

# Проектирование базы данных для хранения результатов экспериментов ведения периодического процесса полимеризации изопрена

Т.А. Михайлова<sup>1</sup>, С.А. Мустафина<sup>1</sup>, Э.Н. Мифтахов<sup>1</sup>, В.А. Михайлов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет, Заки Валиди 32, Уфа, Россия, 450076

<sup>2</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Кремлевская 18, Казань, Россия, 420008

## Аннотация

В статье предложен подход к организации базы данных для хранения и обработки результатов экспериментов ведения процесса полимеризации изопрена в присутствии микрогетерогенных каталитических систем. Подход может быть применен для работы с данными производственных и вычислительных экспериментов.

## Ключевые слова

База данных, проектирование, полимеризация, изопрен, периодический процесс

## 1. Введение

Каждое научное исследование невозможно без проведения эксперимента, при этом все они сопровождаются большим количеством результатов. В частности, в настоящее время широк ассортимент синтетических каучуков, в основе производства которых лежат процессы полимеризации. Их исследование представляет собой интерес как для производства, так и для науки. Изучение и модификация характеристик продуктов полимеризации сопровождается многократным проведением экспериментов как в промышленных, так и в лабораторных условиях. Так как для проведения исследований активно применяются методы математического моделирования, то проводятся и вычислительные эксперименты с целью расчета необходимых характеристик. В связи с этим возникает необходимость организации хранения результатов экспериментов для различной рецептуры и условий ведения процесса, что позволит использовать накопленные результаты для последующей обработки и анализа с целью модернизации производства. Предлагаемая организация хранения является актуальной задачей и необходима, в частности, при разработке SAAS-сервиса для комплексного исследования процессов промышленного синтеза полимеров с применением технологий облачных вычислений, что также является направлением исследований авторов. Для организации хранения результатов может быть применен подход с использованием баз данных.

## 2. Проектирование базы данных

Одним из наиболее распространенных полимерных материалов промышленного назначения является изопреновый каучук. Его производство представляет собой сложный технологический процесс полимеризации изопрена в присутствии микрогетерогенных каталитических систем. Подробное описание и кинетическая схема приведены в работах [1, 2]. Для моделирования процессов полимеризации в основном используются два подхода: кинетический и статистический [3], алгоритмы моделирования с помощью каждого подхода авторами программно реализованы. Для организации хранения результатов был выбран формат реляционной базы данных. Особенностью построения предлагаемой в работе модели является то, что она сочетает в себе возможность сохранения результатов как промышленных и лабораторных, так и вычислительных экспериментов, проводимых согласно обоим подходам к моделированию. В качестве значимых объектов были выделены следующие сущности:

мономер, катализатор, алюминийорганическое соединение (АОС), схема (характеризует определенную кинетическую схему процесса), реакция (характеризует реакции, составляющие кинетическую схему, и константы скоростей реакции), рецептура, эксперимент (характеризует условия его ведения), результат, молекулярно-массовое распределение (ММР). Перечисленные сущности были реализованы в среде Microsoft SQL Server в виде таблиц, выделены ключевые поля и связи между таблицами (Рисунок 1).

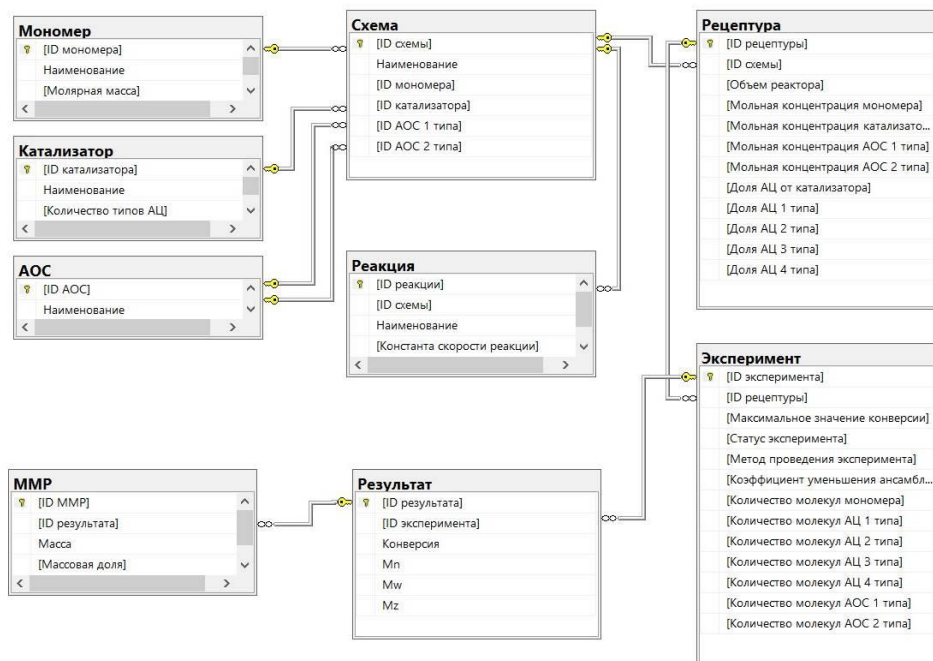


Рисунок 1: Диаграмма базы данных

### 3. Заключение

Реализация предлагаемого подхода позволит структурировать многочисленные результаты экспериментов по исследованию процессов полимеризации, а в дальнейшем автоматизировать процесс записи данных в базу, что поспособствует логическому переходу от локальных программ к сетевым приложениям, работающим по принципу SAAS. Список сущностей может быть скорректирован в зависимости от типа процесса, рецептуры и условий протекания.

### 4. Благодарности

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

### 5. Литература

- [1] Захаров, В.П. Кинетическая неоднородность титановых и неодимовых катализаторов производства 1,4-цис-полиизопрена / В.П. Захаров, В.З. Мингалеев, А.А. Берлин, И.Ш. Насыров, Д.А. Жаворонков, Е.М. Захарова // Химическая физика. – 2015. – Т. 34, № 3. – С. 69-75.
- [2] 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 ТвГУ. Серия «Химия». – 2020. – № 4(42). – С. 138-148. DOI: 10.26456/vtchem2020.4.16.
- [3] Подвальный, С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации / С.Л. Подвальный. – Москва: Химия, 1979. – 256 с.