

Решение обратных задач математической химии с использованием высокопараллельных вычислений на GPGPU

М.Р. Файзуллин, А.А. Юнусов, И.М. Губайдуллин

1. Введение

Для построения кинетической модели химической реакции необходимо знание величин кинетических констант и энергий активаций отдельных стадий. Поиск неизвестных констант осуществляется посредством решения обратной задачи, в ходе которой подбираются значения параметров таким образом, чтобы минимизировать отклонение расчетных данных от экспериментальных. Вычислительная емкость данной задачи позволяет сделать предположение об эффективности применения технологий параллельных вычислений.

2. Математическое описание

Математическое описание кинетики химического процесса представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dc_1(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{m-1} s_{j1} w_j(t) \\ \frac{dc_2(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{m-1} s_{j2} w_j(t) \\ \dots \\ \frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_{j=0}^{m-1} s_{jn} w_j(t) \end{array} \right. ; \quad w_j(t) = k_j^+ \prod_{s_{ji} < 0} c_i^{|s_{ji}|}(t) - k_j^- \prod_{s_{ji} > 0} c_i^{|s_{ji}|}(t)$$

где n - количество веществ; m - количество стадий; $c_i(t)$ - концентрации веществ по времени; s_{ji} - коэффициенты стехиометрической матрицы, определяющей схему реакции; $w_j(t)$ - функции скоростей протекания стадий; k_j^+ и k_j^- - кинетические константы прямой и обратной стадий соответственно.

3. Результаты исследований

При решении обратной задачи использовалось несколько методов оптимизации: основанный на методе случайного поиска и два метода, построенных по принципам генетических алгоритмов.

Время расчетов на видеокартах ATI HD 4770 (2 шт., 1.92 TFlops) сравнивалось со временем расчета на процессоре AMD Phenom II X4 940 (6.5 GFlops). Предварительные результаты показывают 17-кратное ускорение при использовании генетического алгоритма на GPGPU.

Литература

1. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. - Уфа: РИО БашГУ, 2003. 110 с.
2. ATI Stream Computing. User Guide. - Advanced Micro Devices, 2009. 216 p.