

Технология параллельных вычислений при определении областей неопределенности по кинетическим параметрам

А.В. Аристархов, И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак

Задачи математической интерпретации измерений относятся к области математической физики – теории обратных задач, имеющей дело с задачами, которые известны как некорректно поставленные. Решение обратной задачи – неоднозначно. Обычно это не точка в пространстве констант, а область, возникающая, по крайней мере, по двум причинам: избыточность схемы и погрешность измерений. Для нахождения области неопределенности не существует других методов, за исключением метода перебора. В каждой точке области решается прямая кинетическая задача – система дифференциальных уравнений (1), и проверяется совместность системы неравенств (2). Такая идея применения линейного программирования при математической обработке измерений принадлежит Л.В. Канторовичу [1]:

$$\frac{dX}{dt} = \Gamma^T * W \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^m |X_{ij}^p - X_{ij}^e| \leq \varepsilon_i \quad (2)$$

где X – вектор концентраций веществ; W – вектор скоростей стадий; Γ^T – транспонированная стехиометрическая матрица; X_{ij}^p и X_{ij}^e – расчетные и экспериментальные значения концентраций компонентов; m – число замеров; ε_i – характеризуют погрешности измерений.

Распараллеливание подзадач между процессорами ведется по схеме «менеджер-исполнитель». Для нашей задачи нахождения области процессор-менеджер владеет информацией о начальной точке, принадлежащей искомой области, допустим, A , которая получена решением обратной задачи. Процессор-менеджер передает данные всем процессорам-исполнителям: координаты по оси OX каждому следующему процессору с некоторым шагом h вдоль координатного направления x с ординатой исходной точки. Каждый процессор-исполнитель находит верхнее и нижнее значение области по оси OY и передает их процессору-менеджеру. Процессор с номером n должен найти и передать процессору-менеджеру значение $OY^+(n)$ и $OY^-(n)$. После того как все процессоры передадут свои пары координат, им задаются следующие значения по оси абсцисс, для которых им необходимо будет найти следующие границы области. Процедура продолжается до тех пор, пока область не будет найдена.

Проведен вычислительный эксперимент, и для реакции гидроалюминирования олефинов найдены области неопределенности (рис. 1,2).

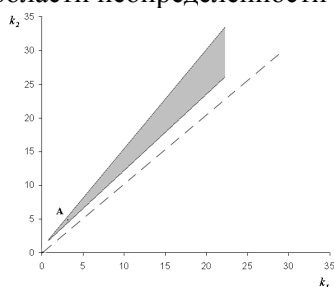


Рис. 1. Фазовая плоскость для констант k_1 и k_2

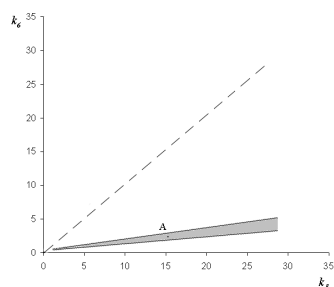


Рис. 2. Фазовая плоскость для констант k_5 и k_6

Литература

1. Канторович Л.В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений // Сибирский Математический Журнал. – 1962. – Т. 3, №. 5. – С. 701-709.