

О. А. ДМИТРИЄВА, д-р техн. наук, проф., зав. каф. ДонНТУ,
Покровськ,
Н. Г. ГУСЬКОВА^{1,2}, ¹асп. ДонНТУ, Покровськ, ²Вища технічна
школа університету прикладних наук, Бінген, Німеччина

ПАРАЛЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ РОЗЩЕПЛЕННЯ ЕНАНТИОМЕРІВ

Роботу присвячено паралельному моделюванню та оптимізації динамічних процесів, що описуються еволюційними рівняннями в частинних похідних. Запропоновано модель і систему обмежень, які дозволили дослідити одночасну кристалізацію обох типів речовини, що значно прискорило симуляцію процесів розщеплення. Розглянуто питання зведення розв'язання еволюційних рівнянь в частинних похідних до систем звичайних диференціальних рівнянь з дискретизацією за просторовими змінними. Для розв'язання отриманої задачі Коші запропоновано багатоточкові колокаційні блокові різницеві схеми, орієнтовані на ефективну паралельну реалізацію, що дозволяє забезпечувати управління кроком інтегрування. Прикладна реалізація розроблених алгоритмів здійснювалася на розроблених і обґрунтованих моделях розподілу енантіомерів у відповідності до фізичного змісту процесів та експериментально отриманих результатів. Іл.: 7. Табл.: 1. Бібліогр.: 12 назв.

Ключові слова: паралельне моделювання; оптимізація; розщеплення енантіомерів; управління кроком; еволюційні рівняння; різницеві схеми.

Постановка проблеми та аналіз літератури. Побудова математичної моделі, що дозволяє об'єктивно описувати реальний об'єкт, являє собою замкнуту систему рівнянь з використанням великої кількості параметрів, які, як правило, мають на увазі сильний взаємозв'язок. Цей факт значно ускладнює математичне формулювання моделі та, в більшості випадків, характеризується відсутністю аналітичних розв'язків. Отримання числових розв'язань при цьому стає можливим тільки з залученням високопродуктивної обчислювальної техніки, як правило, з паралельною архітектурою [1]. Саме таку проблему ілюструє завдання моделювання процесу розщеплення енантіомерів, представлене у вигляді балансу популяцій, що описується диференціальними рівняннями в частинних похідних (ДРЧП) [2 – 5]. Зростання попиту на "чисті" енантіомери, яке спостерігається протягом останніх десятиліть [3 – 7], піднімає питання про створення оптимального методу, що дозволяє з мінімальними витратами проводити розподіл компонентів в ахіральному середовищі. "Талідомідова трагедія", заборона на подальше використання стеріоізомерів в медицині, незастосовність багатьох хімічних

компонентів сформували підґрунтя для дослідження проблематики питання і проведення експериментів для визначення оптимальної концентрації діючої речовини за допомогою перетворення рацемічної суміші [2, 8]. Альтернативою високовартісних експериментів є розробка та дослідження математичних моделей, які дозволяють оцінити ступінь чистоти одержуваного в ході розщеплення з'єднання, відповідність результатів кристалізації висунутим до лікарських препаратів вимогам і т.п. Висока розмірність таких моделей, наявність множини змінних, що впливають на результат, а також необхідність обрання початкових умов вимагають тривалого часу виконання і обумовлюють необхідність використання оптимізаційних підходів для вирішення поставленого завдання [3 – 4, 8]. Найбільш ефективний внесок у вирішення ДРЧП в спектрі визначених застосувань вносять наступні підходи: неструктуровані сітки [9], адаптивність [10], багатосіткові методи і паралелізм [1, 12 – 13].

Мета статті полягає в розробці паралельних алгоритмів чисельного розв'язання динамічних задач, що описуються рівняннями з частинними похідними з можливістю управління кроком інтегрування по змінній часу та за просторовими змінними, на прикладі модифікованої математичної моделі розщеплення енантіомерів в ахіральному середовищі, та оптимізації чисельних реалізацій отриманих різницевих співвідношень в сучасних паралельних обчислювальних системах.

Розробка і обґрунтування математичної моделі розщеплення енантіомерів. Процес кристалізації речовини являє собою розщеплення вихідного матеріалу в ахіральному середовищі. Речовинам, які беруть участь в описуваних реакціях (енантіомери), присутня властивість хіральності, що має на увазі несуміщення в просторі структур двох стереоізомерів, наділених однаковою будовою і різною просторовою орієнтацією [2, 4 – 5, 8]. Така особливість значно ускладнює моделювання реакції. В якості речовини, якій притаманні такі властивості, при розробці моделі був використаний аспарагін, з'єднання якого є хіральними і різняться в залежності від просторової орієнтації ділянки молекули. Крім того, наведені в роботі результати були підтверджені експериментами з гауфінізином [3]. Істотними особливостями таких речовин є залученість в процеси, що протікають в організмі людини. Молекули *L*-аспарагіну, отримані в ході розщеплення речовини, використовуються в фармацевтиці для створення лікарських препаратів, а участь в процесі *D*-аспарагіну згубно впливає на організм людини.

Кристалізатор, який використовувався для проведення експериментів, є середовищем, всередині якого речовини піддаються впливу температури і тиску [2 – 7]. Особливу увагу при створенні моделі було приділено геометрії кристалізатора, його складовим блокам і змінам реакції на кожній ділянці. В ході реакції рацемічна суміш, що містить на початковому етапі визначену кількість чистого *L*-аспарагіну, розпадається на кристали, які здійснюють рух вгору по трубці кристалізатора. Обумовлений цей процес не тільки показниками зростання кристалів, введених в реакцію, але й перетворенням хімічної суміші. З причини опору середовища і різної маси речовин, кристали займають різні позиції в просторі. Така диференціація продукту стала передумовою для використання двох координат дискретизації – розмірної і просторової. Математично процес розщеплення представлений у вигляді системи диференціальних рівнянь з частинними похідними, які сформульовані з використанням балансу популяції на основі розширеного рівняння згортання Смолуховського [3 – 4], яке описує тільки злиття частинок.

В роботі моделюється розподіл популяції частинок, що визначається розмірами діаметрів кожної сформованої частки та її розміщенням у просторі. В якості факторів, що визначали хід реакції, в роботі виділялись наступні:

- збільшення числа молекул (швидкість розпаду основної речовини на два типи молекул);
- опір потоку всередині кристалізаційної колби;
- вибір початкових умов для старту реакції;
- обсяг з'єднання, що вступає в реакцію на початковому етапі (рацемічна суміш).

Стадії перетворення рацемічної суміші, представлені у вигляді балансу популяцій, описуються за допомогою наступної системи ДРЧП, в яку входять балансове рівняння для визначення кристалів у твердій (*solid*) (1) або рідкій (*liquid*) фракціях (2)

$$A(x) \frac{\partial n}{\partial t} \Big|_{x,L,t} = - \frac{\partial}{\partial x} (A(x) v_{solid}(x, L, t) n(x, L, t)) + A(x) G(c) \frac{\partial n}{\partial L} \Big|_{x,L,t} + \dot{V}_{solid} (n_M(L, t) - n(x, L, t)) \delta(x - x_M), \quad (1)$$

з граничними умовами

$$v_p(0, L, t) n(0, L, t) - D \frac{\partial n}{\partial L} \Big|_{0,L,t} = 0,$$

$$D \frac{\partial n}{\partial L} \Big|_{H,L,t} = 0$$

і початковою умовою

$$n(x, L, 0) = n_0(x, L),$$

де $A(x)$ – площа поперечного перерізу кристалізатора, x – просторова координата, t – змінна часу, $n(x, L, t)$ – числова щільність популяції, L – внутрішня координата (діаметр частинок), $v_{solid}(x, L, t)$ – швидкість конвективного транспорту частинок, $G(c)$ – швидкість росту кристалів, V_{solid} – обсяг частинок потоку, x_M – положення з'єднання між кристалізатором і подрібнювачем.

$$\frac{d}{dt}(A(x)\Delta x \in \rho_{liquid}) = \dot{V}_{liquid}(x) - \dot{V}_{liquid}(x + \Delta x) + \rho_{liquid} \int_0^\infty A(x)G(c) \frac{\partial n}{\partial L} \frac{\pi}{6} L^3 dL \Delta x, \quad (2)$$

де всі змінні мають ті ж самі визначення, що і в попередньому співвідношенні з відповідними позначками в нижніх індексах, ρ – щільність речовини потоку.

Кристалізатор, за допомогою якого здійснюється розщеплення двох типів енантіомерів, являє собою середовище, всередині якого відбувається взаємодія рідкої і твердої складових. З урахуванням опору середовища та різної маси елементів кристали займають різні позиції в просторі. Основну увагу приділено концентрації речовини в ході реакції і динаміці її зміни. Для інтерпретації отриманих результатів в роботі запропоновано використання трифазових діаграм стану, які фіксують величини концентрації в моменти переходу досліджуваної речовини з рідкого в твердий стан. На початковому етапі фазова діаграма стану являє собою трикутник з обмежувачими лініями, координати яких визначаються експериментально з розрахованої концентрації молекул аспарагіну в кристалізаторі. Для визначення ізотерм розчинення побудовано відповідні співвідношення, параметри яких визначають концентрацію кристалів усередині кристалізатора. Визначені на основі розрахованих координат обмежуючі лінії характеризують точки розчинності для реакції. Таким чином, напрямок руху молекул, що формуються, буде обмежений, що з точки зору фізичного сенсу пояснюється неможливістю кристалізації в областях, в яких не досягнутий необхідний температурний показник. Об'ємна частка рідини оцінювалась як різниця між загальним обсягом всередині кристалізатора і частками, які займають кристали обох видів. Точка старту реакції розраховувалася на підставі складу рацемічної суміші. В експериментах, які проводилися при виконанні даної роботи, використовувався справжній конгломерат, в складі якого були присутніми молекули кожного виду кристалів. Концентрація в рацемічній суміші складала 0.11 [mB/mP], де mB – маса кристалів певного виду, mP –

загальна маса розчину всередині кристалізаційної колби. Підставляючи значення концентрації в розрахункові формули, визначалися координати точки старту реакції. При зміні складу рацемічної суміші початкові умови відповідно коригувалися. На постійній основі здійснювався перерахунок координат спостережуваних точок, що дозволяло відстежувати напрямок реакції всередині кристалізатора. Концентрація молекул кожного виду (c_L, c_D) розраховувалася зі співвідношень:

$$c_L = \frac{c_{startL}}{A \varepsilon_{fluid}}, \quad c_D = \frac{c_{startD}}{A \varepsilon_{fluid}}, \quad (3)$$

де A – площа спостереження реакції, ε_{fluid} – об'ємна частка рідини, c_{startL}, c_{startD} – відповідні початкові концентрації.

Фазові діаграми, які характеризують показники концентрації речовин на основі змодельованих параметрів, наведено на рис. 1 – 4.

У розробленій моделі передбачено можливість одночасного моделювання процесів кристалізації двох типів речовини. Визначено, що найбільший вплив на цей процес надають кінетичні параметри росту і нуклеації кристалів. За рахунок участі в реакції двох типів енантіомерів проведені додаткові експерименти по визначенню залежностей між ходом кристалізації і значеннями досліджуваних параметрів, а саме, змодельовані наступні ситуації:

1. Формування обох типів кристалів. Цю модель було розроблено і обґрунтовано за рахунок введення в реакцію чистого конгломерату з високою концентрацією кристалів обох типів (рис. 1).

2. Формування кристалів певного виду. Визначалося введенням в реакцію на початковій стадії рацемату і очищених кристалів тільки одного типу (рис. 2).

3. Формування кристалів обох типів за умови введення в реакцію тільки одного очищеного компонента і рацемічної суміші. Це явище є переважним, оскільки не несе додаткових витрат на очищені кристали контр-енантіомеру, однак може спостерігатися тільки за умови коректного вибору кінетичних параметрів (рис. 3 – 4).

Зведення чисельної реалізації рівнянь в частинних похідних до методу прямих на колокаційних блокових різницевих схемах. В роботі пропонується застосування просторової дискретизації еволюційних рівнянь методом прямих і чисельної реалізації отриманої задачі Коші (4) для системи звичайних диференціальних рівнянь із залученням колокаційних блокових різницевих схем [8, 10]. При цьому всі переваги розв'язання (паралельне управління кроком, локальний

контроль помилок, простота явних методів і стійкість неявних) можуть бути реалізовані і для випадку частинних похідних, тобто метод прямих дозволяє отримати наближення вищого порядку при дискретизації просторових похідних без значного збільшення обчислювальної складності [8, 11 – 12].

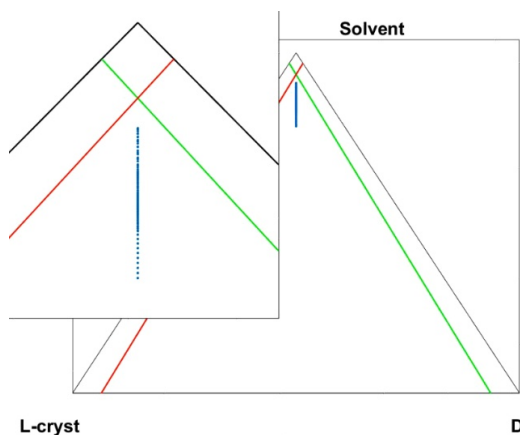


Рис. 1. Введення в реакцію чистого конгломерату

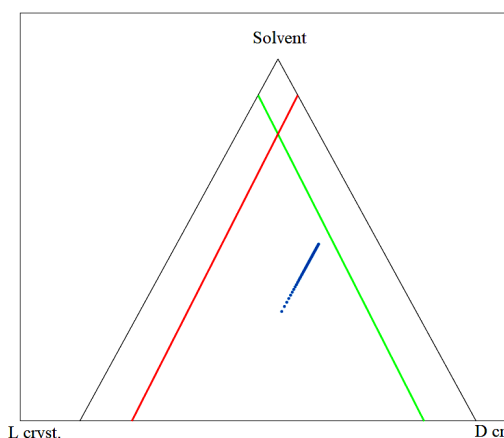


Рис. 2. Введення в реакцію рацемату

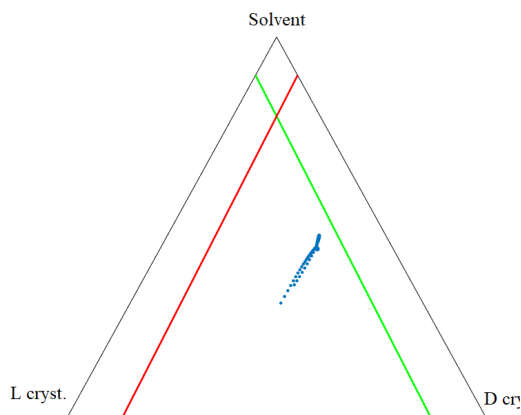


Рис. 3. Введення в реакцію одного компоненту і рацемічної суміші, $t = 100$ sec.

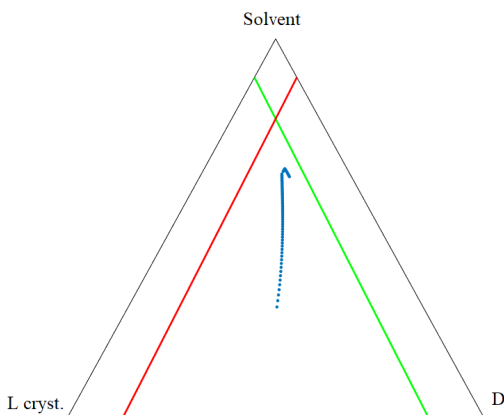


Рис. 4. Введення в реакцію одного компоненту і рацемічної суміші, $t = 3000$ sec.

$$u' = \varphi(t, u(t)), \quad u(t_0) = u_0, \quad t \in [t_0, T]. \quad (4)$$

Одним з ключових питань при чисельному розв'язанні сформованого завдання (4), як правило, великої розмірності, є вибір методу розв'язання, який повинен бути орієнтований на реалізацію в паралельних обчислювальних системах. Крім того, метод розв'язання

повинен мати можливість налаштування кроку інтегрування, тобто забезпечувати функцію τ -уточнення. Для реалізації описаних завдань в роботі пропонується використання колокаційних блокових методів з контролем на кроці [1, 9 – 13].

Колокаційні схеми для методу прямих в якості вузлів колокації використовують множину точок рівномірної сітки по кожній утвореній прямій $t_{n,i} = t_{n,0} + i\tau \in [t_{n,-m+1}, t_{n,s}]$, $i = -(m-1), -(m-2), \dots, 0, 1, \dots, s$, формується канонічний вигляд багатокрокових колокаційних блокових методів з числом опорних точок m і числом розрахункових точок s [9]. Для початку розрахунку вводиться множина опорних значень U_0 , які можуть бути визначені однокроковим методом, що забезпечує необхідну точність розрахунків [1]. Пошук чисельного розв'язання може бути зведений до вирішення на кожному кроці нелінійної системи рівнянь (3) з послідовним визначенням шуканих векторів. Невідомі розрахункові коефіцієнти різницевої схем [10] визначаються з умов апроксимації або за допомогою інтегро-інтерполяційного методу. В роботі [1] доведено стійкість цих методів за початковими даними і по правій частині, також для них визначено максимальний порядок апроксимації, що становить величину $m+s$. Після визначення невідомих коефіцієнтів матриць з відповідними розмірностями $s \times m$ і $s \times s$ обчислення багатокроковим блоковим методом, представленим у вигляді системи нелінійних рівнянь, зводиться до ітераційного процесу. До початку розв'язання отриманої системи попередньо визначаються значення вектору U_0 в опорних точках початкового блоку. Обчислення наближених значень в кожному наступному розрахунковому блоці здійснюється ітераційно. Визначення початкових значень в розрахунковому блоці здійснюється на основі багатокрокового предикторного методу, що дозволяє підвищити точність початкового наближення.

Паралельна реалізація та оптимізація моделі розщеплення енантімерів. Розпаралелювання обчислень проводилося на основі запропонованих блокових різницевої схем з можливостями управління кроком інтегрування за часом (τ -уточнення) і за простором (h -уточнення). При цьому особливу увагу було приділено оптимізації пошуку розв'язання, яка обумовлена великою розмірністю сформованої системи рівнянь, наявністю множини змінних, що впливають на результат, можливістю вибору геометрії кристалізатора.

Паралельна реалізація здійснювалася за допомогою локального кластера Parallel Computing ToolBox, особливістю використання якого є можливість самостійного вибору кількості запущених процесів або направлення конкретного пулу обчислювальних робіт на вказаний

сегмент кластера. Використання такого підходу передбачає повний контроль користувача за ходом виконання обчислень, можливість корекції процедури розпаралелювання і самостійної оцінки оптимальної кількості процесорів. Загальну схему наведено на рис. 5. На рис. 6 наведено зразок коду, який містить в собі розбиття завдання і направлення на станції для обчислень. При реалізації паралельних обчислень необхідно враховувати той факт, що системі потрібен деякий час на запуск кожної станції, на відправку завдань для обчислення, обробку і компіляцію отриманих результатів. Тільки в тому випадку, якщо розмірність системи і трудомісткість послідовного обчислення вище, ніж можливості паралельного розрахунку, є сенс запуску і подальшого використання робочих станцій. Результати паралельної реалізації (2 – 3) при використанні різної кількості паралельних станцій, що виконують завдання моделювання, наведені в табл. 1. В якості розрахункового використовувався колокаційний блоковий метод [1] з розмірностями блоків 2×2 за базовим методом, для τ -уточнення використовувався допоміжний блоковий метод 3×2 , для h -уточнення за просторовою змінною система диференціальних рівнянь будувалася з перетвореною матрицею [8].

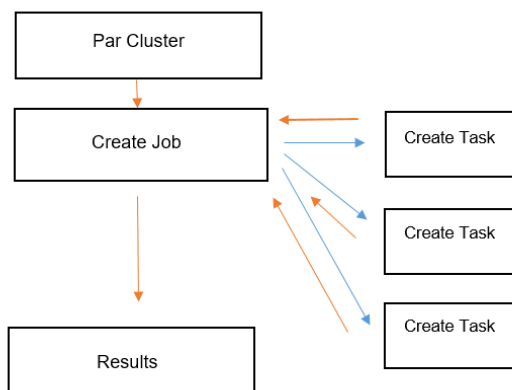


Рис. 5. Схема розпаралелювання процесу шляхом створення локального кластеру

```

shed=parcluster();
job=createJob(shed);
set(job, 'AttachedFiles', {'useode45f.m', 'useode23f.r

task1=createTask(job, @useode45f, 1, {tspan, T});
task2=createTask(job, @useode23f, 1, {tspan, T});
task3=createTask(job, @useode113f, 1, {tspan, T});
task4=createTask(job, @useode23sf, 1, {tspan, T});

submit(job)
wait(job)
results=fetchOutputs(job);
  
```

Рис. 6. Формування переліку завдань для виконання на кластері

З отриманих даних видно, що простим нарощуванням кількості робочих станцій неможливо домогтися пропорційного скорочення часу обчислень, тому необхідно оцінювати оптимальне число одночасно запущених процесів. Розв'язання завдання оптимізації здійснювалося з використанням генетичних алгоритмів. Для формування популяції батьки

обиралися на основі інбридингу, тобто перша батьківська особина обиралася випадково, а друга – як максимально відповідна відібраній раніше.

Таблиця 1

Час обчислення завдання з різною кількістю робочих станцій

Метод	Кількість робочих станцій	Підсумковий час обчислення (сек.)
Послідовне обчислення	1	187
Паралельне обчислення	2	129
	4	117
	8	72
	12	87
	16	82

Також за допомогою генетичних алгоритмів оцінювалася максимальна відповідність цільової функції поставленим умовам. Оцінювання значень цільової функції відбувалося на основі вимог, висунутих до чистоти вихідного продукту

$$F(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow \max,$$

де x_1, x_2, \dots, x_N – набір характеристик системи. За допомогою змінних в разі моделювання процесів кристалізації були виражені кінетичні параметри, значення вектору температури, геометричні характеристики кристалізатора. В якості базового для оптимізації поставленої задачі використано алгоритм еволюційної стратегії матриці коваріації СМА-ES, який використовує коваріаційну матрицю для відстеження залежностей між змінними розв'язань. Даний алгоритм забезпечив високі показники паралелізму і дуже хорошу збіжність при виборі початкових умов. Побудова матриці коваріацій і оновлення її значень на кожному кроці обчислень дозволили значно мінімізувати час, що витрачався на обчислення. Розпаралелювання розв'язання (рис. 7) не вимагало очікування генерації кожної наступної особини і почергового порівняння всіх особин популяції.

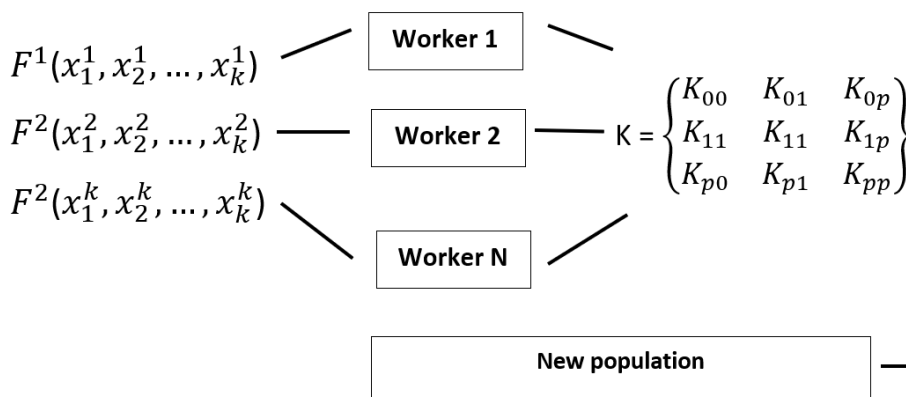


Рис. 7. Розпаралелювання алгоритму CMA-ES

Висновки. Дослідження, результати яких наведено у статті, присвячено паралельному моделюванню та оптимізації динамічних процесів, що описуються еволюційними рівняннями в частинних похідних. Прикладна реалізація запропонованих алгоритмів здійснювалася на розроблених і обґрунтованих моделях розподілу енантіомерів у відповідності до фізичного змісту процесів та експериментально отриманих результатів. У процесі вирішення наукової задачі одержали подальший розвиток питання, що стосуються переходу від розв'язання еволюційних рівнянь в частинних похідних до систем звичайних диференціальних рівнянь з дискретизацією за просторовими змінними, що дозволило значно підвищити точність моделювання по відношенню до відомих явних і неявних сіткових методів з порівняними розмірностями кроків за часом і простором. Для зведення еволюційних рівнянь до методу прямих були використані багатоточкові колокаційні блокові різницеві схеми, орієнтовані на ефективну паралельну реалізацію, що дозволило забезпечити управління кроком інтегрування.

Модифікація моделі, що враховувала введення в реакцію чистого конгломерату та рацемічної суміші, дозволила дослідити одночасну кристалізацію обох типів речовини, що значно прискорило симуляцію процесів розщеплення. Запропонована система обмежень моделі, яка базується на точному оцінюванні концентрації речовини в кожен момент часу та відповідності отриманих результатів фізичному змісту спостережуваного процесу, дозволила значно скоротити розмірність системи при просторовій дискретизації еволюційного ДРЧП методом прямих. Комп'ютерна модель кристалізації дозволила оцінювати такі показники процесу кристалізації як приріст числа молекул, опір потоку,

що спостерігається всередині кристалізаційної колби, початкові умови для старту реакції, обсяг з'єднання, що вступає в реакцію на початковому етапі. Практична реалізація моделі дозволила визначити оптимальні показники кінетичних параметрів реакції по перетворенню енантіомерів, змінити геометрію кристалізатора для досягнення кращих результатів і збільшення обсягу речовини, одержуваної в ході реакції. Запропоновано оптимізацію моделі, яка полягає у використанні генетичних алгоритмів для підбору параметрів геометрії кристалізатора і початкових умов кінетичних параметрів реакції. В якості головного алгоритму обрано метод стратегії еволюції ковариаційної матриці адаптації, що дозволило з високою точністю визначити відповідність отриманих розв'язків встановленим критеріям. Використання розробленої моделі дозволить прогнозувати результати хімічних реакцій з використанням рацемічних сумішей і визначити оптимальну кількість вихідних реагентів перед початком реакції.

Список літератури:

1. *Huskova N.* Simulation and Optimization of a Continuous Fluidized Bed Process for the Separation of Enantiomers by Preferential Crystallization / *N. Huskova, M. Mangold, J. Gänsch, E. Temmel, H. Lorenz, A. Seidel-Morgenstern* // International Congress on Particle Technology – PARTEC 2019, April 9 – 11, 2019. – Nürnberg, Germany. – 2019.
2. *Temmel, E.* A Short-Cut Method for the Quantification of Crystallization Kinetics / *E. Temmel, H. Eisehshmidt* // *Cryst. Growth Des.* – 2016. – Vol. 16. – P. 6743-6755.
3. *Mangold M.* Modelling geometrical and fluid-dynamic aspects of a continuous fluidized bed crystallizer for separation of enantiomers / *M. Mangold, D. Khlopov, E. Temmel, H. Lorenz, A. Seidel-Morgenstern* // *Chemical Engineering Science.* – 2017. – № 160. – P. 281-290.
4. *Mangold M.* Nonlinear model reduction of a continuous fluidized bed crystallizer / *M. Mangold, L. Feng, D. Khlopov, S. Palis, P. Benner, D. Binev, A. Seidel-Morgenstern* // *J. Comput. Appl. Math.* – 2015. – № 289. – P. 253-266.
5. *Binev D.* Study of crystal size distributions in a fluidized bed crystallizer / *D. Binev., A. Seidel-Morgenstern, H. Lorenz* // *Chemical Engineering Science.* – 2015. – № 133. – P. 116-124.
6. *Binev D.* Continuous separation of isomers in fluidized bed crystallizers / *D. Binev., A. Seidel-Morgenstern, H. Lorenz* // *Cryst. Growth Des.* – 2016. – № 16. – P. 1409-1419.
7. *Гуськова Н.Г.* Моделирование процесса расщепления энантиомеров с использованием кристаллизатора / *Н.Г. Гуськова, В.А. Святный* // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка. – 2017. – № 2. – С. 60-68.
8. *Дмитрієва О.А.* Реализация метода прямых для уравнений в частных производных коллокационными блочными разностными схемами / *О.А. Дмитрієва, Н.Г. Гуськова* // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія: Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка. – 2018. – № 1 (26). – С. 8-18.
9. *Дмитрієва О.А.* Разработка коллокационных схем параллельного управления шагом в эволюционных уравнениях / *О.А. Дмитрієва, Н.Г. Гуськова* // Вестник НТУ "ХПИ". Серія: Інформатика и моделирование. – Харьков: НТУ "ХПИ". – 2018. – № 24 (1300). – С. 25-36.

10. *Bashkov E.* Parallel multiple blocked methods of Bickart type / *E. Bashkov, O. Dmytriyeva, N. Huskova* and ets. // *Proceedings of SPI, The International Society for Optical Engineering, USA.* – 2019. – P. 11176 – 201.
11. *Dmytriyeva O.* Introduction of an irregular grid with respect to the spatial coordinate for the method of lines/ *O. Dmytriyeva, N. Huskova* // *Advanced Information Systems and Technologies: proceedings of the VI international scientific conference* – Sumy: Sumy State University, 2018. – P. 30-33.
12. *Dmytriyeva O.* Parallel time step control of lines method for the evolution equations / *O. Dmytriyeva, N. Huskova* // *III International Conference Computer Algebra and Information Technologies, CAIT.* – 2018. – P. 133-136.

References:

1. Huskova, N., Mangold, M., Gänsch, J., Temmel, E., Lorenz, H., and Seidel-Morgenstern, A. (2019), "Simulation and Optimization of a Continuous Fluidized Bed Process for the Separation of Enantiomers by Preferential Crystallization", *International Congress on Particle Technology - PARTEC 2019*, Nürnberg, Germany, 2 p.
2. Temmel, E., and Eisenschmidt, H. (2016), "A Short-Cut Method for the Quantification of Crystallization Kinetics", *Cryst. Growth Des.*, Vol. 16, pp. 6743-6755.
3. Mangold, M., Khlopov, D., Temmel, E., Lorenz, H., and Seidel-Morgenstern, A. (2017), "Modelling geometrical and fluid-dynamic aspects of a continuous fluidized bed crystallizer for separation of enantiomers", *Chemical Engineering Science*, № 160, pp. 281-290.
4. Mangold, M., Feng, L., Khlopov, D., Palis, S., Benner, P., Binev, D., and Seidel-Morgenstern, A. (2015), "Nonlinear model reduction of a continuous fluidized bed crystallizer", *J. Comput. Appl. Math.*, № 289, pp. 253-266.
5. Binev, D., Seidel-Morgenstern, A., and Lorenz, H. (2015), "Study of crystal size distributions in a fluidized bed crystallizer", *Chemical Engineering Science*, № 133, pp. 116-124.
6. Binev, D., Seidel-Morgenstern, A., and Lorenz, H. (2016), "Continuous separation of isomers in fluidized bed crystallizers", *Cryst. Growth Des.*, Vol. 16, pp. 1409-1419.
7. Huskova, N., and Svyatnyy, V. (2017), "Simulation of the process of cleavage of enantiomers with the use of a crys-tallizer", *Scientific works of Donetsk National Technical University. Series: Computer Science, Cybernetics and Computer Engineering*, № 2, pp. 60-68.
8. Dmytriyeva, O., and Huskova, N. (2018), "Introduction of an irregular grid with respect to the spatial coordinate for the method of lines", *Advanced Information Systems and Technologies: proceedings of the VI international scientific conference*, May 16 – 18, 2018, Sumy, pp. 30-33.
9. Dmytriyeva, O., and Huskova, N. (2018), "Development of collocation schemes for parallel control of step applicable to the evolution equations", *Herald of the National Technical University "KhPI". Subject issue: Information Science and Modelling*, № 24 (1300), pp. 25-36.
10. Bashkov, E., Dmytriyeva, O., and Huskova, N. (2019), "Parallel multiple blocked methods of Bickart type", *Proceedings of SPI, The International Society for Optical Engineering, USA*, pp. 11176-201.
11. Dmytriyeva, O., and Huskova, N. (2018), "Introduction of an irregular grid with respect to the spatial coordinate for the method of lines", *Advanced Information Systems and Technologies, VI international scientific conference*, pp. 30-33.
12. Dmytriyeva, O., and Huskova, N. (2018), "Parallel time step control of lines method for the evolution equations", *III International Conference Computer Algebra and Information Technologies, CAIT*, pp. 133-136.

Статтю представил д-р техн. наук, проф. ДонНТУ Башков Е.А.

Надійшла (received) 5.09.2019

Dmyriyeva Olga, Dr.Sci.Tech, Professor
Donetsk National Technical University
Pl. Shibankova, 2, Pokrovsk, Ukraine, 85301
Tel.: +38 (050) 998-11-75, e-mail: olha.dmytriieva@donntu.edu.ua
ORCID ID: 0000-0001-8921-8433

Huskova Nadiia^{1,2}, PhD student
¹Donetsk National Technical University,
Pl. Shibankova, 2, Pokrovsk, Ukraine, 85301
²Higher Technical School of the University of Applied Sciences, Bingen, Germany
Berlinstraße 109, 55411,
Tel.: +49 (6721) 4090, e-mail: huskovanadiia@gmail.com
ORCID ID: 0000-0002-5901-4189

УДК 004.272.2:519.63

Паралельне моделювання та оптимізація процесу розщеплення енантіомерів / Дмитрієва О.А., Гуськова Н.Г. // Вісник НТУ "ХПІ". Серія: Інформатика та моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2019. – № 28 (1353). – С. 16 – 29.

Роботу присвячено паралельному моделюванню та оптимізації динамічних процесів, що описуються еволюційними рівняннями в частинних похідних. Запропоновано модель і систему обмежень, які дозволили дослідити одночасну кристалізацію обох типів речовини, що значно прискорило симуляцію процесів розщеплення. Розглянуто питання зведення розв'язання еволюційних рівнянь в частинних похідних до систем звичайних диференціальних рівнянь з дискретизацією за просторовими змінними. Для розв'язання отриманої задачі Коші запропоновано багатоточкові колокаційні блокові різницеві схеми, орієнтовані на ефективну паралельну реалізацію, що дозволяє забезпечувати управління кроком інтегрування. Прикладна реалізація розроблених алгоритмів здійснювалася на розроблених і обґрунтованих моделях розподілу енантіомерів у відповідності до фізичного змісту процесів та експериментально отриманих результатів. Іл.: 7. Табл.: 1. Бібліогр.: 12 назв.

Ключові слова: паралельне моделювання; оптимізація; розщеплення енантіомерів; управління кроком; еволюційні рівняння; різницеві схеми.

УДК 004.272.2:519.63

Параллельное моделирование и оптимизация процесса расщепления энантиомеров / Дмитриева О.А., Гуськова Н.Г. // Вестник НТУ "ХПИ". Серія: Інформатика і моделювання. – Харків: НТУ "ХПІ". – 2019. – № 28 (1353). – С. 16 – 29.

Робота посвящена параллельному моделированию и оптимизации динамических процессов, описываемых эволюционными уравнениями в частных производных. Предложены модель и система ограничений, которые позволили исследовать одновременную кристаллизацию обоих типов вещества, что значительно ускорило моделирование процессов расщепления. Рассмотрены вопросы сведения решения эволюционных уравнений в частных производных к системам обыкновенных дифференциальных уравнений с дискретизацией по пространственным переменным. Для решения полученной задачи Коши предложены многоточечные коллокационные блочные разностные схемы, ориентированные на эффективную параллельную реализацию и позволяющие обеспечивать управление шагом интегрирования. Прикладная реализация разработанных алгоритмов осуществлялась на разработанных и обоснованных моделях распределения энантиомеров в соответствии с физическим смыслом процессов и экспериментально полученных результатов. Ил.: 7. Табл.: 1. Библиогр.: 12 назв.

Ключевые слова: параллельное моделирование; оптимизация; расщепление энантиомеров; управление шагом; эволюционные уравнения; разностные схемы.

UDC 004.272.2:519.63

Parallel modeling and optimization of the process of cleavage of enantiomers / Dmytriyeva O., Huskova N. // Herald of the National Technical University "KhPI". Series of "Informatics and Modeling". – Kharkov: NTU "KhPI". – 2019. – № 28 (1353). – P. 16 – 29.

The work is devoted to parallel modeling and optimization of dynamic processes described by evolutionary equations in partial derivatives. A model and a system of constraints are proposed, which made it possible to study the simultaneous crystallization of both types of substances, which significantly accelerated the simulation of the splitting processes. The problems of reducing the solution of partial differential evolution equations to systems of ordinary differential equations with discretization in spatial variables are considered. To solve the obtained Cauchy problem, multi-point collocation block difference schemes are proposed that are oriented to an effective parallel implementation and allow providing control over the integration step. Applied implementation of the developed algorithms was carried out on the developed and substantiated models of the distribution of enantiomers in accordance with the physical meaning of the processes and experimentally obtained results. Figs.: 7. Tabl.: 1. Refs.: 12 titles.

Keywords: parallel modeling; optimization; splitting of enantiomers; step control; evolution equations; difference schemes.