

Многопараметрический параллельный вычислительный эксперимент при структурной идентификации кинетических моделей обобщенного механизма реакций*

К.Ф. Коледина¹, И.М. Губайдуллин²

Башкирский Государственный Университет¹,
Институт нефтехимии и катализа РАН²

На основании разработанной кинетической модели частных реакций гидроалюминирования олефинов [1] необходимо решить обратную многоинтервальную параметрическую задачу для общей реакции, с использованием параллельных алгоритмов и внутреннего параллелизма самой задачи. При решении обратной задачи необходимо использовать параллельные технологии, ввиду большого объема вычислений. Причем распараллеливание можно вести не только за счет метода решения обратной задачи – генетического алгоритма, но и за счет внутреннего параллелизма самой задачи. Для реакции гидроалюминирования олефинов существует несколько механизмов протекания как общих, так и частных выделенных реакций, кинетические параметры для общих стадий в которых должны описываться одной областью значений. Для каждой реакции обрабатывается несколько экспериментов при различных условиях. Для каждого эксперимента необходимо найти набор кинетических параметров с помощью генетического алгоритма. Таким образом, распараллеливание, основанное на внутреннем параллелизме, состоит из трех уровней:

I. Определение общей области значений кинетических параметров частных и общих реакций гидроалюминирования олефинов, описывающей все экспериментальные данные.

II. Параллельная обработка каждого эксперимента для определения значений кинетических параметров.

III. Распараллеливание генетического алгоритма – обратной задачи для каждого эксперимента.

Для определения интервалов констант скоростей реакций можно использовать алгоритм, основанный на методе ветвей и границ. Апробация алгоритма показала перспективность определения области значений, в которой гарантировано содержится глобальный минимум целевой функции.

Программно реализованы и распараллелены генетический алгоритм решения обратной задачи химической кинетики и алгоритм определения трехмерных областей допустимых значений кинетических параметров химических реакций с заданной точностью. Выбор кинетических параметров происходит согласно значимости их влияния на функционал минимизации расчетных и экспериментальных данных, в соответствии с методом Парето.

Необходимо исследовать полученную модель на выявление ключевых процессов. Для этого необходимо:

- разработать метод моделирования индукционного периода сложных реакций для определения параметрической чувствительности к условиям проведения реакции;

- провести вычислительный эксперимент для определения параметров и предпосылок индукционного периода, увеличения выхода целевого продукта, определения промежуточных соединений, регулирования времени проведения реакции.

Литература

1. 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.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Госконтракт №02.740.11.0631) и РФФИ (гранты №12-07-00324 и №12-07-31029).