

Программная система Complex-Macro для структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций*

И.М. Губайдуллин², А.П. Карпенко¹, Е.Ю. Селиверстов¹, М.В. Тихонова²

МГТУ им. Баумана¹, Институт нефтехимии и катализа РАН²

В Институте нефтехимии и катализа РАН ведутся исследования в области каталитических систем. Возникает задача разработки математических методов, алгоритмов и программного обеспечения для структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций в присутствии катализаторов. Разрабатываемый программный комплекс *Complex-Macro* содержит совокупность систем решения задач моделирования таких процессов.

Подсистема *Direct-Complex-Macro* предназначена для решения прямых кинетических задач в виде системы ОДУ в нормальной форме Коши. В подсистему включен расширяемый набор программных модулей решения СОДУ. Предложена библиотека решения сверхжестких СОДУ с заданной точностью.

Подсистема *Back-Complex-Macro* ориентирована на решение обратной параметрической задачи химической кинетики (параметрической идентификации). Предполагается заданным набор экспериментальных значений концентраций веществ в различные моменты времени и набор функционалов, определяющих меры близости решения экспериментальным данным. Задача рассматривается как многокритериальная многопараметрическая задача оптимизации. В основе решателей лежит набор модулей построения скалярных сверток (скалярная аддитивная свертка, свертка Гермейера, свертка Джоффриона), модулей решения задач глобальной условной оптимизации (метод роя частиц, генетические алгоритмы, индексный метод), модулей решения задачи Парето-аппроксимации (NGSA-II, SPEA2).

Подсистема включает два вида решателей – *PFS (Pareto Front Solver)*, предназначенный для построения аппроксимации фронта Парето и решения данной задачи, и *MCS (MultiCriteria Solver)*, построенный на основе модулей сверток и модулей решения задачи оптимизации. Данная подсистема считается наиболее вычислительно сложной и требует применения параллельных вычислений, планируется применения различных классов вычислительных систем. В рамках работы разработан модуль подсистемы *MCS* решения задачи глобальной оптимизации поведенческим методом роя частиц с использованием параллельных графических процессорных систем (технология Nvidia CUDA).

Подсистема *Complex-Macro* осуществляет структурную идентификацию или решение обратной структурной задачи химической кинетики. Ставится задача отыскания вектор-функции, доставляющей минимум векторному критерию оптимальности. В подсистему включены два решателя: *NWOS (Network Operator Solver)*, реализующий метод сетевого оператора Дивеева А.И. на основе выбранного пользователем множества унарных и бинарных операторов, и *AS (Approximation Solver)*, обеспечивающий решение задачи аппроксимации вектор-функции функцией из выбранного класса. Планируется применение параллельных вычислительных систем для реализации метода сетевого оператора Дивеева А.И.

С использованием программного комплекса решены две вычислительно сложные задачи: разработка кинетических моделей реакций гидро-, карбо- и циклоалюминирования олефинов; задача выбора сокатализаторов для прогнозирования выхода целевых продуктов.

Литература

1. Царева З.М., Орлова Е.И.. Теоретические основы химической технологии. – К: Вища шк. Головное издательство, 1986. С. 35.

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 12-07-00324.