

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ МОДЕЛИ ХРАНЕНИЯ И АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

© Т. А. Михайлова, И. И. Мустафин*, С. А. Мустафина

Уфимский университет науки и технологий,
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

*Email: ilnur.mustafinn@gmail.com

В работе представлена разработка и реализация модели хранения и анализа данных и результатов экспериментов для исследования периодических процессов полимеризации. Предложен подход к организации реляционной базы данных, обеспечивающий структурированное хранение параметров моделирования, кинетических схем, рецептур и результатов расчетов, включая молекулярно-массовые характеристики полимеров. Реализована архитектура программного комплекса, объединяющая модуль моделирования, реализованный методом Монте-Карло, и систему управления базами данных SQL Server, что позволяет автоматизировать процесс накопления и обработки информации. Продемонстрированы возможности системы для анализа и сопоставления результатов вычислительных экспериментов на примере полимеризации изопрена в реакторе периодического действия. Использование базы данных обеспечивает повышение воспроизводимости результатов, ускоряет обработку данных и создает основу для последующей оптимизации технологических режимов и внедрения элементов цифрового двойника химико-технологических процессов.

Ключевые слова: полимеризация, моделирование химико-технологических процессов, база данных, обработка больших данных, оптимизация процессов, цифровой двойник.

Введение

Обработка результатов вычислительных экспериментов в химико-технологических исследованиях является критически важным этапом, обеспечивающим систематизированный анализ сложных процессов и выявление оптимальных параметров. В современных научных и промышленных задачах, где ключевыми факторами являются температура, давление, концентрация реагентов и длительность реакций, компьютерные модели позволяют минимизировать зависимость от физического экспериментирования, сокращая временные и материальные затраты [1].

Большие массивы данных, генерируемые в ходе симуляции, дают возможность выявить скрытые корреляции и механизмы, недоступные традиционным методам анализа. Это также способствует верификации моделей и устранению систематических погрешностей, что повышает точность прогнозирования поведения систем и качество конечных продуктов [2].

Современные исследования в области полимеризации сопровождаются накоплением значительных объемов экспериментальных и вычислительных данных, требующих систематизации и эффективной обработки. При отсутствии структурированного подхода к хранению информации результаты экспериментов остаются разрозненными, что затрудняет их повторное использование и анализ. Организация данных в виде специализированной базы данных позволяет не только автоматизировать процесс их накопления, но и обеспечить удобство последующей обработки, сопоставления и интерпретации результатов [3].

Автоматизация вычислительных процессов обеспечивает не только ускорение обработки данных, но и повышение воспроизводимости результатов за счет минимизации влияния человеческого фактора. Полимеризационные процессы, обладающие многостадийной природой и высокой чувствительностью к внешним факторам, требуют комплексного подхода к их управлению и анализу [4–5].

Автоматизация процесса регистрации и хранения результатов экспериментов является важным этапом цифровизации химико-технологических исследований. Использование баз данных позволяет минимизировать ручной ввод информации, снизить вероятность ошибок и обеспечить целостность данных. Кроме того, централизованное хранение результатов открывает возможности для их дальнейшего анализа и использования в задачах оптимизации технологических процессов [3]. Под автоматизацией здесь подразумевается интеграция трех ключевых компонентов:

1. Численное моделирование, позволяющее описывать кинетику реакций, массо- и теплоперенос.
2. Динамический контроль реакционных условий, такой как автоматическая корректировка температуры, давления, концентраций реагентов.
3. Интеллектуальный анализ данных для выявления скрытых закономерностей на основе исторических и текущих данных.

Такой подход позволяет создать замкнутую систему, в которой модель процесса может быть интегрирована с измерительными датчиками технологического оборудования, фиксирующими ключевые параметры процесса:

температуру, давление и концентрации реагентов. В этом случае данные с датчиков могут передаваться в программный комплекс и использоваться для уточнения входных параметров модели, а результаты моделирования – для поддержки принятия решений по управлению процессом (например, корректировки температуры или дозировки компонентов). Алгоритмы анализа данных обеспечивают адаптацию параметров модели и повышение точности прогнозирования [6].

Эффективность автоматизации напрямую зависит от качества и доступности данных. Реализация процессов полимеризации в промышленных условиях сопровождается генерацией объемных массивов информации: временные ряды концентраций мономеров, данных о молекулярно-массовом распределении, вязкостных характеристиках, параметрах теплообмена и т.д. Без структурированного хранения и обработки этих данных невозможно обеспечить стабильность процесса, верификацию моделей или прогнозирование свойств конечного продукта [7]. Централизованная база данных становится не просто архивом, а активным инструментом для анализа, позволяющим связывать входные параметры (температура, состав сырья) с выходными характеристиками (молекулярная масса, прочность материала). Именно такой подход создает основу для дальнейшего применения искусственного интеллекта [8].

На основе накопленных данных алгоритмы машинного обучения могут выявлять сложные многомерные зависимости, которые недоступны традиционным методам анализа [8]. Например, они могут предсказывать оптимальные условия реакции, минимизировать отклонения от целевых характеристик или выявлять ранние признаки нестабильности процесса. Интеграция таких подходов в жизненный цикл продукта способствует ускорению внедрения инновационных материалов с заданными характеристиками, обеспечивая конкурентоспособность в быстро меняющейся промышленной среде.

Материалы и методы

Для реализации системы хранения и анализа результатов моделирования полимеризационного процесса был применен подход, основанный на последовательном проектировании структуры базы данных: от концептуальной модели к логической и далее к физической реализации.

На этапе концептуального проектирования были выделены основные сущности предметной области, отражающие ключевые элементы процесса полимеризации: мономер, катализатор, алюминийорганическое соединение (АОС), схема (характеризует определенную кинетическую схему процесса), реакция (характеризует реакции, составляющие кинетическую схему, и константы скоростей реакции), рецептура (характеризует рецептуру ведения процесса и начальные данные), эксперимент (характеризует условия ведения эксперимента) и результат (характеризует результаты проведенного эксперимента). Для каждой сущности определен набор атрибутов, характеризующих ее свойства (например, состав, концентрации, технологические параметры, молекулярно-массовые характеристики), среди которых были выделены ключевые атрибуты [9].

На следующем этапе концептуальная модель была преобразована в логическую реляционную модель. Определены связи между сущностями:

- связи «мономер-схема», «катализатор-схема» и «АОС-схема» будут характеризоваться типом связи «один-ко-многим», т.к. мономер/катализатор/АОС может присутствовать во многих схемах ведения процесса, в то время как в схеме должен присутствовать определенный мономер/катализатор/АОС;

- связь «схема-реакция» будет характеризоваться типом связи «один-ко-многим», т.к. одной кинетической схеме могут соответствовать несколько реакций, в то время как реакция должна относиться к конкретной кинетической схеме;

- связь «схема-рецептура» будет характеризоваться типом связи «один-ко-многим», т.к. одной кинетической схеме могут соответствовать различные рецептуры ведения процесса, в то время как заданная рецептура относится к конкретной кинетической схеме;

- связь «рецептура-эксперимент» будет характеризоваться типом связи «один-ко-многим», т.к. согласно определенной рецептуре могут быть проведены многие эксперименты (как лабораторные, так и вычислительные), в то время как каждый эксперимент проводится при заданной рецептуре;

- связь «эксперимент-результат» будет характеризоваться типом связи «один-ко-многим», т.к. одному эксперименту могут соответствовать несколько полученных результатов (промежуточные и итоговый), в то время как каждый результат может быть получен по итогам проведения определенного эксперимента.

Физическая реализация модели выполнена в виде реляционной базы данных, в которой каждая сущность представлена отдельной таблицей [10]. Структура таблиц и связи между ними спроектированы с учетом требований нормализации, что позволило устранить избыточность данных и обеспечить их согласованность при хранении и обработке.

Реализация представленной модели выполнена в SQL Server 19, что обеспечивает масштабируемость, поддержку сложных запросов, безопасность и возможность интеграции с алгоритмами машинного обучения для дальнейшего анализа и выявления закономерностей. Схема базы данных представлена на рис. 1.

Разработанная структура базы данных обеспечивает централизованное хранение параметров моделирования, промежуточных и итоговых результатов, а также сопутствующих метаданных, что создает основу для последующего анализа и расширения функциональности системы. Предложенный подход к организации базы данных соответствует современным требованиям к системам обработки экспериментальных и вычислительных данных, предполагая возможность работы как с результатами численного моделирования, так и с промышленными данными. Такая универсальность обеспечивает расширяемость системы и ее адаптацию к различным типам полимеризационных процессов [3].

Результаты и обсуждение

Ранее авторами была создана программа моделирования процесса полимеризации методом Монте-Карло [5]. Для реализации взаимодействия программного комплекса с реляционной базой данных разработана архитектура, объединяющая основные модули программы, вычислительную библиотеку и систему хранения данных. Основной модуль, написанный на C#, обеспечивает интерфейс для ввода параметров и визуализации результатов, а библиотека на C++ содержит алгоритмы моделирования полимеризационного процесса. Оба компонента взаимодействуют с базой данных SQL Server через структурированные запросы, что позволяет автоматически сохранять результаты вычислений, анализировать зависимости и верифицировать модели. Представленная схема иллюстрирует поток данных между компонентами системы, подчеркивая роль базы данных как центрального хранилища информации, обеспечивающего целостность и доступность данных для научных исследований (рис. 2).

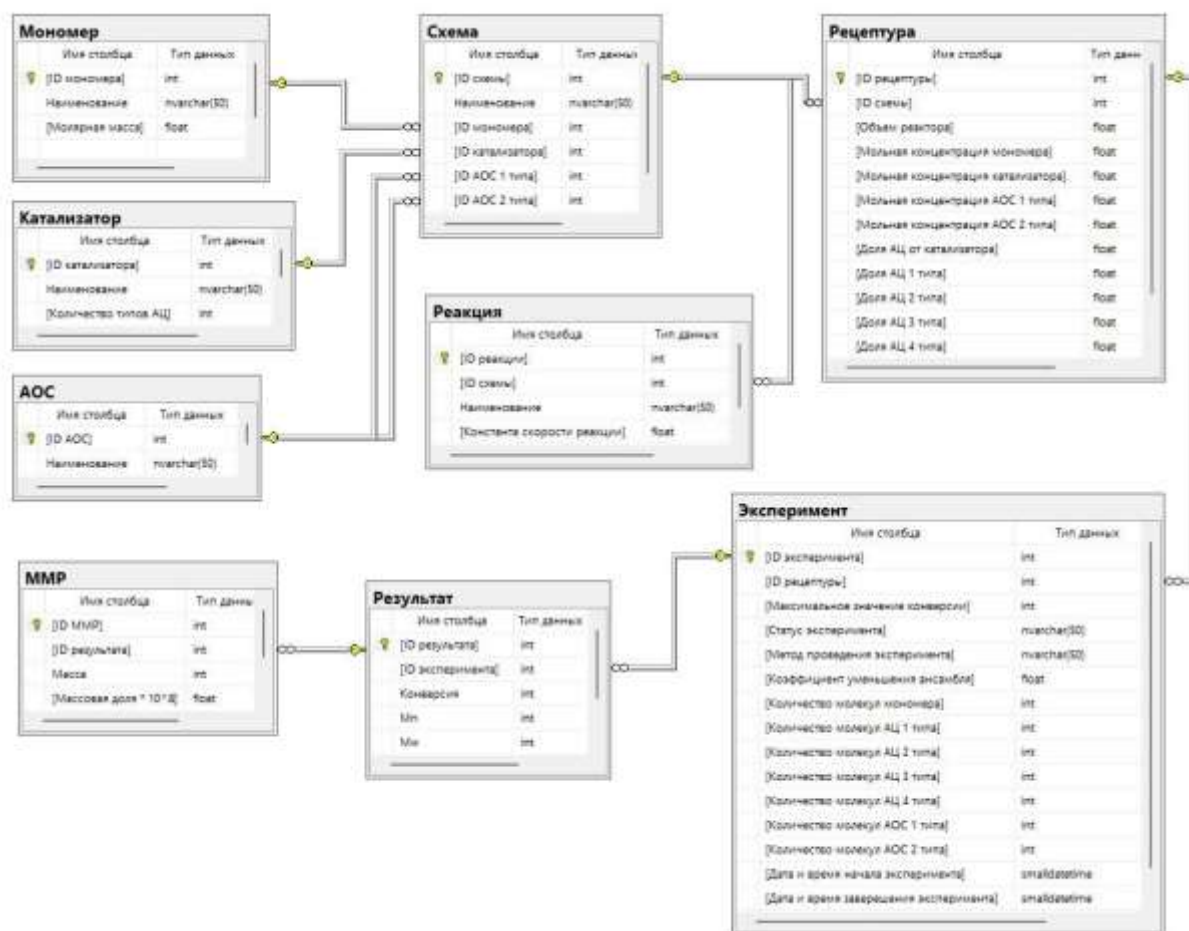


Рис. 1. Диаграмма базы данных.

В процессе работы программного комплекса таблицы базы данных заполняются автоматически на основе данных, генерируемых в ходе моделирования полимеризации изопрена. Программа передает стартовые параметры в вычислительный модуль, который рассчитывает динамику процесса. В результате моделирования и выполнения основной вычислительной функции происходит заполнение всех таблиц базы данных согласно условиям моделирования и промежуточным результатам. Они фиксируются в виде наборов данных, описывающих

изменение характеристик процесса в зависимости от степени конверсии мономера: среднечисленной и средне-массовой молекулярных масс, а также полидисперсности продукта. Эти данные структурированно записываются в соответствующие таблицы через SQL-запросы, минимизируя риск ошибок при ручном вводе, который при необходимости тоже может быть использован.

Использование базы данных в качестве централизованного хранилища результатов позволяет существенно упростить обработку экспериментальной информации и повысить эффективность анализа. В отличие от традиционного файлового хранения, база данных обеспечивает быстрый доступ к данным, возможность формирования выборок и выполнения сравнительного анализа различных экспериментов, что является ключевым преимуществом при исследовании сложных полимеризационных процессов [3].

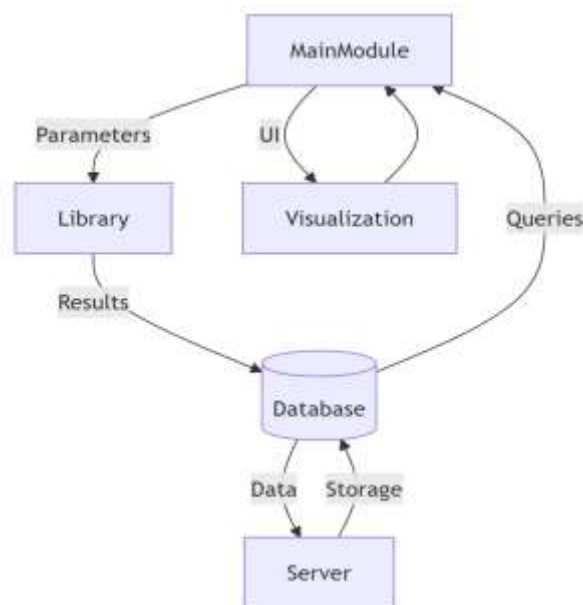


Рис. 2. Поток данных между компонентами системы.

Взаимодействие с базой данных в программном комплексе реализовано с использованием низкоуровневого ODBC API, что обеспечивает полный контроль над операциями доступа к данным. Схема работы включает инициализацию среды, установку соединения, подготовку и выполнение SQL-запросов, а также последующее освождение ресурсов.

На рис. 3 представлена обобщенная схема взаимодействия приложения с базой данных. Отдельные блоки схемы не детализируют конкретные структуры данных и отражают типовые этапы выполнения операций (подготовка запроса, привязка параметров, выполнение и получение результатов). Приведенные на схеме операции иллюстрируют общий принцип работы с базой данных и не ограничиваются только отдельными таблицами. В реальной реализации программный комплекс осуществляет чтение и запись данных для всех сущностей базы, включая рецептуру, условия эксперимента, кинетические схемы и результаты моделирования. Использование ODBC API позволяет детально управлять типами данных и параметрами выполнения запросов, однако требует ручного управления ресурсами, что повышает сложность разработки. В перспективе для повышения уровня абстракции и упрощения сопровождения системы может быть рассмотрен переход к технологии Object-Relational Mapping, позволяющей работать с данными базы в виде объектов программы без прямого написания SQL-запросов, или к высокоуровневым библиотекам доступа к данным, которые автоматически управляют соединениями и операциями чтения и записи данных.

Для демонстрации возможностей системы выполнен вычислительный эксперимент по имитации протекания процесса полимеризации изопрена в реакторе периодического действия в условиях, определяемых микрогетерогенной каталитической системой на основе NdCl_3 (табл.).



Рис. 3. Схема взаимодействия с базой данных через ODBC API.

Таблица

Условия проведения процесса

Параметр	Значение / Описание
Исследуемый процесс	Полимеризация изопрена
Тип каталитической системы	Микрогетерогенная, на основе NdCl ₃
Соотношение компонентов каталитической системы (мольное)	NdCl ₃ : ТИВА : Пиперилен = 1 : 12 : 2
Дозировка катализатора	1 моль NdCl ₃ на 10 000 моль изопрена
Концентрация мономера (изопрен)	15% масс. в реакционной смеси
Температура процесса	20 °C
Содержание примесей (изоамилены)	0% масс.
Ключевое условие	Отсутствие примесей изоамиленов

В соответствии с условиями в табл. получены следующие мольные концентрации реагентов:

- мольная концентрация изопрена – 1,39 моль/л;
- мольная концентрация диизобутилалюминийгидрида (ДИБАГ) – 0,000177 моль/л;
- мольная концентрация триизобутилалюминия (ТИБА) – 0,00168 моль/л;
- мольная концентрация катализатора – 0,00014 моль/л.

При этом концентрация активных центров задавалась в количестве 5% от закладываемого объема катализатора в мольном соотношении.

Модель, реализованная методом Монте-Карло, позволяет предсказывать молекулярно-массовые характеристики продукта полимеризации, ранее уже демонстрировала согласованность с кинетическим моделированием и экспериментальными данными [11–12].

В результате имитации протекания эксперимента происходит заполнение таблиц базы данных. На рис. 4 представлен фрагмент таблицы «Рецептура» базы данных, содержащий запись рецептуры вычислительного эксперимента (ID рецептуры: 5), параметры которого соответствуют описанным условиям.

ID рецептуры	ID схемы	Объем реактора	Мольная концентрация мономера	Мольная концентрация катализатора	Мольная концентрация АОС 1 типа
5	1	1	1,39	0,00014	0,000177
6	2	1	1,388	0,0014	0,0014
			Мольная концентрация АОС 2 типа	Доля АЦ от катализатора	Доля АЦ 1 типа
			0,00168	0,05	1
			0	0,022	0,08
					Доля АЦ 2 типа
					0
					Доля АЦ 3 типа
					0
					Доля АЦ 4 типа
					0

Рис. 4. Фрагмент таблицы «Рецептура» с параметрами рецептуры вычислительного эксперимента.

Параметры вычислительных экспериментов согласно данной рецептуре приведены на рис. 5 (ID эксперимента: 59 / 60 / 61). Они отличаются числом задействованных в моделировании молекул.

ID эксперимента	ID рецептуры	Конверсия	Статус эксперимента	Метод проведения эксперимента	Коэффициент уменьшения ансамбля	Количество молекул мономера
59	5	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-17	8370776
60	5	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-16	83707757
61	5	80	Завершен	Метод Монте-Карло	2E-16	167415514
62	1	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-18	837078
63	2	80	Расчет	Метод Монте-Карло	1E-18	835873
64	5	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-17	8370776
65	7	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-17	8358731
66	9	80	Расчет	Метод Монте-Карло	2E-16	167174628
67	1	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-18	837078
68	1	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-18	837078
69	1	80	Завершен	Метод Монте-Карло	1E-18	837078

Рис. 5. Фрагмент таблицы «Эксперимент».

Выборка данных для построения сопоставления зависимостей среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс от степени конверсии мономера выполнялась с использованием SQL-запроса:

```
SELECT [ID результата], [ID эксперимента], [Конверсия], [Mn], [Mw],
CAST([Mw] AS FLOAT) / CAST([Mn] AS FLOAT) as
[Коэффициент полидисперсности]
FROM [Polymerization].[dbo].[Результат]
WHERE [ID эксперимента] IN (59,60,61)
```

Результаты одного из вычислительных экспериментов отображены во фрагменте таблицы «Результат» на рис. 6.

ID результата	ID эксперимента	Конверсия	Mn	Mw	Коэффициент полидисперсности
309	61	5	214457	344528	1,6065131937871
310	61	10	306515	540219	1,7624553447629
311	61	15	348965	650350	1,86365394810368
312	61	20	361502	708388	1,95956868841666
313	61	25	363255	714185	1,96607066661161
314	61	30	365013	720048	1,97266398731004
315	61	35	366396	721943	1,97038996058909
316	61	40	367921	726586	1,97484242541198
317	61	45	369926	735869	1,98923298173148
318	61	50	369707	737421	1,99460924461804
319	61	55	365766	732518	2,0026957125594
320	61	60	360767	725267	2,01034739873658
321	61	65	356353	718452	2,01612446085763
322	61	70	349977	710043	2,02882760867143
323	61	75	342107	698901	2,04293101281178
324	61	80	333657	685659	2,05498161285392

Рис. 6. Фрагмент таблицы «Результат» с данными вычислительного эксперимента.

На рис. 7–9 представлены результаты сопоставления зависимостей характеристик от степени конверсии для проведенных вычислительных экспериментов.

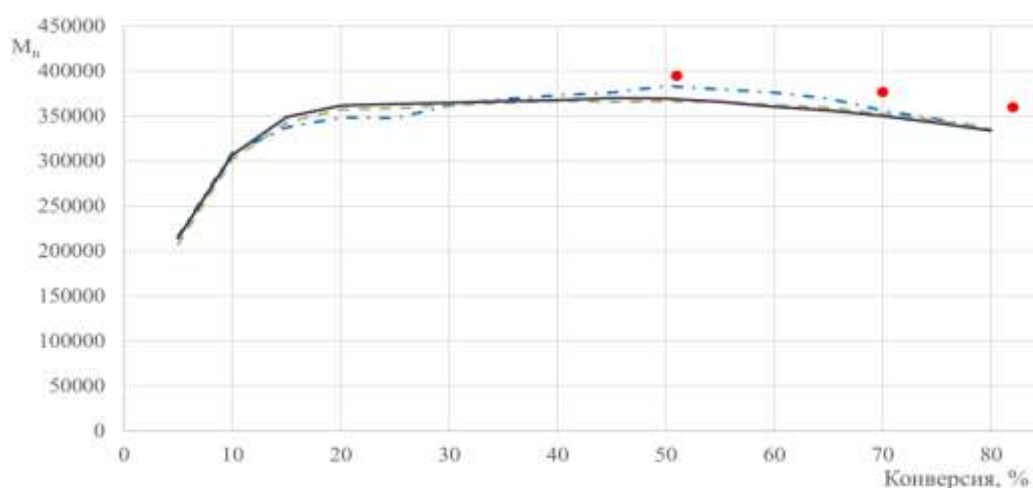


Рис. 7. Сравнение зависимостей среднечисленной молекулярной массы от степени конверсии для различных вычислительных экспериментов (штрихпунктир – эксперимент 59, пунктир – эксперимент 60, сплошная линия – эксперимент 61, точки – производственный эксперимент).

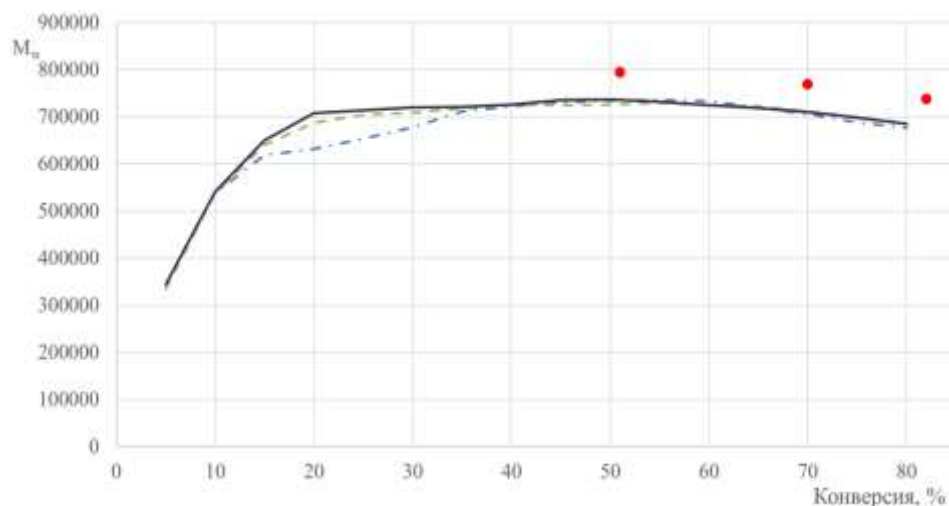


Рис. 8. Сравнение зависимостей среднечисленной молекулярной массы от степени конверсии для различных вычислительных экспериментов (штрихпунктир – эксперимент 59, пунктир – эксперимент 60, сплошная линия – эксперимент 61, точки – производственный эксперимент).

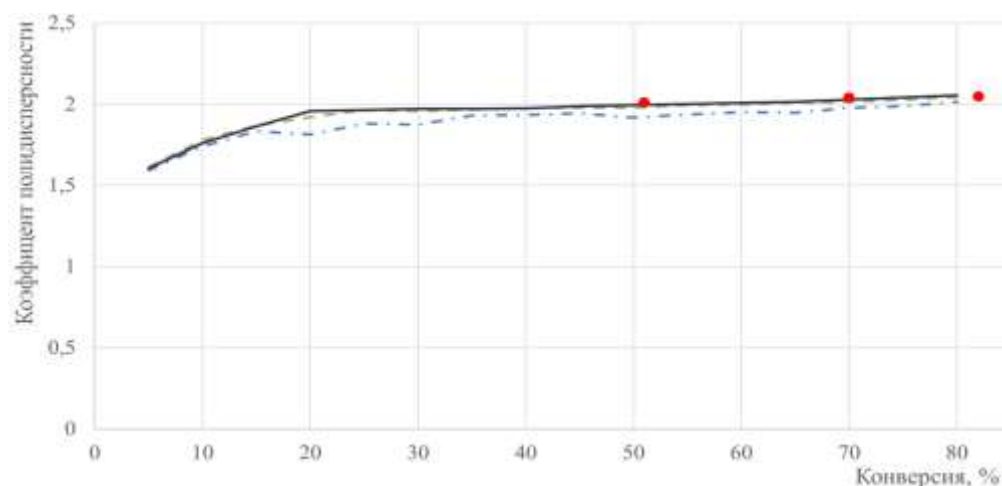


Рис. 9. Сравнение зависимостей коэффициента полидисперсности от степени конверсии для различных вычислительных экспериментов (штрихпунктир – эксперимент 59, пунктир – эксперимент 60, сплошная линия – эксперимент 61, точки – производственный эксперимент).

Сравнение полученных зависимостей показывает, что для всех проведенных вычислительных экспериментов характер изменения среднечисленной и среднечисленной молекулярных масс от степени конверсии имеет схожую форму. Наблюдаемые различия между кривыми проявляются преимущественно в абсолютных значениях молекулярных масс и не превышают порядка 10% в рассматриваемом диапазоне конверсии.

Для дополнительной верификации результатов моделирования на графиках также представлены экспериментальные данные для рассматриваемого процесса, полученные ранее в рамках производства изопрена согласно условиям эксперимента. Сопоставление вычислительных и производственных данных показывает их удовлетворительное согласование: значения среднечисленной и среднечисленной молекулярных масс, полученные в ходе моделирования, находятся в том же диапазоне, что и экспериментальные результаты при близких значениях степени конверсии.

Наблюдаемые отклонения могут быть обусловлены стохастическим характером метода Монте-Карло, а также различным числом моделируемых молекул в вычислительных экспериментах. При увеличении числа учитываемых молекул статистические флуктуации уменьшаются, а полученные значения молекулярных масс стремятся к устойчивому значению, соответствующему заданным условиям протекания процесса.

Использование базы данных позволяет формировать подобные выборки и проводить сравнительный анализ результатов различных экспериментов с помощью SQL-запросов, что значительно упрощает обработку и интерпретацию данных. Сопоставление результатов для различных вычислительных экспериментов демонстрирует их воспроизводимость и устойчивость к изменению параметров моделирования.

Заключение

В результате проведенного исследования разработана и внедрена модель хранения и анализа данных, ориентированная на поддержку вычислительных экспериментов в области полимеризации. Созданная реляционная база данных обеспечивает централизованное, структурированное и целостное хранение информации о параметрах процесса, кинетических схемах и результатах моделирования, что значительно упрощает их обработку и анализ.

Интеграция базы данных с программным комплексом моделирования позволила автоматизировать процесс регистрации результатов, снизить вероятность ошибок и повысить воспроизводимость вычислительных экспериментов.

Ключевым результатом работы является организация структурированного хранения данных и результатов проводимых вычислительных и производственных экспериментов протекания периодического процесса полимеризации в реляционной базе данных. Такой подход позволяет проводить сравнение и анализ результатов вычислительных экспериментов с использованием SQL-запросов, обеспечивая переход от разрозненных результатов моделирования к единой системе хранения и анализа данных.

Разработанная модель хранения данных может быть расширена за счет включения дополнительных параметров процесса и использована для анализа других типов полимеризационных систем. В дальнейшем база данных может служить основой для задач оптимизации технологических режимов, сопоставления результатов моделирования с экспериментальными данными и поддержки принятия решений при разработке новых материалов, а также в создании интеллектуальных систем управления и цифровых двойников химико-технологических установок.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FRRR-2026-0007).

The study was carried out within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (research topic code FRRR-2026-0007).

ЛИТЕРАТУРА

1. Мешалкин В. П. Актуальные теоретические и прикладные исследования по инжинирингу энергоресурсосберегающих высоконадежных химико-технологических систем // Теоретические основы химической технологии. 2021. Т. 55. №4. С. 399–427. [Meshalkin V. P. Current theoretical and applied research in engineering of energy-saving, highly reliable chemical-technological systems // Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii. 2021. Vol. 55. No. 4. P. 399–427].
2. Rawlings J. B., Ekerdt J. G. Chemical reactor analysis and design fundamentals. Madison: Nob Hill Publishing, 2012. 744 p.
3. Mikhailova T., Miftakhov E., Mustafin I., Mustafina S., Mikhailov V. Processing of experimental results using databases on the example of the batch process of isoprene polymerization. In: Proceedings of IEEE. IEEE, 2023. P. 115–121. ISBN 979-8-3503-0912-6.
4. Stephanopoulos G. Chemical process control: an introduction to theory and practice. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1984. 696 p.
5. Забайкина И. В. Влияние интеграции систем промышленной автоматизации на производительность предприятий, структуру издержек и долгосрочные темпы экономического роста национальной экономики // Академический исследовательский журнал. 2025. Т. 3. №12. С. 92–101. [Zabaykina I. V. The impact of the integration of industrial automation systems on enterprise productivity, cost structure, and long-term economic growth rates of the national economy // Akademicheskii Issledovatel'skii Zhurnal. 2025. Vol. 3. No. 12. P. 92–101]. DOI: <https://doi.org/10.25726/q9300-3358-5778-e>.
6. Кудряшов В. С., Алексеев М. В., Иванов А. В. и др. Синтез адаптивной цифровой системы управления с заданным запасом устойчивости // Вестник Воронежского гос. технич. ун-та. 2019. Т. 15. №3. С. 42–50. [Kudryashov V. S., Alekseev M. V., Ivanov A. V., et al. Synthesis of adaptive digital control system with a specified stability resource // Vestnik Voronezhskogo Gosudarstvennogo Tekhnicheskogo Universiteta. 2019. Vol. 15. No. 3. P. 42–50].
7. Тугов В. В., Пишухин А. М. Самонастраивающиеся системы автоматического управления с эталонной моделью для управления процессом полимеризации в многослойных композитах // Современные наукоемкие технологии. 2022. №3. С. 43–48. [Tugov V. V., Pishchukhin A. M. Self-adjusting automatic control systems with a reference model for controlling the polymerization process in multilayer composites // Sovremennyye Naukoyemkiye Tekhnologii. 2022. No. 3. P. 43–48].
8. Kiss A. A., Bildea C. S. A review of process intensification in chemical engineering // Chemical Engineering and Processing. 2012. Vol. 59. P. 1–15.
9. Михайлова Т. А., Мифтахов Э. Н., Мустафина С. А. Исследование процессов промышленного синтеза полимеров методами математического моделирования с применением технологий облачных вычислений: монография. Уфа: РИЦ УУНИТ, 2023. 164 с. [Mikhailova T. A., Miftakhov E. N., Mustafina S. A. Study of industrial polymer synthesis processes using mathematical modeling methods and cloud computing technologies: monograph. Ufa: Ufa University of Science and Technology, 2023. 164 p.].
10. Mikhailova T., Mustafina S., Miftakhov E., Podvalny S. Organization of storage and processing of results from industrial and computational experiments of polymerization processes based on databases. In: Proceedings of the 2023 IEEE International Conference on Industrial Engineering, Applications and Manufacturing (ICIEAM). Sochi, 2023. P. 245–250. ISBN 979-8-3503-0912-6.
11. Mustafina S., Mikhailova T., Daminov A., Miftakhov E., Mikhailov V. Computer simulation of batch isoprene polymerization process in the presence of a neodymium-based catalyst system by the Monte Carlo method. In: Parallel Computing Technologies (PaVT'2021): Proceedings of XV International Conference. Chelyabinsk, 2021. P. 81–93.
12. Mustafina S., Mikhailova T., Miftakhov E., Podvalnyi E. Application of the Monte Carlo method in modeling the isoprene polymerization process in the presence of the polycentric titanium-containing catalytic system // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Art. no. 012127.

Поступила в редакцию 31.03.2026 г.

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2026.2.9

**DEVELOPMENT AND VALIDATION OF THE MODEL
FOR STORAGE AND ANALYSIS OF EXPERIMENTAL DATA
IN THE RESEARCH OF BATCH POLYMERIZATION PROCESSES**

© T. A. Mikhailova, I. I. Mustafin*, S. A. Mustafina

*Ufa University of Science and Technology,
32 Zaki Validi st., 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*

**Email: ilnur.mustafinn@gmail.com*

This paper presents the development and implementation of a model for storing and analyzing data and experimental results for studying batch polymerization processes. An approach to organizing a relational database is proposed, providing structured storage of simulation parameters, kinetic schemes, formulas, and calculation results, including polymer molecular weight characteristics. The architecture of a software package is implemented, combining a Monte Carlo simulation module and a SQL Server database management system, enabling the automation of data accumulation and processing. The system's capabilities for analyzing and comparing the results of computational experiments are demonstrated using the example of isoprene polymerization in a batch reactor. Using a database improves the reproducibility of results, accelerates data processing, and creates the basis for subsequent optimization of process modes and the implementation of digital twin elements of chemical engineering processes.

Keywords: polymerization, chemical engineering process modeling, database, big data processing, process optimization, digital twin.

Received 31.03.2026.

Об авторах / About the authors

МИХАЙЛОВА Татьяна Анатольевна

Кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры математического
и компьютерного моделирования
Института информатики, математики и робототехники.
Уфимский университет науки и технологий.
Email: t.a.mihailova@yandex.ru
Web of Science Researcher ID: Q-7593-2017.

MIKHAILOVA Tatiana Anatolevna

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Docent, Associate Professor of the Department
of Mathematical and Computer Modeling
of the Institute of Informatics, Mathematics and Robotics.
Ufa University of Science and Technology.
Email: t.a.mihailova@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-9096-4385.
Web of Science Researcher ID: Q-7593-2017.
Scopus Author ID: 56177484100.

МУСТАФИН Ильнур Ильгамович

Аспирант кафедры математического
и компьютерного моделирования,
Института информатики, математики и робототехники.
Уфимский университет науки и технологий.
Email: ilnur.mustafinn@gmail.com

MUSTAFIN Ilnur Ilgamovich

Postgraduate student of the Department
of Mathematical and Computer Modeling
of the Institute of Informatics, Mathematics and Robotics.
Ufa University of Science and Technology.
Email: ilnur.mustafinn@gmail.com

МУСТАФИНА Светлана Анатольевна

Доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой математического и ком-
пьютерного моделирования
Института информатики, математики и робототехники.
Уфимский университет науки и технологий.
Email: mustafina_sa@mail.ru

MUSTAFINA Svetlana Anatolyevna

Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Professor, Head of the Department of Mathematical
and Computer Modeling of the Institute of Informatics, Mathe-
matics and Robotics.
Ufa University of Science and Technology.
Email: mustafina_sa@mail.ru
ORCID: 0000-0002-6363-1665.
Scopus Author ID 6603592002.