

Параллельные вычисления при решении обратных задач физической химии

Ю.Б. Линд, И.М. Губайдуллин, М.Д. Рамазанов

Разработана методология использования технологии параллельных вычислений для решения сложных прикладных задач, связанных с минимизацией функций многих переменных. Методология реализована на двух классах физико-химических задач: построения кинетической модели реакции гидроалюминирования олефинов и оптимизации состава и оперативного управления технологическими параметрами полисахаридных буровых растворов.

1. Введение

Многие физико-химические задачи, решаемые с использованием вычислительной техники, предполагают значительный объем вычислений при достаточно низкой точности. Именно к таким задачам относятся обратные задачи химической кинетики и буровой технологии, связанные с минимизацией некоторого выбранного критерия отклонения расчета от натурального эксперимента. Значительно повысить эффективность решения подобных задач позволяет применение высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем (суперкомпьютеров). В данной работе рассмотрена методология использования параллельных вычислений для решения сложных производственных задач в применении к задачам построения кинетической схемы реакции гидроалюминирования олефинов и оперативного управления технологическими параметрами буровых растворов. Разработанная методология реализована на многопроцессорных системах различной архитектуры: суперкомпьютере МВС-100К Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН для построения кинетической модели реакции гидроалюминирования олефинов и распределенной вычислительной среде на основе локальной сети ООО «Башнефть-Геопроект» для оптимизации состава и управления свойствами буровых растворов.

2. Параллельные вычисления

Термин «параллельное программирование» охватывает широкую область, связанную с организацией расчетов на вычислительных системах, состоящих из нескольких процессорных устройств. Общим для различных типов параллельных архитектур является наличие нескольких процессорных устройств. Рассматриваемые в работе вычислительные системы относятся к классу систем с распределенной памятью, в которых каждый процессор имеет доступ только к своей локальной памяти, а между собой процессоры взаимодействуют с помощью передачи сообщений по сети. Основными преимуществами систем данного типа является хорошая масштабируемость и относительная экономичность.

Спецификой работы на системах с распределенной памятью является то, что необходимо производить распределение не только вычислений, но и данных, а также обеспечить для каждого процессора доступ к данным, расположенным в памяти других процессоров. Наиболее развитой системой программирования для суперкомпьютеров с распределенной памятью является стандарт MPI (Message Passing Interface), позволяющий создавать на основе обмена сообщениями между процессорами МВС эффективные, надежные и переносимые программы [1].

При разработке параллельных алгоритмов решения сложных научно-технических задач принципиальным моментом является анализ эффективности использования параллелизма, состоящий обычно в оценке получаемого ускорения процесса вычислений [2]. Ускорение S_p , по-

лучаемое при использовании параллельного алгоритма для p процессоров, по сравнению с последовательным вариантом выполнения вычислений определяется величиной

$$S_p = T_1/T_p, \quad (1)$$

где T_1 и T_p – время, потраченное на выполнение программы, соответственно, одним и p процессорами.

Эффективность E_p использования процессоров определяется соотношением

$$E_p = S_p/p. \quad (2)$$

Существуют разные способы организации параллельных вычислений. Наиболее простым способом организации параллельных вычислений является распараллеливание по экспериментальной базе, т.е. организация однотипных вычислений для разных наборов начальных данных. Лучше всего подходят для распараллеливания объекты исследования, обладающие внутренним параллелизмом, например, включающие протекающие параллельно процессы. Наиболее эффективным и трудоемким способом распараллеливания является распараллеливание численных методов решения задач. В работе предложено распараллеливание вычислительного процесса сочетанием этих трех уровней:

- 1) распараллеливание по экспериментальной базе;
- 2) использование внутреннего параллелизма задачи;
- 3) распараллеливание численного метода решения обратной задачи.

2.1 Распараллеливание по экспериментальной базе

Распараллеливание вычислительного процесса по экспериментальной базе представляет собой решение прямой и обратной задач параллельно для различных наборов начальных данных. Для реакции гидроалюминирования олефинов рассматривается более 350 независимо протекающих реакций при различных температурах или различных вариантах механизмов при одинаковых температурах (рис. 1) [3]:

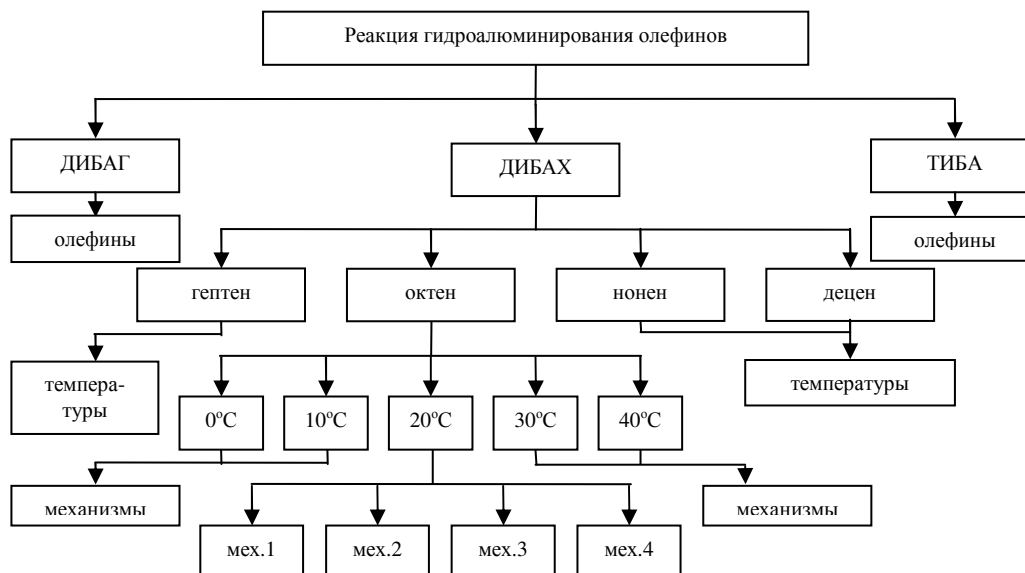


Рис. 1 – Независимо протекающие стадии реакции гидроалюминирования олефинов

При моделировании технологических параметров полисахаридных буровых растворов экспериментальная база включает материал по различным буровым растворам, для которых составляется несколько вариантов рецептов и проводится серия повторных экспериментов (рис. 2). В лаборатории промывочных жидкостей ООО «Башнефть-Геопроект» исследуются различные полисахаридные растворы (афронсодержащая промывочная система – АПС, ингибирующий буровой раствор с высокой транспортирующей способностью – ИБРВТС, безглинистый полисахаридный гидрофобизирующий малокарбонатный буровой раствор – БПГМБР, эмульси-

онно-гелевый полисахаридный буровой раствор – БЭГПБР, безглинистый полимер-солевой буровой раствор – БПСУБР, безглинистый полимер-солевой утяжеленный буровой раствор – БПСУБР) [4]. Разработана реляционная система управления базой данных буровых растворов, содержащей сведения по буровым растворам, применяемым на месторождениях ОАО «АНК «Башнефть».

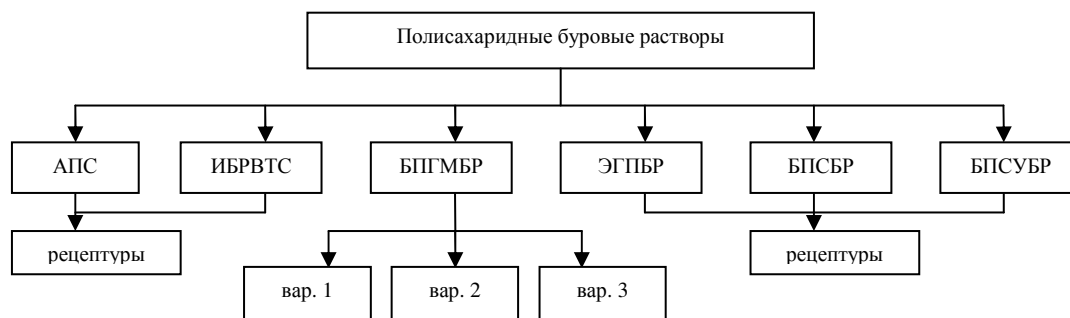


Рис. 2 – Типы полисахаридных буровых растворов с вариантами рецептур

При параллельном доступе к базам данных весь комплекс процессоров разбивается на группы по количеству рассматриваемых наборов экспериментальных данных, и решение для них прямой и обратной задач осуществляется параллельно, за счет чего достигается ускорение вычислительного процесса без конфликтов при доступе к базе данных.

2.2 Выявление внутреннего параллелизма задачи

В реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами, катализируемого Cp_2ZrCl_2 , из обобщенного механизма на основании экспериментальных, а затем и расчетных данных были выделены отдельные стадии для АОС – HAIBu_i (диизобутилалюминийгидрид, сокращенно ДИБАГ), ClAlBu_i (диизобутилалюминийхлорид – ДИБАХ), AlBu_i (триизобутилалюминий – ТИБА) и олефинов. Так была предложена схема №1 (табл. 1) [3]. В дальнейшем на основании квантово-химических расчетов была уточнена каждая из отдельных стадий [5]. То есть, были выявлены новые промежуточные вещества и добавлены новые элементарные стадии. Был сделан вывод о том, что в реакции димер X_1 может образовывать две молекулы мономера X_2 и наоборот. Поэтому для каждого АОС и олефина появилась первая стадия $X_1 \leftrightarrow 2X_2$ (схема №2).

Таблица 1 – Детализация схем превращений реакции гидроалюминирования олефинов

Схема №1	Схема №2	Обозначения
I ДИБАГ $X_1 + 2X_5 \rightarrow 2X_8$	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$	$X_1 = [\text{Cp}_2\text{ZrH}_2 \cdot \text{ClAlBu}_2]_2$, $X_2 = [\text{Cp}_2\text{ZrH}_2 \cdot \text{ClAlBu}_2]$, $X_3 = \text{CH}_2\text{CHR}$, $X_4 = \text{Cp}_2\text{ZrCl}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{R})$, $X_5 = \text{HAIBu}_2$, $X_6 = \text{Bu}_2\text{Al}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{R})$, $X_7 = \text{Cp}_2\text{ZrHCl}$, $X_8 = [\text{Cp}_2\text{ZrH}_2 \cdot \text{HAIBu}_2 \cdot \text{ClAlBu}_2]$,
II ТИБА $X_1 + 2X_{14} \rightarrow 2X_8 + 2X_{13}$	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$ $X_{12} \rightarrow X_2 + X_{13}$ $X_2 + X_{14} \rightarrow X_5 + X_{12}$	$X_9 = \text{ClAlBu}_2$, $X_{10} = [\text{Cp}_2\text{ZrHCl} \cdot \text{ClAlBu}_2]$, $X_{11} = \text{Cl}_2\text{AlBu}$, $X_{12} = [\text{Cp}_2\text{ZrHBu} \cdot \text{ClAlBu}_2]$, $X_{13} = \text{C}_4\text{H}_8$, $X_{14} = \text{AlBu}_3$,
III ДИБАХ $X_2 + 2X_9 \rightarrow X_8 + X_{11} + X_{13}$	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$ $X_{12} \rightarrow X_2 + X_{13}$ $X_2 + X_9 \rightarrow X_5 + X_{10}$ $X_9 + X_{10} \rightarrow X_{11} + X_{12}$	$X_{15} = \text{Cp}_2\text{ZrCl}_2$, $X_{16} = [\text{Cp}_2\text{ZrH}_2 \cdot \text{HAIBu}_2 \cdot (\text{ClAlBu}_2)_2]$, $X_{17} = [\text{Cp}_2\text{ZrH}_2 \cdot \text{HAIBu}_2 \cdot \text{ClAlBu}_2]$, $X_{18} = \text{Cp}_2\text{ZrClBu}$, $X_{19} = \text{ClBuAl}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{R})$, $\text{Bu} = \text{C}_4\text{H}_9$, $\text{Cp} = \text{C}_5\text{H}_5$.
IV ОЛЕФИНЫ $X_2 + 2X_3 \rightarrow X_4 + X_6$	$X_1 \leftrightarrow 2X_2$ $X_2 + X_5 \leftrightarrow X_8$ $X_2 + X_3 \rightarrow X_4 + X_5$ $X_2 + X_3 \rightarrow X_6 + X_7$ $X_5 + X_7 \rightarrow X_2$	

Таким образом, рассматриваемый процесс обладает внутренним параллелизмом, который заключается в том, что общая схема реакции включает протекающие параллельно стадии, при-

чем некоторые из них повторяются для реакций I-IV (см. табл. 1). При организации вычислительного процесса решение обратной задачи осуществляется независимо для параллельно протекающих стадий, что позволяет существенно сократить время расчета.

Для проектирования и управления свойствами буровых растворов внутренний параллелизм задачи состоит в построении математической модели независимо для разных технологических параметров (рис. 3), поскольку на основании корреляционного анализа те из анализируемых параметров, которые обладают высокой степенью корреляции по отношению к другим, можно исключить из рассмотрения как не содержащие дополнительной информации об объекте исследования [6].

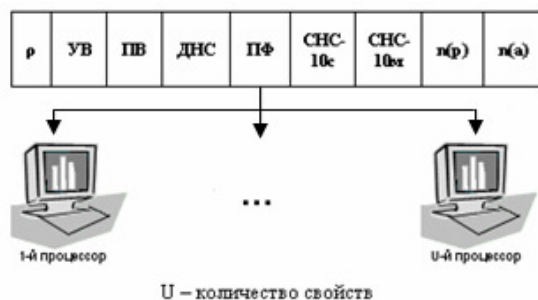


Рис. 3 – Разделение технологических параметров по процессорам многопроцессорной ВС

При этом, если количество процессоров меньше, чем число оптимизируемых свойств, то производится равномерное распределение технологических параметров по числу процессоров с учетом вычислительной трудоемкости обработки различных параметров. В противном случае, каждый задействованный в построении модели процессор рассчитывает коэффициенты заданного уравнения регрессии для отведенного ему свойства.

2.3 Распараллеливание численного метода решения обратной задачи

Решение обратных задач, связанных с поиском минимума некоторого критерия отклонения расчета от лабораторного эксперимента, сводится к циклическому решению множества прямых задач. Для решения обратной задачи поиска кинетических параметров реакции гидроалюминирования олефинов были рассмотрены различные методы минимизации функционала невязки: покоординатный и параболический спуск, параллельные методы на основе декомпозиции расчетной области по числу процессоров многопроцессорной ВС [7, 8]. Наиболее эффективным для решения обратной задачи оказался параллельный вариант генетического алгоритма, который предполагает априорное знание области изменения кинетических параметров [9]. Данный алгоритм включает следующие стадии (рис. 4):

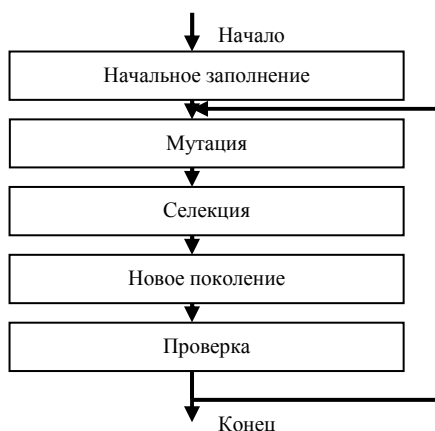


Рис. 4 – Генетический алгоритм

1. Начальное заполнение (псевдослучайное распределение в пространстве параметров большого числа точек).
2. Мутация (несколько шагов покоординатного спуска из каждой точки).

3. Селекция (сопоставление значений функционала отклонения расчета от эксперимента в найденных с отбрасыванием $\frac{3}{4}$ бóльших).

4. Новое поколение (расстановка новых точек по нормальному распределению вокруг оставшихся точек с наименьшим значением функционала).

5. Проверка (вновь заданные точки должны попадать в пространство параметров).

Разработанный алгоритм предполагает параллельное решение обратной задачи путем распределения точек, из которых затем осуществляется покоординатный спуск, по процессорам многопроцессорной ВС. Распределенные случайным образом в пространстве параметров точки, координатами которых являются значения кинетических констант, равномерно распределяются по процессорам, каждый из которых осуществляет несколько шагов покоординатного спуска из всех доставшихся ему точек. Далее производится сравнение значений критерия отклонения расчета от эксперимента в полученных точках с выбором $\frac{1}{4}$ лучших и запоминанием минимального значения критерия с соответствующим набором кинетических констант. Остальные точки заменяются распределенными вокруг оставшихся точек по нормальному распределению, после чего вся процедура повторяется до тех пор, пока происходит уменьшение значения функционала невязки.

Для решения обратной задачи оптимизации состава полисахаридных буровых растворов используется принцип геометрического параллелизма, который заключается в декомпозиции расчетной области по числу процессоров многопроцессорной ВС. При этом в каждой подобласти факторного пространства отведенным для этого процессором многопроцессорной ВС производится поиск оптимального значения выбранного в качестве критерия функционала (в рассматриваемом случае – функции показателей нелинейности в колонне и затрубном пространстве) методом перебора точек подобласти, расположенных в узлах равномерной сетки. Благодаря использованию значительного вычислительного ресурса становится возможным сделать шаг сетки достаточно малым, и, соответственно, с требуемой точностью решить поставленную задачу без риска остановиться на локальном минимуме оптимизируемого функционала.

2.4 Расчет ускорения и эффективности параллельных программ

Тестирование разработанных программных продуктов (Gidroal для определения кинетических параметров реакции гидроалюминирования олефинов и Optim для оптимизации состава ИБРВТС) произведено на суперкомпьютере МВС-100К Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. Для количества процессоров 1-30 было измерено время выполнения программ (рис.5).

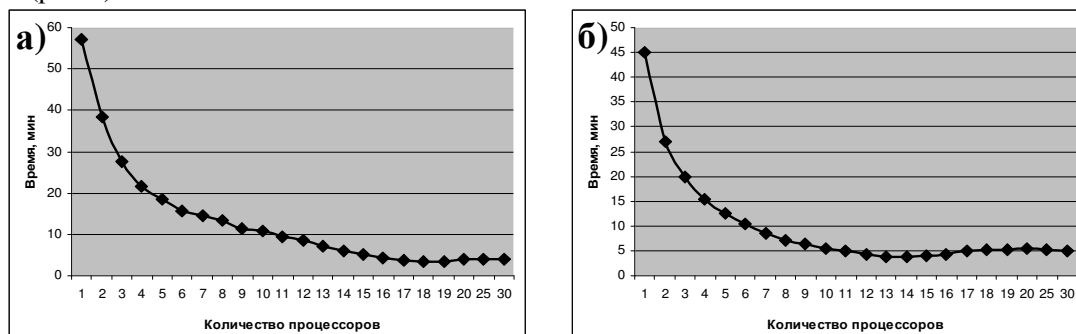


Рис. 5 – Зависимость времени выполнения программ Gidroal (а) и Optim (б) от количества процессоров МВС-100К

По формулам (1), (2) рассчитано получаемое ускорение и эффективность выполнения программ (рис.6, 7).

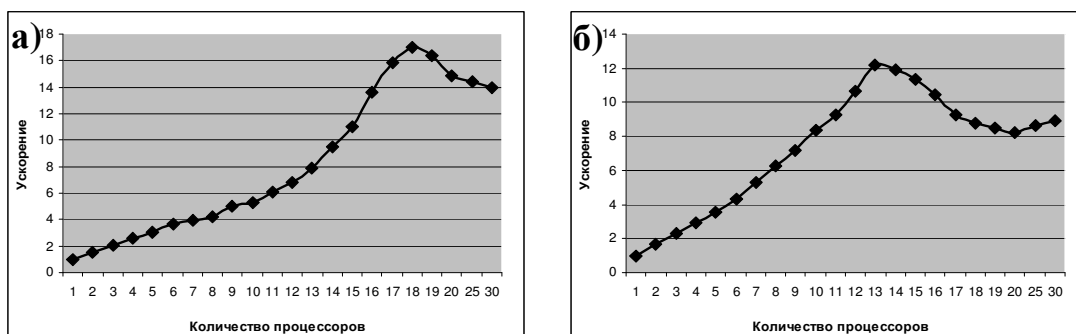


Рис. 6 – Зависимость ускорения программ Gidroal (а) и Optim (б) от количества процессоров МВС-100К

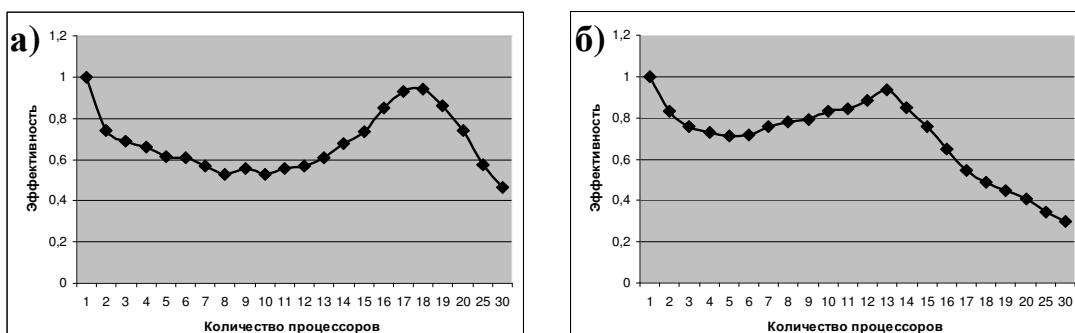


Рис. 7 – Зависимость эффективности выполнения программ Gidroal (а) и Optim (б) от количества процессоров МВС-100К

Анализ полученных зависимостей показывает, что для расчета кинетических параметров реакции ДИБАГ наиболее эффективным является использование 16-20 процессоров многопроцессорной ВС. Для построения математической модели технологических параметров и оптимизации состава ИБРВТС наиболее эффективным является использование 12-15 процессоров многопроцессорной ВС.

3. Вопросы исследования механизмов сложных химических реакций

Построение и анализ кинетической модели является одним из основных этапов идентификации механизма сложной химической реакции и сводится к целенаправленному кинетическому эксперименту и его математической обработке, состоящей в анализе информативности эксперимента и определении кинетических констант, описывающих доступные измерения.

Механизмы сложных реакций металлокомплексного катализа на сегодняшний день изучены явно недостаточно. Реально делаются только первые шаги в этом направлении. Так, в Институте нефтехимии и катализа РАН поставлена задача исследования механизмов сложных реакций цикло-, гидро- и карбометаллирования олефинов [3]. Актуальными становятся задачи построения кинетических моделей этих реакций с целью идентификации гипотезы о механизме их протекания.

При исследовании кинетических моделей ставятся и решаются прямая и обратная кинетические задачи.

Каждая из реакций I-IV (см. табл. 1) описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i - x_i \cdot F_z}{z}, \quad i = 1, \dots, M; \quad F_i = \sum_{j=1}^N S_{ij} \cdot W_j; \quad (3)$$

$$\frac{dz}{dt} = F_z = \sum_{i=1}^M F_i,$$

с начальными условиями:

$$t = 0 \Rightarrow x_i = x_i^0, z = 1, \quad (4)$$

где x_i – мольные доли веществ, участвующих в реакции; z – число молей реакционной смеси; M – количество веществ; N – количество стадий; S_{ij} – стехиометрические коэффициенты; $W_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^M x_i^{\mu_i}$ – скорость j -ой стадии, $1/c$; μ – порядок реакции; k_i – константы скорости реакции, $л/(моль \cdot c)$ или c^{-1} в зависимости от уравнения скорости; t – время.

Прямая кинетическая задача, т.е. задача расчета состава многокомпонентной реагирующей смеси по модели (3)-(4) с заданными параметрами, математически формулируется как решение этой системы дифференциальных уравнений при фиксированных k .

Обратная кинетическая задача – это задача восстановления на основе имеющегося экспериментального материала вида модели и ее параметров. Подлежащие определению константы скорости реакции выражаются уравнениями Аррениуса [10]:

$$k_i = k_i^0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (5)$$

где k_i – константа скорости i -ой стадии; k_i^0 – предэкспоненциальный множитель, размерность которого совпадает с размерностью k_i ; E_a – энергия активации, ккал/моль; R – универсальная газовая постоянная, ккал/(моль·К); T – температура, К.

Задача отыскания констант сводится к минимизации некоторого функционала отклонения экспериментальных данных от расчетных значений [10]. В работе рассматривается следующий критерий:

$$F = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^M |x_{ij}^p - x_{ij}^3| \rightarrow \min, \quad (6)$$

где x_{ij}^p – расчетные значения; x_{ij}^3 – экспериментальные данные; n – количество точек эксперимента.

Энергия активации E_a химической реакции рассчитывается из уравнения Аррениуса (5), если известны значения констант скоростей при разных температурах.

4. Проблематика проектирования буровых растворов и оперативного управления их технологическими параметрами

Понятие «буровые растворы» охватывает широкий круг жидких, суспензионных и аэрированных сред, применяемых для промывки скважин в процессе бурения. Одной из задач, стоящих перед инженером по буровым растворам, является выявление связей между контролируемые на поверхности параметрами и поведением раствора в скважине. Основными свойствами буровых растворов, влияющими на их фактическое поведение, являются плотность, реологические свойства (условная и пластическая вязкость, динамическое и статическое напряжение сдвига, коэффициенты нелинейности), фильтрационные свойства и водородный показатель.

Регулирование свойств буровых растворов производится путем их химической обработки, включающей в себя комплекс физико-химических воздействий, обеспечивающих заданные характеристики раствора [11]. В настоящее время получение и поддержание проектных технологических параметров буровых растворов носит, как правило, эмпирический характер. Это вызвано тем, что характерной особенностью процесса проектирования промывочных жидкостей является необходимость варьирования достаточно большого числа входных факторов, при этом степень влияния многих из них на показатели свойств раствора нередко зависят от величины и уровня остальных факторов. Кроме того, свойства бурового раствора претерпевают значительные изменения в процессе эксплуатации за счет попадания в него многообразных примесей и различных физико-химических превращений. Учесть все эти факторы при проектировании раствора не представляется возможным.

Эффективное решение данной проблемы состоит в решении обратной задачи – определения состава раствора по его технологическим параметрам, которое возможно только на основе адекватной математической модели свойств бурового раствора. Т.о., математическая реализация поставленной задачи включает два этапа:

1) оптимизация состава раствора при его проектировании путем построения на основе экспериментальной базы математической модели зависимости технологических параметров раствора от его состава;

2) оперативное управление свойствами раствора в процессе строительства скважины, когда первоначальный состав раствора уже претерпел изменения. Компьютерное моделирование, в отличие от существующего эмпирического способа, позволяет, во-первых, учитывать эффекты взаимодействия между компонентами раствора, и, во-вторых, определять точное количество реагентов, необходимое для поинтервальной химической обработки раствора в процессе бурения. При этом наличие компьютерной модели избавляет исследователя от необходимости проведения большого числа лабораторных экспериментов и формализует процесс проектирования буровых растворов, уменьшая воздействие на него человеческого фактора.

Поскольку исследование процесса ведется при неполном знании механизма явлений, целевую функцию приходится представлять в виде уравнения регрессии. Регрессионный анализ сочетается с идеей планирования эксперимента, которая заключается в том, что на каждом этапе исследования нужно выбрать оптимальное расположение точек в факторном пространстве так, чтобы получить некоторое представление о поверхности целевой функции [6]. При небольшом числе варьируемых факторов наиболее простым и в то же время эффективным методом является полный факторный эксперимент, позволяющий строить как линейные модели, так и модели, учитывающие взаимодействие факторов:

$$Y_i = b_{00\dots 0} + b_{10\dots 0}X_1 + \dots + b_{00\dots 1}X_k + b_{11\dots 0}X_1X_2 + \dots + b_{00\dots 11}X_{k-1}X_k, \quad (7)$$

где Y_i , $i=1, \dots, m$ – регрессионная функция для i -го технологического параметра, m – число исследуемых параметров, $b_{j_1j_2\dots j_k}$, $j_l=0, 1$, $l=1, \dots, k$ – коэффициенты модели, X_j , $j=1, \dots, k$ – безразмерное значение j -го фактора. Коэффициенты уравнения регрессии (7) находятся на основании экспериментальных данных.

Для оптимизации состава бурового раствора при заданном интервале свойств необходимо решить обратную задачу – по модели (7) определить оптимальное содержание компонентов раствора (такое, чтобы технологические параметры раствора попадали в заданный интервал, а коэффициент нелинейности был минимален). Задача оперативного управления технологическими параметрами бурового раствора формулируется так: необходимо по наборам фактических и требуемых значений технологических параметров определить состав химической обработки для приведения текущего состояния циркуляционной системы к желаемому, т.е. какие компоненты и в каких количествах необходимо ввести в раствор для улучшения требуемых параметров.

5. Используемые методы и численная реализация

5.1 Структура баз данных

При создании баз данных рассматриваемых объектов необходимо учитывать специфику обращения с данными экспериментаторов, исследующих объект. В большинстве организаций (в частности, в ООО «Башнефть-Геопроект») принято хранить данные в формате XLS, т.к. это относительно доступный и простой редактор, позволяющий производить простейшие операции с данными и визуализировать их. Для хранения экспериментальных данных кинетических экспериментов в лабораториях ИНК РАН используется формат DAT как воспринимаемый всеми ОС и позволяющий более грамотно считывать данные.

Для рассматриваемых задач наиболее приемлемой считается реляционная организация баз данных, при которой данные представляются в виде таблиц [12]. Организация баз данных и систем управления этими базами для рассматриваемых задач подробно описана в [13].

5.2 Методы решения прямой и обратной кинетических задач

Прямая кинетическая задача решается методом Кутты-Мерсона [14]. Алгоритм решения системы $\dot{z} = f(z)$ данным методом требует пятикратного вычисления правых частей $f(z)$:

$$\begin{aligned}
F_1 &= f(z_k) \cdot h; \\
F_2 &= f(z_k + F_1/3) \cdot h; \\
F_3 &= f(z_k + (F_1 + F_2)/6) \cdot h; \\
F_4 &= f(z_k + (F_1 + 3F_2)/8) \cdot h; \\
z_{k+1} &= z_k + (F_1 - 3F_3 + 4F_4)/2; \\
F_5 &= f(z_{k+1}) \cdot h; \\
z_{k+1}^* &= z_k + (F_1 + 4F_4 + F_5)/6,
\end{aligned} \tag{8}$$

где $h = \tau_{k+1} - \tau_k$ – шаг интегрирования, z_k – значения переменных в начале интервала интегрирования $[\tau_k, \tau_{k+1}]$. В конце интервала интегрирования τ_{k+1} получается два решения: z_{k+1} – методом Рунге-Кутты с точностью $O(h^4)$ и z_{k+1}^* – методом Кутта-Мерсона с точностью $O(h^5)$.

Обратная кинетическая задача решается с использованием параллельного варианта генетического алгоритма, подробно рассмотренного в п.2.3.

5.3 Методы решения прямой и обратной задач управления свойствами буровых растворов

Наиболее распространенным методом нахождения коэффициентов уравнения регрессии (7) является метод наименьших квадратов, который для ортонормированной системы вырождается в систему уравнений:

$$b_{i_1 i_2 i_3} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{1u}^{i_1} X_{2u}^{i_2} \dots X_{ku}^{i_k} y_u, \quad i_1 + i_2 + \dots + i_k \leq 2. \tag{9}$$

Обратная задача решается методом перебора с малым шагом точек факторного пространства с минимизацией функций показателей нелинейности $n(p)$ и $n(a)$:

$$Y_i^{\min} \leq Y_i(x^*) \leq Y_i^{\max}, \quad i=1, \dots, n; \tag{10}$$

$$Y^* = Y_{j_1}(x^*) \cdot Y_{j_2}(x^*) \rightarrow \min. \tag{11}$$

Здесь Y_i^{\min} и Y_i^{\max} – нижняя и верхняя проектные границы для i -го свойства; j_1 и j_2 – индексы коэффициентов нелинейности.

Задача решается путем двукратного определения по модели технологических параметров раствора (7) его состава – при фактических и требуемых значениях свойств. После этого производится пересчет процентного содержания компонентов раствора на объем циркуляции:

$$\begin{aligned}
\Delta c_i \geq 0 &\Rightarrow \Delta V_i = \Delta c_i \cdot 10V; \quad \Delta V_j = 0, \quad j \neq i; \\
\Delta c_i < 0 &\Rightarrow \Delta V_i = 0; \quad \Delta V_j = |\Delta c_i| \cdot 10V \cdot (c_j^0 / c_i^0), \quad j \neq i,
\end{aligned} \tag{12}$$

где Δc_i – добавочная концентрация i -го компонента раствора, ΔV_i – объем добавки i -го компонента раствора, V – объем раствора, c_i^0 – начальная концентрация i -го компонента раствора.

5.4 Численная реализация используемых методов

С использованием программного комплекса Gidroal найдены кинетические константы и энергии активации для всех параллельно протекающих стадий реакции гидроалюминирования олефинов, на основании чего была построена кинетическая модель реакции (рис.10).

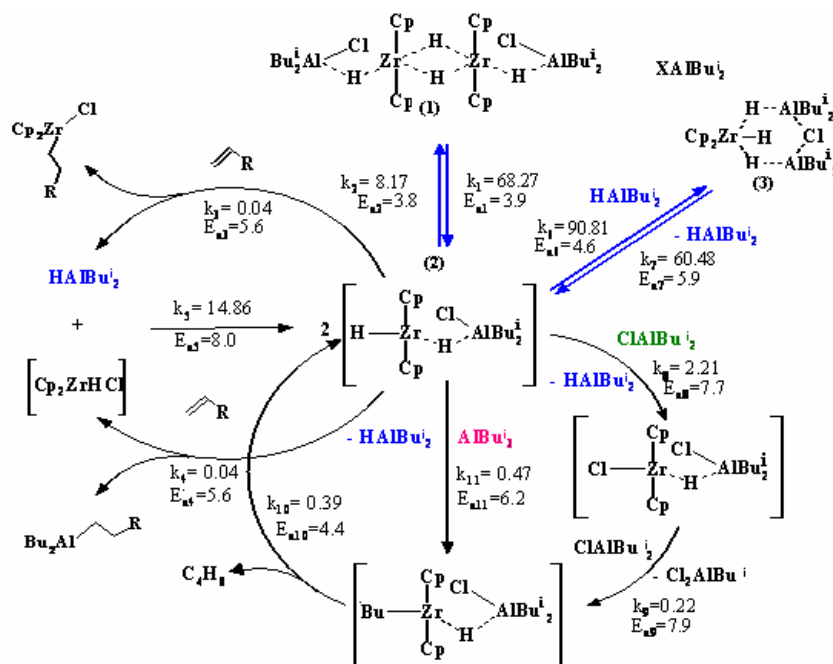


Рис. 10 – Кинетическая модель частных реакций каталитического гидроалюминирования олефинов ($[k_i] = \text{мин}^{-1}$, $[E_{ai}] = \text{ккал/моль}$, $t = 7^\circ\text{C}$)

На основании полученных результатов (табл. 2) было сделано несколько важных выводов касательно механизма реакции гидроалюминирования олефинов.

Таблица 2 – Значения кинетических параметров стадий реакции гидроалюминирования олефинов

T, °C	$k_1, \text{мин}^{-1}$	$k_2, \text{мин}^{-1}$	$k_5, \text{мин}^{-1}$	$k_6, \text{мин}^{-1}$	$k_7, \text{мин}^{-1}$	$k_8, \text{мин}^{-1}$	$k_9, \text{мин}^{-1}$	$k_{10}, \text{мин}^{-1}$	$k_{11}, \text{мин}^{-1}$
-60	0.95	7.44	0.15	6.60	2.11	0.03	0.003	0.03	0.01
-40	2.05	16.49	0.80	16.90	7.04	0.14	0.08	0.08	0.05
-20	3.94	32.18	3.16	37.31	19.39	0.51	0.05	0.17	0.14
7	8.17	68.27	14.86	90.81	60.48	2.21	0.22	0.39	0.47
30	13.75	116.56	44.72	170.97	135.85	6.27	0.65	0.71	1.09
50	20.35	174.44	102.59	275.47	250.03	13.75	1.47	1.12	2.05
$E_{ai}, \text{ккал/моль}$	3.8	3.9	8.0	4.6	5.9	7.7	7.9	4.4	6.2

Так, сравнивая скорости прямой и обратной реакции образования мономерного комплекса **2** из **1**, можно сделать вывод о том, что в интервале температур $-60 \div 50^\circ\text{C}$ равновесие сильно смещено в сторону димерной формы. Самой быстрой оказалась стадия перехода комплекса **2** в неактивный тригидридный комплекс **3**, а равновесие $2 \leftrightarrow 3$ смещено в сторону тригидридного комплекса, особенно при низких температурах. В реакции гидрометаллирования олефинов комплексом **1** лимитирующими оказались равновероятные стадии взаимодействия мономерного комплекса **2** с алкенами. По-видимому, высокая скорость гидрометаллирования обеспечивается существованием обратной реакции перехода комплекса **3** в активный по отношению к олефинам мономер.

С использованием программного комплекса Optim построена математическая модель технологических параметров и найден состав ингибирующего бурового раствора с высокой транспортирующей способностью (ИБРВТС). Варьируемыми факторами здесь являются концентрации трех компонентов раствора: крахмала, биополимера и карбонатного утяжелителя (табл. 3). Исследовалось также влияние на технологические параметры раствора температуры (при 23, 45, 65 °C) и содержания глинистой фазы (5, 10, 15 масс. об. %).

Таблица 3 – Результаты экспериментов по базовым точкам

№ оп.	Био-пол.	Крах-мал	КУ	ρ , г/см ³	УВ, с	ПФ, см ³	h_k , мм	ПВ, мПа·с	τ , дПа	СНС 10 сек	СНС 10 мин	КП, 1/с	n(p)	n(a)
1	0,3	0,8	5	1,04	27	7,3	0,5	10	38,3	19,2	26,3	383	0,618	0,45
2	0,3	0,8	10	1,062	28,2	6	0,5	11	45,5	21,6	28,7	414	0,601	0,352
3	0,3	1,6	5	1,042	31,2	6,8	0,5	11,5	55,1	19,2	24	479	0,567	0,434
4	0,3	1,6	10	1,067	37,4	6	0,5	12,5	62,3	19,2	28,7	498	0,558	0,435
5	0,5	0,8	5	1,036	42,5	6,7	0,5	11,2	99,6	46,5	67	890	0,42	0,271
6	0,5	0,8	10	1,062	45	5,7	0,5	13,3	101,5	46,5	68,5	764	0,456	0,278
7	0,5	1,6	5	1,037	45,3	5,4	0,5	13	98,2	37,3	55,1	755	0,459	0,339
8	0,5	1,6	10	1,065	51	5,5	0,5	14,5	95,8	38,3	57,5	661	0,491	0,339

Для определяемых свойств раствора составлены уравнения регрессии (7) со следующими значениями коэффициентов (табл. 4):

Таблица 4 – Коэффициенты уравнений регрессии

Св-во	A ₀	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅	A ₆	A ₇	A ₈	A ₉
УВ	30,14	-14,42	-48,70	0,55	-0,84	9,34	165,83	9,35	-0,06	-0,53
ПВ	-8,24	4,89	58,98	0,29	0,05	1,54	-46,41	-6,43	-0,06	-0,06
ДНС	-101,02	-8,51	500,12	3,44	0,65	18,32	-83,31	-60,96	-0,95	8,54
ПФ	20,51	-6,83	-37,61	-0,12	0,55	0,90	29,38	7,21	0,02	-0,33
СНС-10сек	-55,34	0,45	312,25	-0,15	0,09	3,46	-157,13	-45,38	0,55	0,76
СНС-10мин	-118,6	15,98	618,15	0,46	-0,28	1,16	-434,21	-76,49	0,12	1,68
n(p)	0,963	0,031	-1,557	-0,004	-0,013	-0,017	0,793	0,091	-0,002	0,021
n(a)	0,505	0,055	-0,520	-0,004	-0,014	0,015	-0,005	-0,059	0,000	0,029

Произведена проверка адекватности построенных моделей и использованием критерия Фишера [15], показавшая, что модель достаточно хорошо описывает эксперимент.

Также был проведен эксперимент по управлению свойствами раствора со следующим набором исходных и требуемых значений технологических параметров (табл. 5, 6):

Таблица 5 – Исходные значения параметров

Параметр	ρ	УВ	Ф3	Ф100	Ф300	Ф600	ПФ	СНС-10с	СНС-10м	T	МВТ	%ТФ
Значение	1093	59	11,7	30,5	47	63	9,2	58,4	81,4	25	30	15

Таблица 6 – Требуемые интервалы значений параметров

Параметр	ρ	УВ	ДНС	ПФ	СНС-10сек	СНС-10мин
min	1120	40	90	4	30	45
max	1140	50	130	6	50	70

Получены рекомендации по добавлению следующих реагентов для удовлетворения свойств раствора проектным значениям (табл. 7):

Таблица 7 – Количество реагентов для обработки раствора

Компонент, ед. изм.	Вода, м ³	Фито-РК, кг	Ксантан, кг	КУ, т	ЛПЭ-32, кг	Полигли-коль, кг	КСл, т	Лубриойл, кг	ГКЖ, кг
Кол-во	30	896	0	8	30	890	1,5	648	30

Полученные рекомендации позволили значительно сократить время на химическую обработку раствора в условиях буровой, а также сэкономить дорогостоящие химические реагенты, что привело к повышению технико-экономических показателей бурения.

Заключение

Программный продукт Gidroal внедрен в практику работы экспериментальных лабораторий ИНК РАН и применяется для построения кинетических моделей промышленно значимых

реакций. Программный продукт Optim внедрен в практику работы лабораторий ООО «Башнефть-Геопроект», буровых предприятий ООО «Башнефть-Геострой» и применяется для проектирования буровых растворов в лаборатории и оперативного управления их технологическими параметрами в условиях буровой на месторождениях ОАО «АНК «Башнефть».

Литература

1. Ефимов С.С. Параллельное программирование. – Омск, 2009. – 400 с.
2. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. – М., 2007. – 423 с.
3. Parfenova L.V., Balaev A.V., Gubaidullin I.M., Pechatkina S.V., Abzalilova, L.R., Spivak S.I., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. Kinetic Model of Olefins Hydroalumination by HAlBu_2^i and AlBu_3^i in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst // *Int. J. Chem. Kinet.*, 2007. V.39, No 6. – P.333-339.
4. Клеттер В.Ю. Эффективность применения ингибирующих буровых растворов при строительстве скважин на месторождениях ОАО «АНК «Башнефть» // *Мат. I научно-технической конференции молодых ученых-специалистов ООО «Башнефть-Геопроект».* – Уфа, 2009. – Т.1. – С. 147-150.
5. Parfenova L.V., Vil'danova R.F., Pechatkina S.V., Khalilov L.M., Dzhemilev U.M. New effective reagent [$\text{Cp}_2\text{ZrH}_2\text{ClAlEt}_2$] for alkene hydrometallation // *Journal of Organometallic Chemistry.* – 2007. – V 692. – № 16. – P. 3424-3429.
6. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
7. Линд Ю.Б. Применение суперкомпьютера для решения обратных задач химической кинетики // «Вычислительные технологии». – Т.11., спец. выпуск. – 2006. – С. 76-80.
8. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М. Применение параллельных вычислительных технологий при решении задач математического моделирования химических процессов // *Материалы Междунар. научно-технической конференции «Многопроцессорные вычислительные и управляющие системы».* – Геленджик, 2007. – С. 264-271.
9. Вороновский Г.К., Махотило К.В., Петрашев С.Н., Сергеев С.А. Генетические алгоритмы, искусственные нейронные сети и проблемы виртуальной реальности. – Х.: Основа, 1997. – 112 с.
10. Полак Л.С., Голденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М.: Наука, 1984. – 280 с.
11. Кистер Э.Г. Химическая обработка буровых растворов. – М.: Недра, 1972. – 392 с.
12. Роб П., Коронел К. Система баз данных: проектирование, реализация и управление. – 5-е изд., перераб. и доп.: Пер. с англ. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 1040 с.
13. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М., Мулюков Р.А. Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии // *Системы управления и информационные технологии.* – № 2(36), 2009. – С. 44-50.
14. Augustin S.C. Modified Merson's investigation algorithm with saves two evaluation at each step // *Simulation.* - 1974. - V.22. - № 3. – P. 90-92.
15. Линд Ю.Б., Клеттер В.Ю., Ахматдинов Ф.Н., Мулюков Р.А. Оптимизация состава буровых растворов и оперативное управление их свойствами // «Нефтяное хозяйство». – №5, 2009. – С. 90-93.