

Распараллеливание поиска областей неопределенности для кинетических констант реакций цикло- и карбоалюминирования олефинов

Э.Р. Ахматсафина, И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак

В работе рассматривается задача поиска областей неопределенности для кинетических констант реакций циклоалюминирования олефинов $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ в присутствии катализаторов Cr_2ZrCl_2 с использованием параллельных вычислительных систем.

Целью исследования является поиск интервалов неопределенности констант скоростей для реакций цикло- и карбоалюминирования олефинов, описание подхода к решению интервальной постановки обратной задачи химической кинетики.

Определим интервал неопределенности как отрезок, вариация константы внутри которого сохраняет совместность системы неравенств [1].

$$\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J |x_{ij}^a - x_{ij}^p| \leq \epsilon_i \quad (1)$$

Для определения интервала по K -й константе необходимо решить две задачи математического программирования: найти $\min K$ и $\max K$ при выполнении ограничений (1).

Объектом исследования является кинетическая модель реакции цикло- и карбоалюминирования олефинов триэтилалюминием в присутствии Cr_2ZrCl_2 [2].

Использование многопроцессорных вычислительных систем обусловлено тем, что требуется огромный объем вычислений: прямую задачу придется решать $C_n^m \cdot q$ раз, где n – общее количество констант, m – количество констант, по набору которых получаем срез области, q – количество узлов сетки, которой покрывается n -мерный куб. Разработан параллельный алгоритм, который реализован на языке FORTRAN с использованием библиотеки MPI.

Вся информация, относящая к эксперименту, сведена в базу данных обратных задач химической кинетики [3]. Каждому процессору предоставляется определенный набор входных данных, характеризующих эксперимент. Всего можно построить 45 фазовых плоскостей по всем константам (рассматриваем пары констант). Программа расчета областей для констант реализована следующим образом: рассматриваем пары констант: предполагаемую область поиска покрываем равномерной прямоугольной сеткой, в узлах которой считаем прямую задачу и проверяем совместность системы (1). В итоге получаем таблицу значений для области по двум константам. На рисунке 1 приведена проекция области неопределенности на фазовую плоскость двух из них: k_1 и k_2

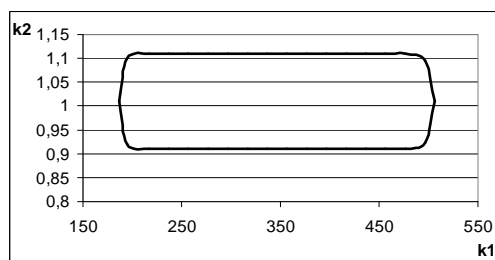


Рис. 1. Фазовая плоскость по константам k_1 и k_2

Литература

1. Канторович Л.В. О некоторых новых подходах к вычислительным методам и обработке наблюдений. // Сиб. мат. журн., 1962, Т. 3. № 5. с. 701-709.
2. Балаев А.В., Парфенова Л.В., Русаков С.В., Губайдуллин И.М., Спивак С.И., Халилов Л.М., Джемилев У.М.// Доклады Академии Наук, 2001, том 381, №3. с. 364-367.
3. Губайдуллин И.М., Линд Ю.Б., Ахматсафина Э.Р., Спивак С.И. Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2008): Труды международной научной конференции (Санкт-Петербург, 28 января – 1 февраля 2008 г.). – Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2008, с. 370-375.