

Программный комплекс для решения обратных задач химической кинетики и его реализация в виде виртуального испытательного стенда

07, июль 2013

DOI: 10.7463/0713.0601521

Коледина К. Ф., Губайдуллин И. М.

УДК 004.942

Россия, Уфа, Башкирский Государственный Университет

Россия, Уфа, Институт нефтехимии и катализа РАН

sabitovakamila@rambler.ru

irekmars@mail.ru

Введение

В Институте нефтехимии и катализа (ИНК) РАН создана известная научная школа по металлокомплексному катализу и металлоорганическому синтезу. В лаборатории математической химии ИНК РАН такие сложные реакции изучаются с помощью информационно-аналитической системы, включающей в себя методы построения математической модели химических реакций [1, 2], а также методы решения прямой и обратной кинетических задач. Важной и актуальной задачей является также моделирование индукционного периода различных реакций [3]. Развитие информационных технологий открыло доступ к огромным, постоянно возрастающим объемам информации о каталитических реакциях, технологии процессов и реакторах. Появление многопроцессорных ЭВМ сделало возможным моделировать задачи, не подлежащие прямому экспериментальному решению, такие, как, например, задачи исследования быстрых и лимитирующих процессов.

Проблемы численного решения задач химической кинетики для реакций с большим числом стадий много лет привлекают внимание исследователей. Необходимость решения таких задач обусловлена современными потребностями промышленности. Остро стоит ряд вопросов по улучшению процесса переработки нефти и газа, усовершенствованию химических реакторов. Для каждой из этих задач необходимо проводить математическое моделирование и, прежде чем изменять производственные процессы, необходимо улучшать химические схемы на разных стадиях производства. Очевидно, аналитически решать такие задачи практически невозможно

ввиду огромного размера систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений, соответствующих схемам химических реакций.

Развитие многоядерных процессоров и кластеризация вычислителей привели к широкому распространению облачных и параллельных вычислений. Степень использования современных технологий является важным критерием конкурентоспособности современного прикладного программного обеспечения. Таким образом, прикладное программное обеспечение является актуальным, если соответствует требованиям задачи и максимально использует имеющиеся вычислительные ресурсы. В этом отношении задача поиска кинетических констант химической реакции – сложная многопараметрическая вычислительная задача, решение которой находится в прямой зависимости от производительности вычислительной среды и от используемых алгоритмов.

Создание информационной системы [4], включающей параметры натурального и вычислительного экспериментов, математическое моделирование реакций, процессов и информационно-вычислительный комплекс с постоянно растущей базой данных кинетических исследований, позволит сократить сроки разработки кинетических моделей сложных реакций металлокомплексного катализа, что, в свою очередь, приведет к ускорению исследования и освоения новых процессов.

Задачами данной работы являются:

- 1) описание математических моделей задач химической кинетики;
- 2) анализ существующих программных комплексов для определения кинетических параметров;
- 3) проектирование и реализация баз данных кинетических исследований (БДКИ);
- 4) организация распараллеливания вычислительного процесса;
- 5) реализация прямой задачи химической кинетики в виде распределенного виртуального испытательного стенда.

1. Постановка обратной задачи химической кинетики

Математическое описание задач химической кинетики имеет вид системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) материального баланса:

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \frac{F_i - x_i F_N}{N}, \quad i = 1, \dots, I, \quad F_i = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j, \quad W_j = w_j \frac{\xi}{N_0}, \quad \frac{dN}{d\tau} = F_N = \sum_{j=1}^J \delta_j W_j, \quad (1)$$

$$\delta_j = \sum_{i=1}^I \nu_{ij}, \quad w_j = k_j^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^-}{RT}\right) \cdot \prod_{i=1}^M (x_i \cdot N)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j}^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^+}{RT}\right) \cdot \prod_{i=1}^M (x_i \cdot N)^{\beta_{ij}}$$

с начальными условиями: при $\tau = 0$, $x_i(0) = x_i^0$, $N = 1$. Здесь τ – время реакции, с; x_i – концентрации (мольные доли) веществ, участвующих в реакции; N и N_0 – мольная скорость подачи газовой смеси и ее значение на входе, моль/с; $\xi = \frac{V}{V_p}$ – безразмерный объем реактора, V, V_p – объем реакционной смеси и реактора, м³, I – количество веществ; J – число стадий; ν_{ij} – матрица стехиометрических коэффициентов; w_j – скорость j -ой стадии, 1/с; E_j^- , E_j^+ – энергии активации прямой и обратной реакций, ккал/моль; R – газовая постоянная, равная 0,002 ккал/(моль*К); T – температура, К; α_{ij} – отрицательные элементы матрицы (ν_{ij}), β_{ij} – положительные элементы (ν_{ij}); k_j^0, k_j^0 – предэкспоненциальные множители, 1/с.

К кинетическим параметрам относятся значения кинетических констант скоростей стадий (k_j) и энергии активации стадий (E_j). Для нахождения кинетических параметров необходимо поставить и решить прямую и обратную кинетические задачи.

Прямая задача - это расчет состава многокомпонентной реагирующей смеси (концентраций) и скорости реакции на основании математического описания с известными кинетическими параметрами. При этом решается СОНДУ (1) с заданными начальными условиями с фиксированными k_j и неизвестными x_i , то есть задача Коши. Решение таких систем проводят методами Эйлера, Эйлера-Коши, Рунге-Кутты, Кутты-Мерсона и др. в зависимости от требуемой точности.

Обратная задача заключается в определении кинетических параметров, соответствующих минимальному значению разности расчетных (решение прямой задачи) и натуральных химических (лабораторных) данных.

2. Комплекс программ для определения кинетических параметров.

Задача поиска кинетических констант химической реакции – сложная вычислительная задача, решение которой находится в прямой зависимости от производительности вычислительной среды и от используемых алгоритмов.

Проведен анализ существующих программ по расчету кинетических констант химических реакций. В качестве ближайших аналогов были рассмотрены следующие системы (в скобках указана компания-разработчик): 1) Chemical Kinetics Simulator (IBM); 2) MATLAB (MathWorks); 3) Dynafit (BioKin); 4) Chemkin (ReactionDesign); 5) ChemOffice (PerkinElmer); 6) Khimera (KintechLab).

Первый из рассматриваемых программных продуктов, Chemical Kinetics Simulator (CKS), создан компанией IBM еще в 1996 г. Программный комплекс (ПК) CKS является, с одной

стороны, довольно ограниченным средством моделирования химических реакций, а с другой – программой с продуманным интерфейсом, включающим систему интуитивно понятного ввода стадий химических реакций. На рис. 1. представлены экранные формы, иллюстрирующие возможности ПК CKS.

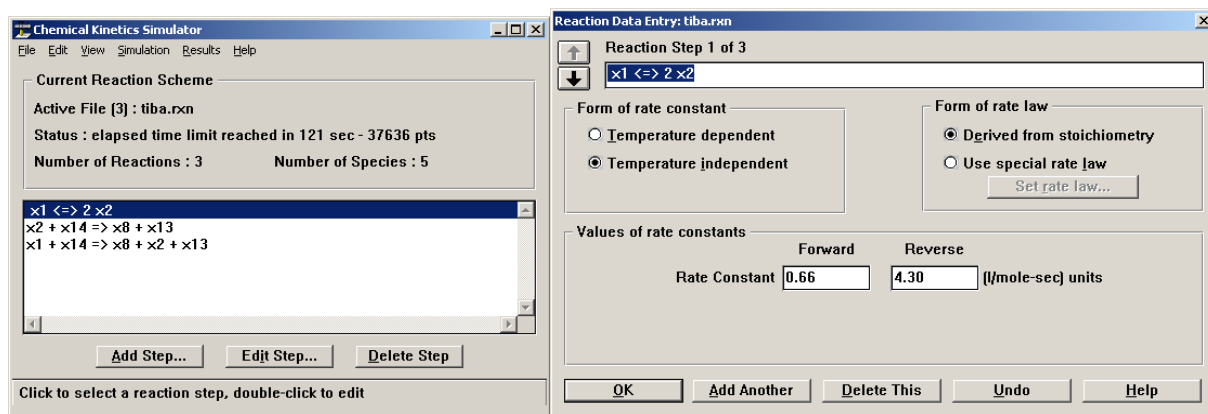


Рисунок 1 – Главное окно и окно ввода стадии ПК CKS

Основное назначение ПК CKS – математическое моделирование протекания химической реакции, решение прямой задачи химической кинетики. Константы скоростей стадий реакций могут быть зависимыми или независимыми от температуры, а сами стадии – прямыми и обратными, но в любом случае кинетические константы задаются вручную. Программа поддерживает: 1) загрузку и сохранение введенных схем химических реакций в формате файла (*.rxn); 2) систему очередей для последовательного расчета схем в определенном порядке; 3) построение различных графиков зависимостей, определяемых типом моделирования. Однако, несмотря на удобный ввод и визуализацию решения прямой задачи, используя ПК CKS, нельзя решить обратную задачу химической кинетики. Кроме того, не предусмотрено распараллеливание прямой задачи, что сказывается на времени построения кинетической модели. Отсутствие возможности решения обратной кинетической задачи ограничивает применение ПК CKS в комплексе с другими программными продуктами (в том числе и в рамках единой информационно-аналитической системы решения многопараметрических обратных задач химической кинетики, описываемой в настоящей работе).

Следующим рассматриваемым программным продуктом является ПК MATLAB компании MathWorks. MATLAB является не столько программой, сколько системой модулей, представляющей собой мощное и универсальное средство решения различных прикладных задач. Каждый отдельный модуль этого ПК обеспечивает решение задач из определенной области и может рассматриваться как независимая программа. Существуют и аналоги этой системы:

MathCAD, MAPLE, SciLab, FreeMath. Преимуществами MATLAB по сравнению с этими пакетами являются обширная справочная система, большое количество справочной литературы, в том числе русскоязычной, относительно удобная среда программирования, наличие версий под операционные системы Linux и Windows и средств эффективного распараллеливания вычислений.

Готовых модулей по расчету обратной задачи химической кинетики в MATLAB пока не существует. При этом существует возможность использования готовых библиотек, среди которых имеются алгоритмы решения систем дифференциальных уравнений, поиска минимума критерия соответствия расчетных и натуральных данных и др. Основным недостатком системы MATLAB является ее высокая стоимость. Академическую лицензию на базовый комплект можно приобрести за \$1000, коммерческую версию – за \$6000; за каждый дополнительный модуль необходимо доплачивать. Среди бесплатных аналогов данной системы наиболее полной по функциональности является система SciLab.

Обратимся к следующей программе по расчету кинетических констант – Dynafit, разработанной фирмой BioKin. Интерфейс программы разделен на две части: Input и Output. Во вкладке Input производится ввод схемы реакции, обозначение кинетических констант и построение временной оси с экспериментальными данными. Основная цель Dynafit – это поиск начальных значений кинетических констант методом наименьших квадратов. В качестве формата ввода данных используется символическая нотация, тогда как параметры и схема превращений задаются не в графическом, а в текстовом виде, согласно определенным правилам. Подобная схема ввода может быть неудобна неподготовленному пользователю, но в дальнейшем может быть использована как средство быстрого редактирования новых схем.

Результатом работы программы могут быть выходные характеристики используемого алгоритма и изменения концентраций во времени (рис. 2.). Программа имеет хорошую справочную систему. Лицензирование программы для образовательных учреждений бесплатно, также имеется бесплатная 30-дневная пробная лицензия. Стоимость коммерческой лицензии Dynafit начинается от \$ 2300. На сайте разработчика нет информации о методах решения жестких систем дифференциальных уравнений, а также об использовании технологии распараллеливания.

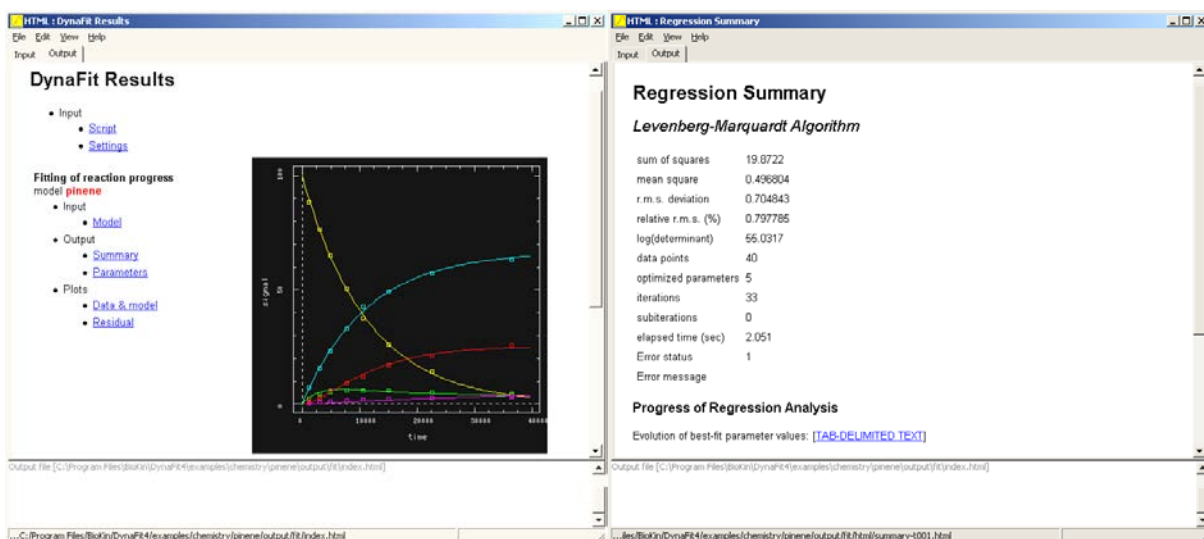


Рисунок 2 – Результаты работы программы Dynafit

На рынке программного обеспечения в рассматриваемой области существуют также многоцелевые программные продукты, охватывающие широкий спектр химических задач. Среди них можно выделить следующие продукты: Chemkin (ReactionDesign), ChemOffice (PerkinElmer), Khimera (KintechLab). Программный комплекс Chemkin предоставляет средства по решению ряда задач: прогнозирование и оптимизация процессов, протекающих в реакторах; расчет и моделирование поршневых двигателей; расчет пламени; анализ неопределенностей; анализ хода реакции; задачи осаждения паров и др. Программный комплекс ChemOffice позволяет проводить визуализацию и построение моделей реакций. Программа Khimera ориентирована на кинетическое моделирование и может быть применена в расчетах термодинамических свойств реакции, состояний равновесия, поверхностной диффузии и др.

В контексте единой информационно-аналитической системы при анализе рассмотренных программных продуктов особое внимание уделялось способам хранения данных. ПК CKS, Dynafit, Chemkin ограничиваются хранением информации в файлах специального вида, как правило, предназначенных для хранения параметров моделей или результатов расчета. MATLAB оставляет за программистом право выбора реализации хранения данных, предоставляя различные сервисные функции. Специализированные базы данных используются в продуктах ChemOffice и Khimera. В Khimera в качестве базы данных предлагается собственное интегрированное кросс-платформенное решение под названием KintechDB, в которой содержатся данные о термодинамических свойствах веществ, о механизмах протекания реакции, а также прав доступа к имеющейся информации. Также имеется возможность сетевого использования KintechDB. В KintechDB содержится информация о более чем 4000 веществ, 6100 реакций и 55 механизмов. Комплекс программных решений по построению и визуализации химических реакций ChemOffice

имеет центральную сетевую базу данных, доступ к которой возможен из любого продукта комплекса. В базе данных содержится более 500 000 реакций. Подобное решение является самым гибким в плане организации информационных потоков. База данных выступает сервисом, предоставляя информацию по запросам программных продуктов и пользователей. Имеется также возможность онлайн-поиска реакции.

Таким образом, на сегодняшний день имеются программные продукты, специализирующиеся не только на решении широкого круга задач химической промышленности (ChemOffice, Chemkin, Khimera, MATLAB), но и специализированные программы по расчету кинетических констант (Dynafit, CKS). Эти программы, как правило, удобны для решения определенного круга задач. Основной недостаток программ заключается в том, что они не используют имеющиеся информационные технологии в полной мере, что, в свою очередь, сказывается на скорости вычислений, надежности и удобстве визуализации.

3. Организация вычислительного процесса

При изучении сложных химических реакций предлагается использовать информационно-аналитическую систему (ИАС) обратных задач химической кинетики [5], которая включает в себя входные информационные потоки, методы обработки информации, выходные информационные потоки, технические средства обработки информации. Входные информационные потоки тесно связаны с выходными информационными потоками. Например, для оперативного сравнения экспериментальных и расчетных концентраций наблюдаемых веществ во времени, необходимо их расположить в соответствующие структурные записи реляционной БДКИ. Адекватный расчет энергий активации достигается многократными решениями прямых задач с разными температурными значениями. Таким образом, при организации БДКИ необходимо учитывать возможность многократного использования данных. ИАС объединяет базу данных с методами обработки информации, которые состоят из математического описания конкретного процесса, алгоритмов и пакетов программ. Вид и структура пакета программ также зависит от технических средств. Программные модули предусматривают возможность их использования, как на отдельном компьютере, так и в связке персональный компьютер – суперкомпьютер.

Для организации базы данных необходимо составить инфологическую модель предметной области (рис. 3).

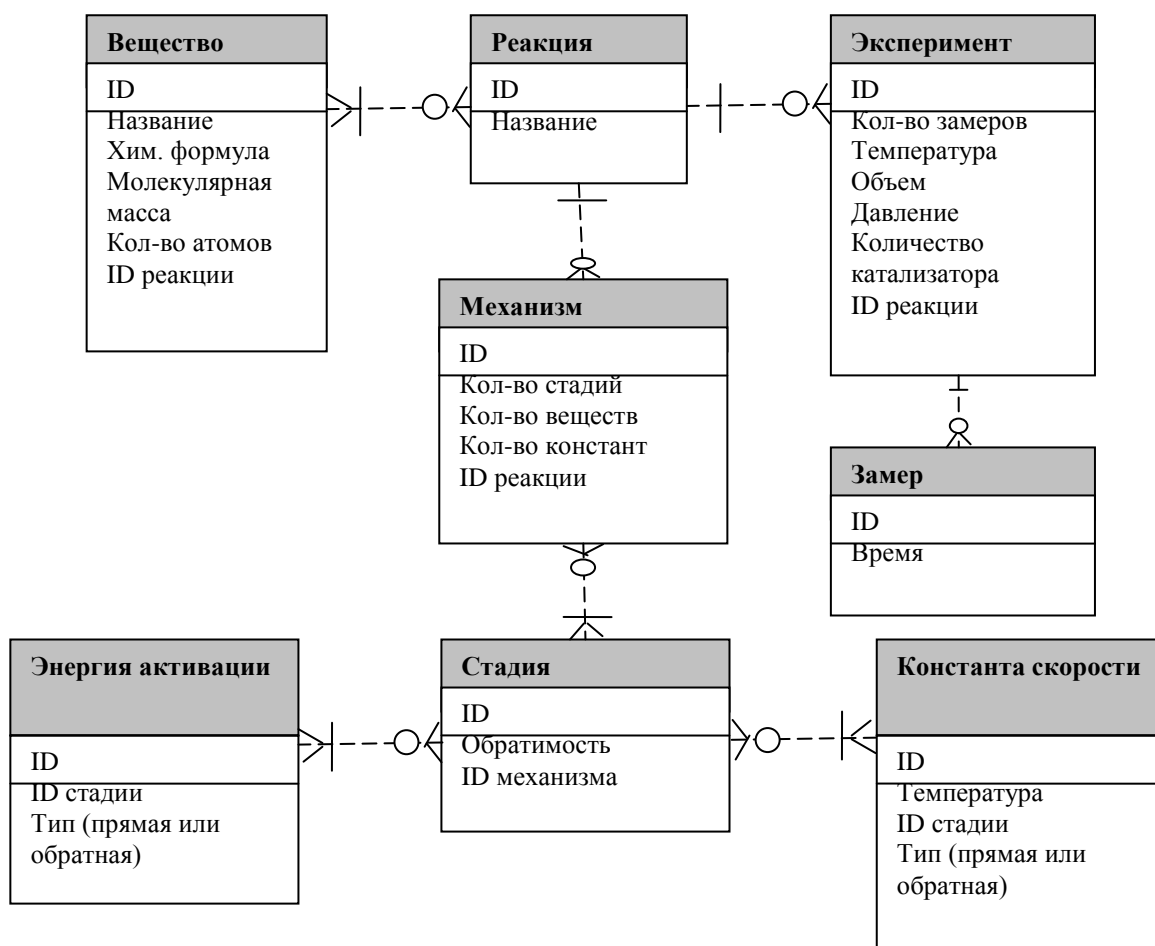


Рисунок 3 – Инфологическая модель сложной химической реакции

Для сложных химических реакций характерно следующее:

- Существование нескольких гипотетических механизмов протекания реакции, каждый из которых необходимо обработать и выбрать наилучший.
- Существование нескольких экспериментов, проведенных при разных условиях (обычно более пяти). Учитывая погрешность эксперимента, обрабатываются все эксперименты и выбираются два (или три) лучших, то есть те, по которым расчетные значения наиболее близки к экспериментальным данным.
- Неоднозначное определение кинетических параметров, значения которых зависят от правильного выбора начального приближения, исходя из физико-химических предположений.

Поэтому для последовательного решения всех указанных задач иногда необходимы существенные затраты времени (от нескольких месяцев до года), что приводит к идее последовательно-параллельного ведения расчета. Предлагается сгруппировать задачи, по которым можно вести параллельный расчет, в несколько блоков (рис. 4): параллельно исследовать несколько механизмов каждой реакции, для каждого механизма параллельно исследовать

несколько экспериментов, а для каждого эксперимента распараллелить решение обратной задачи, разделив параметрическую область на подобласти по числу процессоров многопроцессорной вычислительной системы.

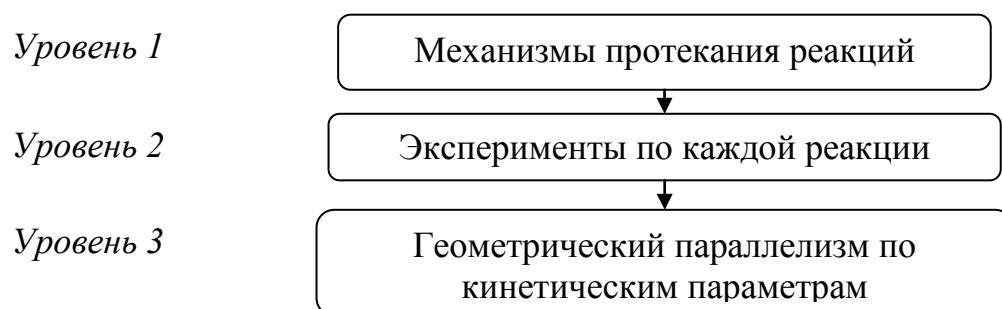


Рисунок 4 – Модель распараллеливания вычислительного процесса

Для эффективного решения обратной задачи на Уровне 3, необходимо ускорение решения прямой задачи.

Прямая задача расчета концентраций реагентов в зависимости от времени и проверка закона сохранения массы по стадиям реализована в виде распределенного виртуального испытательного стенда в Distributed Virtual TestBed (DiVTB).

4. Реализация задачи моделирования химических процессов в виде распределенного виртуального испытательного стенда.

Специалистами Южно-Уральского государственного университета (ЮУрГУ) создан распределенный виртуальный испытательный стенд для суперкомпьютера «СКИФ-Аврора ЮУрГУ».

DiVTB – программный комплекс, обеспечивающий разработку и функционирование Распределенных виртуальных испытательных стендов (PaBИС). PaBИС обеспечивает проблемно-ориентированный подход к решению конкретных классов задач инженерного проектирования посредством ресурсов, предоставляемых вычислительными грид-средами [7]. Система DiVTB реализует следующие функциональные возможности [8]:

- разработка PaBИС;
- поиск вычислительных ресурсов в грид-средах;
- запуск PaBИС;
- мониторинг исполнения PaBИС;
- передача результатов исполнения пользователю;
- визуализация результатов исполнения.

Система DiVTB реализована на основе программной платформы UNICORE, обеспечивающей предоставление сервисов для организации распределенных вычислительных грид-сетей. Архитектура UNICORE состоит из трех слоев – клиентского, сервисного и системного. DiVTBServer, осуществляющий запуск задач, является клиентом среды UNICORE и находится на клиентском уровне наряду со стандартными клиентами среды – UCC (UNICORE Command-line Client) и URC (UNICORE Rich Client). DiVTBServer использует программный код UCC для взаимодействия с UNICORE [9].

Прямая задача расчета кинетических параметров реализована в системе DiVTB - «Распределенный виртуальный испытательный стенд в моделировании химических процессов». Для этого сначала внешнее приложение было внедрено в виде инженерного ресурса в систему, файлы с исходным кодом помещены в грид-среду. Также в грид систему помещается файл с исходными данными по химической реакции в виде реляционной базы данных. Создается файл ChemProc.sh для сборки всех необходимых .for файлов и создания исполняемого файла приложения ChemProc.exe.

Для удаленного запуска внешнего приложения в качестве сервиса грид-среды создается проблемная оболочка для компонента DiVTB. Новое приложение добавляется в систему DiVTB как ресурс системы UNICORE. Создание проблемной оболочки для DiVTBPortal заключается в составлении XML-документа, содержащего идентификационные параметры оболочек, а также описание групп параметров и их значений.

Порядок выполнения виртуального испытательного стенда имеет следующий вид [10].

- Виртуальный испытательный стенд разбирается на отдельные узлы, которые являются, по сути, отдельными инженерными пакетами.
- Сервер извлекает параметры из проблемного слоя эксперимента.
- Для каждого узла выполняются следующие действия:
 - сервер выполняет шаблоны узла с параметрами, переданными в проблемном слое, либо полученными в результате исполнения предыдущих узлов;
 - все необходимые для исполнения инженерного пакета файлы передаются в грид-среду;
 - выполняется запуск инженерного пакета с заданными параметрами;
 - полученные в результате работы пакета файлы загружаются обратно на DiVTBServer.

Полученные результаты сохраняются в результирующей директории, доступной для загрузки.

Таким образом, реализована возможность удаленного запуска прямой кинетической задачи в виде виртуального испытательного стенда на суперкомпьютере «СКИФ-Аврора ЮУрГУ» (работа приложения на рис. 5).

```
at de.fzj.unicore.ucc.helpers.Runner.doSubmit(Runner.java:260)
at de.fzj.unicore.ucc.helpers.Runner$2.process(Runner.java:805)
at de.fzj.unicore.ucc.helpers.Runner.runSync(Runner.java:245)
at de.fzj.unicore.ucc.helpers.Runner.run(Runner.java:196)
at de.fzj.unicore.ucc.actions.Run.run(Run.java:240)
at de.fzj.unicore.ucc.actions.Run.process(Run.java:175)
at de.fzj.unicore.ucc.UCC.main(UCC.java:202)
Caused by: de.fzj.unicore.ucc.helpers.RunnerException: No matching target syste$
at de.fzj.unicore.ucc.helpers.Runner.findTSS(Runner.java:408)
... 7 more
2012-12-13 22:53:51,050 [main] INFO UCC - You can access 1 target system(s).
2012-12-13 22:56:49,396 [main] INFO UCC - SUCCESSFUL exit code: 126
2012-12-13 22:58:12,262 [main] INFO UCC - /home/user/pow_unicore_test/./203a1$
Save modified buffer (ANSWERING "No" WILL DESTROY CHANGES) ?

user@diutb-machine:~/pow_unicore_test> rm ucc.log
user@diutb-machine:~/pow_unicore_test> ls
1f80fce7-3160-460f-a614-d7a20a01da7.properties  ChemProc.u
240fd060-2b27-47e2-a6cd-d7cad41bfa3f.properties  GA_OB_DH.DAT
70450256-7c7d-4a36-bedb-dec381b46b87.properties  _run.Sh
7301cd13-7c0d-4453-a07c-fec8417391b9.properties  stderr
87907ecf-f16d-45a3-a9bf-001e169dbc7d.properties  stdout
user@diutb-machine:~/pow_unicore_test> ./_run.sh
GA_OB_DH.DAT 100% 182.9K 12.3KB/s
SUCCESSFUL exit code: 0
stdout 100% 2.4K 2.4KB/s
GA_OB_DH.DAT 100% 182.9K 77.8KB/s
/home/user/pow_unicore_test/./48ad7fff-65da-43a3-9f67-b7ee93cd989b.properties
user@diutb-machine:~/pow_unicore_test>
```

Рисунок 5 – Работа приложения

Заключение

В рамках проведенной работы были получены следующие результаты:

- проведен анализ существующих программных комплексов для определения кинетических параметров.
- спроектирована, разработана и реализована база данных кинетических исследований и сформулирована методология распараллеливания вычислительного процесса;
- реализована прямая задача химической кинетики в виде распределенного виртуального испытательного стенда.

Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-07-31029, № 12-07-00324) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009 - 2013 годы (Госконтракт N 14.B37.21.2088).

Список литературы

1. Слинько М.Г. Катализ и математика: Посвящается памяти Т.И. Зеленька // Каталитический бюллетень / Рос. акад. наук. Отделение химии и наук о материалах. Научный совет по катализу. Новосибирск. 2003. № 4. С. 37-60.

2. Губайдуллин И.М., Спивак С.И. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики // Системы управления и информационные технологии. 2008. № 1.1/31. С. 150-153.
3. Губайдуллин И.М., Линд Ю.Б., Коледина К.Ф. Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2012): труды международной научной конференции (Новосибирск, 26 - 30 марта 2012 г.). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2012. С. 123-133.
4. Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф., Спивак С.И. Последовательно параллельное определение кинетических параметров // Журнал Средневолжского математического общества. 2009. Т. 11, № 2. С. 14-24.
5. Губайдуллин И.М., Линд Ю.Б., Коледина К.Ф. Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т 13, № 1. С. 236-244.
6. Awrejcewicz J., Lind Y.B., Gubaidullin I.V., Koledina K.F. Modern information technologies in construction of kinetic models for reactions of metal complex catalysis // Theoretical and Applied Mechanics Letters. 2012. No. 2 (4). Art no. 043003 (4 p.).
7. Радченко Г.И., Соколинский Л.Б. Технология построения виртуальных испытательных стендов в распределенных вычислительных средах // Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. Санкт-Петербург, 2008. № 54. С. 134-139.
8. Радченко Г.И. Грид-система *CAEBeans*: интеграция ресурсов инженерных пакетов в распределенные вычислительные среды // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2009): Труды международной научной конференции (Нижний Новгород, 30 марта - 3 апреля 2009 г.). Челябинск: Издательство ЮУрГУ, 2009. С. 281-292.
9. Радченко Г.И. Сервисно-ориентированный подход к использованию систем инженерного анализа в распределенных вычислительных средах // Суперкомпьютеры и высокопроизводительные вычисления. 2011. № 5 (65) . С. 81-87.
10. Радченко Г.И., Соколинский Л.Б., Шамакина А.В. Разработка компонентно-ориентированных *CAEBean*-оболочек для пакета *ANSYS CFX* // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2008): Труды международной научной конференции (Санкт-Петербург, 28 января -1 февраля 2008 г.). Челябинск: Издательство ЮУрГУ, 2008. С. 438-443.

Development of a program complex for solving inverse problems of chemical kinetics and its implementation in a virtual test bed

07, July 2013

DOI: [10.7463/0713.0601521](https://doi.org/10.7463/0713.0601521)

Koledina K.F., Gubaidullin I.M.

Russia, Ufa, Bashkir State University
Russia, Ufa, Institute of Petrochemistry and Catalysis, Russian Academy of Sciences
sabitovakamila@rambler.ru
irekmars@mail.ru

In this paper the authors formulated an inverse problem of chemical kinetics and analyzed existing software systems allowing one to determine kinetic parameters. A database of kinetic studies was designed, developed and implemented; a methodology of a parallel computing process was also formulated in this work. A software complex that allows one to simulate chemical processes in distributed virtual test beds was developed and integrated into the DiVTB system. This work is supported by RFBR (grant № 12-07-31029, № 12-07-00324) and the Federal Target Program "Scientific and scientific-pedagogical personnel of innovative Russia " for 2009 – 2013 (Government Contract N 14.B37.21.2088).

Publications with keywords: [computer simulation](#), [distributed virtual TestBed](#), [informational-analytic system](#), [metal-complex catalysis](#), [inverse problems of chemical kinetics](#)

Publications with words: [computer simulation](#), [distributed virtual TestBed](#), [informational-analytic system](#), [metal-complex catalysis](#), [inverse problems of chemical kinetics](#)

References

1. Slin'ko M.G. Kataliz i matematika: Posvyashchaetsya pamyati T.I. Zelenyaka [Catalysis and Mathematics: Dedicated to the memory T.I.Zelenyaka]. *Kataliticheskiy byulleten'*, 2003, no. 4, pp. 37-60.
2. Gubaydullin I.M., Spivak S.I. Informatsionno-analiticheskaya sistema obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki [Information-analytical system of inverse problems of chemical kinetics]. *Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii* [Control Systems and Information Technology], 2008, no. 1.1/31, pp. 150-153.
3. Gubaydullin I.M., Lind Yu.B., Koledina K.F. Metodologiya rasparallelivaniya pri reshenii mnogoparametricheskikh obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki [Parallelization methodology for solving multiparameter inverse problems of chemical kinetics]. *Parallel'nye vychislitel'nye tekhnologii (PaVT'2012): trudy mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii* [Parallel Computing Technologies

- (PaVT'2012): Proceedings of the International Scientific Conference], Novosibirsk, 26-30 March 2012. Chelyabinsk, Publishing center of YuUrSU, 2012, pp. 123-133.
4. Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Spivak S.I. Posledovatel'no parallel'noe opredelenie kineticheskikh parametrov [The parallel determination of kinetic parameters]. *Zhurnal SVMO* [Journal of Srednevolzhsky Mathematical Society], 2009, vol. 11, no. 2, pp. 14-24.
 5. Gubaydullin I.M., Lind Yu.B., Koledina K.F. Metodologiya rasparallelivaniya pri reshenii mnogoparametricheskikh obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki [Parallelization methodology for solving multiparameter inverse problems of chemical kinetics]. *Vychislitel'nye metody i programmirovaniye* [Computational methods and programming], 2012, vol. 13, no. 1, pp. 236-244.
 6. Awrejcewicz J., Lind Y.B., Gubaidullin I.V., Koledina K.F. Modern information technologies in construction of kinetic models for reactions of metal complex catalysis. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 2012, no. 2 (4), art no. 043003 (4 p.).
 7. Radchenko G.I., Sokolinskiy L.B. Tekhnologiya postroeniya virtual'nykh ispytatel'nykh stendov v raspredelennykh vychislitel'nykh sredakh [Technology for virtual test beds in distributed computing environments]. *Nauchno-tekhnicheskiiy vestnik Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo universiteta informatsionnykh tekhnologiy, mekhaniki i optiki* [Scientific and Technical Bulletin of St. Petersburg State University of Information Technologies, Mechanics and Optics]. St. Petersburg, 2008, no. 54, pp. 134-139.
 8. Radchenko G.I. Grid-sistema CAEBeans: integratsiya resursov inzhenernykh paketov v raspredelennye vychislitel'nye sredy [Grid system CAEBeans: integration of resources in engineering packages distributed computingional environment]. *Parallel'nye vychislitel'nye tekhnologii (PaVT'2009): Trudy mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii* [Parallel Computing Technologies (PaVT'2009): Proceedings of the International Scientific Conference]. Nizhniy Novgorod, 30 March - 3 April 2009. Chelyabinsk, YuUrSU Publ., 2009, pp. 281-292.
 9. Radchenko G.I. Servisno-orientirovanny podkhod k ispol'zovaniyu sistem inzhenernogo analiza v raspredelennykh vychislitel'nykh sredakh [Service-oriented approach to the use of CAE systems in distributed computing environments]. *Superkomp'yutery i vysokoproizvoditel'nye vychisleniya* [Supercomputers and high-performance computing], 2011, no. 5 (65), pp. 81-87.
 10. Radchenko G.I., Sokolinskiy L.B., Shamakina A.V. Razrabotka komponentno-orientirovannykh CAEBean-obolochek dlya paketa ANSYS CFX [The development of component-oriented CAEBean-shell package ANSYS CFX]. *Parallel'nye vychislitel'nye tekhnologii (PaVT'2008): Trudy mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii* [Parallel Computing Technologies (PaVT'2008): Proceedings of the International Scientific Conference]. St.Petersburg, 28 January - 1 February 2008. Chelyabinsk, YuUrSU Publ., 2008, pp. 438-443.