

Разработка базы данных для ПО для моделирования химико-технологических процессов

**Верхозин М.А. (ИТМО), Безруких П.Д. (ИТМО), Хмелёв А.П. (ИТМО),
Гриценко Е. Ф. (НИ ТПУ)**

**Научный руководитель – кандидат технических наук, Щемелинин В.Л.
(ИТМО)**

Введение. Моделирование химико-технологических процессов требует использования обширных массивов данных, включая свойства компонентов, параметры химических реакций и их физико-химические характеристики [1]. Создание надежной и гибкой базы данных является ключевым этапом разработки программного обеспечения для таких расчетов. Разработка универсальной структуры базы данных позволяет обеспечить высокую точность моделирования, а также возможность ее расширения и адаптации под конкретные задачи пользователей. Это особенно важно в условиях растущего объема данных и усложнения технологических процессов, где требуется постоянное обновление информации о веществах и реакция.

Основная часть. В рамках проекта была прописана архитектура базы данных для программного обеспечения моделирования химико-технологических процессов. База данных состоит из двух основных частей:

1. База данных свойств компонентов: в качестве начального набора данных были выбраны 15 групп компонентов, которые наиболее часто используются при моделировании нефтехимических процессов [2]. Структура базы данных позволяет пользователям добавлять новые типы свойств, что делает систему гибкой и легко адаптируемой.
2. База данных химических реакций и их параметров: данный модуль содержит информацию о химических реакциях, их скоростях, термодинамических параметрах и других характеристиках. Встроена возможность со стороны пользователя дополнять базу новыми реакциями и их параметрами.

Данная система будет внедрена в ПО для моделирования химического реактора и будет одним из основной из основных частей при составлении математических моделей.

Для реализации базы данных была выбрана система управления базами данных (СУБД) MongoDB. Выбор СУБД обусловлен её возможностью работы с неструктурированными и слабоструктурированными данными, а также поддержкой глубокой вложенности, что особенно важно для описания сложных химических систем. Архитектура базы данных спроектирована таким образом, чтобы пользователи могли не только дополнять её новыми данными, но и обмениваться информацией между собой, создавая общую базу знаний для различных пользователей.

Пользовательская гибкость системы достигается за счет модульной структуры базы данных, которая позволяет добавлять новые категории данных, определяемые самими пользователями. Это делает систему универсальной и применимой для широкого круга задач в химической промышленности.

Выводы. Прописана архитектура базы данных для программного обеспечения моделирования химико-технологических процессов, состоящая из двух основных частей: базы данных свойств компонентов и базы данных химических реакций. Выбранная СУБД MongoDB обеспечивает необходимую гибкость и масштабируемость системы. Реализованная структура базы данных позволит пользователям постоянно дополнять, расширять и обмениваться информацией, что делает систему удобной для использования в современных условиях развития технологий.

Список использованных источников:

1. Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие. — 2-е изд., перераб. и доп. — СПб.: Издательство «Лань», 2014. — 176 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература). — ISBN 978-5-8114-1533-5.
2. Маггеррамов А.М., Ахмедова Р.А., Ахмедова Н.Ф. Нефтехимия и нефтепереработка. Учебник для высших учебных заведений. Баку: Издательство «Баки Университети», 2009, 660 с.
3. Liu P., Grossman R. Storing Chemical Data with NoSQL MongoDB: A Document-Based Approach // Cheminformatics 2012. URL: <https://cheminf20.org/2012/05/28/storing-chemical-data-with-nosql-mongodb-a-document-based-approach/> (дата обращения: 17.02.2025).