

SaaS – сервис для решения задач химической кинетики

А.Х. Даминов¹, Э.Н. Мифтахов¹, С.А. Мустафина¹

¹Башкирский государственный университет, Заки Валиди 32, Уфа, Россия, 450076

Аннотация

Описывается облачный сервис для решения задач химической кинетики. Разрабатываемый SaaS – сервис предназначен для использования различными предприятиями химической промышленности, где присутствует необходимость в программном обеспечении, позволяющем реализовать математическое моделирование химических процессов. Предлагаемое решение предоставляет удаленный доступ для комплексного изучения кинетики и механизмов химических процессов, а также дает возможность автоматизировать процесс математического моделирования. Сервис позволяет выбирать механизмы реакций, сохранять справочную и экспериментальную информацию в базе данных, строить кинетические модели химических процессов.

Ключевые слова

Математическое моделирование, кинетика, SaaS, облачные вычисления

1. Введение

Современный мир стоит на пороге четвертой промышленной революции, которая должна кардинально изменить подход к организации производства. Лидеры промышленных производств во всем мире уже называют цифровую трансформацию главным приоритетом для своего бизнеса. На фоне этих изменений, в химической промышленности также ожидаются изменения, связанные с внедрением цифровых прототипов производства. В частности, для оптимизации производственных процессов постоянно требуется решать задачи химической кинетики [1]. Это позволяет определять зависимости концентраций реагирующих веществ и механизмы реакций по кинетическим кривым, что в свою очередь позволяет повысить рентабельность и оптимизировать производство. Часто при такой постановке исследователи сталкиваются с отсутствием современного программного обеспечения, либо с недостатком вычислительных ресурсов. Чтобы решить эти две проблемы, предлагается идея разработки облачного сервиса [2,3], позволяющего проводить эмпирические исследования химических процессов и с помощью многочисленных вычислений экспериментально подбирать оптимальные режимы производства. Реализация сервиса с использованием облачных технологий [4], предоставляет огромные вычислительные ресурсы в режиме удаленного доступа.

2. Принципиальная схема реализации SaaS-сервиса для решения задач химической кинетики

Для удобства общего пользования доступ к сервису осуществляется через Web-интерфейс. После авторизации предоставляется возможность выбрать концептуальную схему и основные параметры производства, после чего информационно-аналитическая система формирует пакет с входными параметрами задачи и отправляет его на вычислительный сервер. В зависимости от настроек и входных параметров в режиме реального времени формируется математическая модель, описывающая заданный этап производства и подбирается необходимый алгоритм решения. Затем результаты вычислений сохраняются в базе данных, с возможностью графического отображения. Концептуальная схема работы системы отображена на рис.1.

Для удобства разработки предлагается унифицировать процесс разработки вычислительных модулей, согласно которому все разрабатываемые алгоритмы будут представлены в виде

исполнимых bin-файлов. В свою очередь к ним предъявляются одинаковые требования по формату входных и выходных данных.



Рисунок 1: Концептуальная схема реализации SaaS-сервиса

3. Заключение

Представленная в работе схема работы SaaS-сервиса позволит сделать огромный шаг к централизации вычислительных систем, описывающих химическое производство. Постановка многих задач оптимизации производства в перспективе требует огромного количества вычислительных ресурсов, что ставит под сомнение возможность выполнения подобных расчетов средствами обычного персонального компьютера. Возможность хранения результатов вычисления позволит сформировать ценный цифровой ресурс для дальнейших перспективных исследований.

4. Литература

- [1] Подвальный, С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации. – М.: Химия, 1979. – 256 с.
- [2] Михайлова, Т.А. Облачные вычисления для исследования процессов полимеризации / Т.А. Михайлова, С.И. Мустафина // Материалы конференции «Актуальные проблемы науки и образования в современном вузе». – 2019. – С. 444-448.
- [3] Сахибгареева, М.В. Облачный сервис решения задач химической кинетики с использованием параллельных вычислений / М.В. Сахибгареева, Е.И. Глущенко, Л.В. Еникеева, Г.М. Шарипова // Системы и средства информатики. – 2017. – Т. 27, № 1. – С. 155-166.
- [4] Erl, T. Cloud Computing: Concepts, Technology & Architecture / T. Erl, Z. Mahmood, R. Puttini. – Prentice Hall, 2019. – 528 p.