

# Применение технологий удаленных вычислений для исследования физико-химических процессов

Э.Н. Мифтахов  
Башкирский государственный  
университет  
Уфа, Россия  
promif@mail.ru

С.А. Мустафина  
Башкирский государственный  
университет  
Уфа, Россия  
mustafina\_sa@mail.ru

Т.А. Михайлова  
Башкирский государственный  
университет  
Уфа, Россия  
t.a.mikhailova@yandex.ru

А.Х. Даминов  
Башкирский государственный  
университет  
Уфа, Россия  
azatdaminov@toltekplus.ru

**Аннотация**—Оценка технологических свойств продуктов физико-химической отрасли с применением средств математического моделирования осложняется отсутствием достаточной ресурсной и вычислительной базы, поскольку большой интерес вызывает необходимость осуществления серии расчетных задач для различных исходных данных. Эффективной в этом случае является организация системы удаленных вычислений средствами высокопроизводительного сервера. Актуальной задачей в этих условиях является разработка унифицированных методов и алгоритмов для организации системы удаленных вычислений с целью моделирования процессов физико-химической отрасли. Кроме того, предлагаемый подход способствует формированию единой базы лабораторных/вычислительных экспериментов, позволяющей ставить и решать перспективные задачи применения нейросетевых технологий в задачах химической кинетики.

**Ключевые слова**— облачные технологии, моделирование, физическая химия.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка высокоэффективных технологий в химико-технологической отрасли предполагает создание новых методов, позволяющих не только проводить эмпирическую оценку качества получаемого продукта, но и решать задачи проектирования энергосберегающих химико-технологических процессов и систем с целью получения продуктов производства с заданными свойствами. Большую актуальность в таком случае приобретают моделирующие программы и алгоритмы, которые позволяют оценивать технологические свойства получаемой продукции.

Сложность организации такого подхода обусловлена проблемой математического описания процесса с применением фундаментальных математических моделей и отсутствием достаточной ресурсной и вычислительной базы предприятия. Решение прямой задачи исследования с целью прогнозирования свойств продукта для различных начальных условий требует огромных вычислительных ресурсов. Очевидно, что постановка задач поиска оптимальных режимов ведения производства потребует многократного решения прямой задачи и, как следствие, приводит к невозможности вычисления подобных задач в разумные сроки стандартными средствами организации вычислений.

Ранее авторами работы уже были сделаны шаги по разработке локальных программных продуктов, позволяющих проводить частные исследования физико-химических процессов. На ряд из них имеются свидетельства о регистрации в федеральной службе по интеллектуальной собственности [1,2]. Однако их выполнение осуществляется средствами локальной системы ведения расчетов, без привлечения средств организации системы удаленных вычислений. Целью данного исследования является разработка унифицированных методов и алгоритмов для организации системы удаленных вычислений моделирования физико-химических процессов, которая позволит организовать одновременное выполнение нескольких расчетных задач с гибкой системой распределения вычислительных ресурсов.

## 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССА

При математическом описании сложных физико-химических процессов будем руководствоваться методологией, в соответствии с которой на начальном этапе описывается кинетический механизм ведения реакций, который ложится в основу кинетического и статистического подходов к исследованию процессов.

Кинетический подход (метод дифференциальных уравнений) [3,4], позволяет с применением численных методов решения за короткий вычислительный период получать зависимость усредненных молекулярных характеристик и расхода основных реагентов от времени. Основная масса предлагаемых модельных описаний выполнена с применением кинетического подхода. Кинетический подход к исследованию процессов успешно работает с применением как метода статистических моментов, так и метода производящих функций. Оба способа ориентированы на упрощение вида получаемой системы дифференциальных уравнений и приведение ее размерности к конечному виду.

Статистический подход (метод Монте-Карло) [5] работает по иному принципу и требует обработки и хранения всех макромолекул, участвующих в реакциях. Расчет занимает гораздо больший период, однако позволяет проводить детальное исследование свойств макромолекул. В рамках данного исследования подход его основан на методе, предложенном американским физиком Gillespie [6] для моделирования колебательных

реакций и адаптированном под процессы, описываемых с помощью серии последовательных химических реакций. Алгоритм метода может быть представлен в виде последовательности этапов, формирующих совершение определенного события. В качестве события будем рассматривать осуществление одной из реакций кинетической схемы, а вероятность ее осуществления в данный момент времени будем каждый раз пересчитывать.

### 3. КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ СХЕМА СИСТЕМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УДАЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Система организации сетевого взаимодействия [7] информационной системы для организации удаленных вычислений представлена тремя уровнями организации архитектуры.

Первый слой – клиентское приложение, которое должно выполнять две функции: позволять в удобном виде задавать технологические параметры ведения процесса физико-химического производства и предоставлять доступ к результатам вычисления, включая графическое и табличное представление. Для удобства пользователей, легкого доступа и возможных проблем совместимости представлена веб-интерфейсной оболочкой, написанной с помощью UI-фреймворка Blazor C# [8].

Второй слой – система организации хранения всей информации в базе данных. Основное наполнение формируют результаты вычислений, а также справочная информация, включая кинетические параметры, определяющие скорости химических реакций.

Третий слой (основой) – система организации вычислений, ответственная за выполнение необходимых клиенту расчетов. Этот слой отвечает за все вычисления и должен быть максимально подготовлен к выполнению ресурсоемких задач. Данный слой представлен двумя уровнями организации работы. Первый уровень – управляющая программа, которая взаимодействует с базой данных и в фоновом режиме периодически обращается к ее записям с целью проверки наличия задач на выполнение. Второй уровень содержит в своем ассортименте набор готовых bin файлов, направленных на выполнение определенной задачи из определяемой методологии ведения расчетов. Движение основных потоков данных между интерфейсной частью и системой организации вычислений в виде DFD-диаграммы изображено на рис. 1.

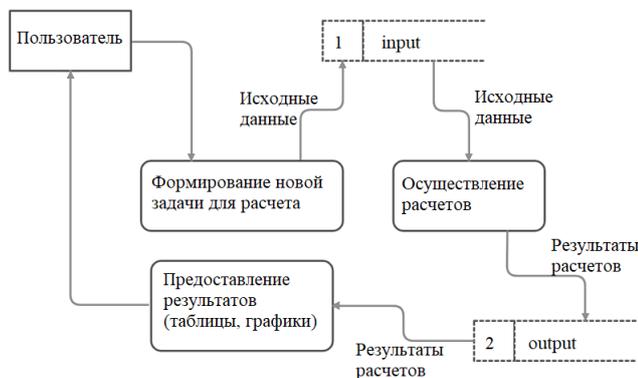


Рис. 1. DFD-диаграмма потоков данных между интерфейсной частью и системой организации вычислений

Возникающая задача визуализации получаемых результатов решена с применением графической библиотеки PlotLY JS, позволяющей производить построение графиков прямо в браузере клиента и не нагружать канал передачи данных. В качестве системы управления базой данных применяется СУБД MongoDB [9], поскольку она достаточно легко масштабируется и поддерживает функцию распределения нескольких таблиц единой базы данных между несколькими серверами.

### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагаемый подход и разработанная система организации удаленных вычислений позволяет более эффективно использовать вычислительные ресурсы и значительно сократить время выполнения расчетов [10]. Физическое разделение слоя вычислительной логики от слоя хранения данных способствует формированию единой базы лабораторных/вычислительных экспериментов, позволяющей ставить и решать задачи применения нейросетевых технологий в задачах химической кинетики.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2020-0027).

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Пат. РФ 2020610226. Решение прямой задачи непрерывного процесса полимеризации изопрена в присутствии микрогетерогенных каталитических систем (опубл. 2020).
- [2] Пат. РФ 2021618232. Решение обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения методом регуляризации А.Н. Тихонова (опубл. 2021).
- [3] Подвальный, С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации / С.Л. Подвальный. – М.: Химия, 1979. – 256 с.
- [4] Мифтахов, Э.Н. Исследование кинетики процесса полимеризации изопрена в присутствии неодимсодержащих каталитических систем, модифицированных в турбулентных потоках / Э.Н. Мифтахов, И.Ш. Насыров, С.А. Мустафина, В.П. Захаров // Журнал прикладной химии. – 2021. – Т. 94, № 1. – С. 81-87. DOI: 10.31857/S0044461821010114.
- [5] Мустафина, С.А. Исследование молекулярных характеристик продукта полимеризации изопрена на неодимсодержащей каталитической системе на основе моделирования методом Монте-Карло / С.А. Мустафина, Т.А. Михайлова, Э.Н. Мифтахов, В.А. Михайлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. – 2020. – Т. 42, № 4. – С. 138-148.
- [6] Gillespie, D. Exact Stochastic Simulation of Coupled Chemical Reactions / D. Gillespie // The Journal of Physical Chemistry. – 1977. – Vol. 81(25). – P.2340-2361. DOI:10.1021/j100540a008.
- [7] Thomas, E. Cloud Computing Concepts, Technology & Architecture / E. Thomas, Z. Mahmood, R. Puttini. – 2013. – 528 p.
- [8] Roth, D. Blazor for ASP.NET web forms developers (Microsoft Corporation) / D. Roth, J. Fritz, T. Southwick, S. Addie, S. Smith. – Redmond, Washington, 2021. – 98 p.
- [9] Daly, D. Performance Engineering and Database Development at MongoDB / D. Daly // Companion of the ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering. – 2021. – 129 p. DOI:10.1145/3447545.3451199.
- [10] Miftakhov, E. Developing methods and algorithms for cloud computing management systems in industrial polymer synthesis processes / E. Miftakhov, S. Mustafina, A. Akimov, O. Larin, A. Gorlov // Emerging Science Journal. – 2021. – Vol. 5(6). – P. 964-972. DOI:10.28991/esj-2021-01324.