R., Salazar A. *Software Architecture with Spring 5.0: Design and Architect Highly Scalable, Robust, and High-Performance Java Applications*. Packt Publishing, 2018, 372 p.
14. Jacobson I., Spence I., Kerr B. Use-case 2.0: the hub of software development // *Queue*. 2016. V. 14. N 1. P. 95–123. doi: 10.1145/2898442.2912151
15. Portha J.-F., Allain F., Coupard V., Dandeu C., Girot E., Schaer E., et al. Simulation and kinetic study of transesterification of triolein to biodiesel using modular reactors. *Chemical Engineering Journal*, 2012, vol. 207–208, pp. 285–298. doi: 10.1016/j.cej.2012.06.106
16. Sotiriadou S., Ntonti E., Velliadou D., Antoniadis K.D., Assael M.J., Huber M.L. Reference correlation for the viscosity of ethanol from the triple point to 620 K and pressures up to 102 MPa. *International Journal of Thermophysics*, 2023, vol. 44, no. 3, pp. 40. doi: 10.1007/s10765-022-03149-z
17. Zongo A.S., Vařtilingom G., Daho T., Caillol C., Hoffmann J.-F., Piriou B., et al. Temperature dependence of density, viscosity, thermal conductivity and heat capacity of vegetable oils for their use as biofuel in internal combustion engines. *Advances in Chemical Engineering and Science*, 2019, vol. 9, no. 1, pp. 44–64. doi: 10.4236/aces.2019.91004
18. Richard R., Thiebaut-Roux S., Prat L. Modelling the kinetics of transesterification reaction of sunflower oil with ethanol in microreactors. *Chemical Engineering Science*, 2013, vol. 87, pp. 258–269. doi: 10.1016/j.ces.2012.10.014
19. Pontes P.C., Naveira-Cotta C.P., Quaresma J.N.N. Three-dimensional reaction-convection-diffusion analysis with temperature influence for biodiesel synthesis in micro-reactors. *International Journal of Thermal Sciences*, 2017, vol. 118, pp. 104–122. doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2017.03.022
20. Rasouli M.R., Abouei Mehrizi A., Lashkaripour A. Numerical study on low Reynolds mixing of T-Shaped micro-mixers with obstacles.

20. Rasouli M.R., Abouei Mehrizi A., Lashkaripour A. Numerical study on low Reynolds mixing of T-Shaped micro-mixers with obstacles // *Transport Phenomena in Nanoscience and Microtechnology Series*. 2015. V. 3. N 2. P. 68–76. doi: 10.7508/tpnms.2015.02.001
21. Greenshields C.J., Weller H.G. *Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles*. CFD Direct Limited, 2022. 314 p.
22. Santana H.S., Tortola D.S., Silva J.L.jr, Taranto O.P. Biodiesel synthesis in micromixer with static elements // *Energy Conversion and Management*. 2016. V. 141. P. 28–39. doi: 10.1016/j.enconman.2016.03.089
23. Greenshields C.J., Weller H.G. *Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles*. CFD Direct Limited, 2022. 314 p.
24. Santana H.S., Tortola D.S., Silva J.L.jr, Taranto O.P. Biodiesel synthesis in micromixer with static elements // *Energy Conversion and Management*. 2016. V. 141. P. 28–39. doi: 10.1016/j.enconman.2016.03.089

Авторы

Ершов Даниил Константинович — инженер, АО «Атомэнергопроект», Санкт-Петербург, 197183, Российская Федерация; аспирант, Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург, 190013, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0001-6608-8891>, daniilershov2015@gmail.com

Боровинская Екатерина Сергеевна — доктор технических наук, доцент, профессор, Санкт-Петербургский государственный технологический институт, Санкт-Петербург, 190013, Российская Федерация, [sc 26029294400, https://orcid.org/0000-0001-5507-1226](https://orcid.org/0000-0001-5507-1226), melik_v@mail.ru

Authors

Daniil K. Ershov — Engineer, Atomenergoproekt JSC, Saint Petersburg, 197183, Russian Federation; PhD Student, Saint Petersburg State Technological Institute (Technical University), Saint Petersburg, 190013, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0001-6608-8891>, daniilershov2015@gmail.com

Ekaterina S. Borovinskaya — D.Sc., Associate Professor, Professor, Saint Petersburg State Technological Institute (Technical University), Saint Petersburg, 190013, Russian Federation, [sc 26029294400, https://orcid.org/0000-0001-5507-1226](https://orcid.org/0000-0001-5507-1226), melik_v@mail.ru

Статья поступила в редакцию 02.09.2025
Одобрена после рецензирования 19.02.2026
Принята к печати 24.05.2026

Received 02.09.2025
Approved after reviewing 19.02.2026
Accepted 24.05.2026



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»