ОБЛАЧНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

@ Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина

promif@mail.ru

УДК 004.424, 678.7

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.92.

Рассматриваются основные сложности проведения вычислительных экспериментов средствами локальных ЭВМ и актуальность внедрения технологий облачных вычислений при описании расчетных модулей с целью моделирования физико-химических процессов.

Ключевые слова: моделирование, облачные технологии, вычисления, физическая химия.

Cloud technologies in modeling physical and chemical processes

The main difficulties of carrying out computational experiments by means of local computers and the relevance of the introduction of cloud computing technologies in the description of computational modules in order to simulate physical and chemical processes are considered.

Keywords: modeling, cloud computing, computing, physical chemistry.

Более 60 лет существует научное направление – математическое моделирование химических процессов и реакторов, методология которого была разработана в классических работах академика РАН Г.К. Борескова и члена-корреспондента РАН М.Г. Слинько. В основе этой методологии лежат знания кинетики химических реакций, применение которых позволяет создавать инструмент эмпирической оценки качества получаемого продукта. В настоящий момент разработка высокоэффективных технологий в химико-технологической отрасли предполагает создание инновационных методов, позволяющих не только проводить оценку качества получаемого продукта, но и решать задачи проектирования энергосберегающих химико-технологических процессов и систем с целью получения продуктов производства с заданными свойствами. В связи с этим большую актуальность приобретают моделирующие программы и алгоритмы, позволяющие не только оценивать технологичные свойства

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

Мифтахов Эльдар Наилевич, к.ф.-м.н., БашГУ (Уфа, Россия); Eldar Miftakhov (Bashkir State University, Ufa, Russia)

Мустафина Светлана Анатольевна, д.ф.-м.н., профессор, БашГУ (Уфа, Россия); Svetlana Mustafina (Bashkir State University, Ufa, Russia)

продукции, но и служащие в качестве инструмента организации подбора оптимальных условий организации производства.

Системный подход в моделировании сложных химико-технологических процессов предполагает переход от отдельных реакторов к сложным системам, состоящих из множества аппаратов, и последовательное усложнение модельного описания системы по схеме кинетическое описание процесса – учет гидродинамических закономерностей при организации непрерывного производства – контроль качественных показателей получаемого продукта – управление технологическим процессом. Очевидно, что задача построения адекватной математической модели, способной в полной мере отражать показатели получаемого продукта, представляет собой итерационное решение прямых и обратных задач химической кинетики с применением различных математических подходов и методов. Постановка задач поиска оптимальных режимов ведения производства в этом случае потребует многократного решения прямой задачи и, как следствие, может привести к невозможности вычисления подобных задач в разумные сроки стандартными средствами организации вычислений.

Решение проблемы нехватки вычислительных ресурсов возможно за счет организации проведения всех вычислительных экспериментов средствами высокопроизводительного кластера. Необходимость регулярных ресурсоемких расчетов определяет актуальность разработки таких систем сетевой направленности, которые позволят в режиме единого окна предоставить доступ к вычислительным ресурсам высокопроизводительного кластера целому ряду пользователей. А сетевой подход с разделением логики хранения данных от вычислительной логики также позволит развить теорию хранения вычислительных и лабораторных экспериментов в едином информационном пространстве и сформировать ценный источник данных для глобального развития теории исследования физико-химических процессов.

Литература

1. *Подвальный С.Л.* Моделирование промышленных процессов полимеризации. — М.: Химия, 1979.
2. *Miftakhov E.N., Mustafina S.A., Mikhailova T.A., Podvalny S.L.* Development of a cloud SaaS service for a comprehensive research of polymerization processes // *Journal of Physics*, **1902**:1 (2021).
3. *Erl T., Mahmood Z., Puttini R.* Cloud Computing: Concepts, Technology & Architecture. — Prentice Hall, 2019.