

Распараллеливание механизмов сложных химических реакций при решении обратных задач химической кинетики*

С.И. Спивак^{1,2}, А.С. Исмагилова¹

Башкирский государственный университет¹, Институт нефтехимии и катализа РАН²

Основным моментом в обратной задаче является представление кинетической модели в виде, содержащем независимые комбинации констант. Если число таких комбинаций меньше общего числа констант, то в технологических целях удобно иметь дело с моделями, содержащими меньшее число параметров. Понятно, что это крайне трудоемкий процесс [1].

Для устранения данной проблемы построен алгоритм анализа информативности кинетических измерений с учетом их погрешности, который позволяет распараллелить исходную задачу анализа выделения базиса нелинейных параметрических функций (НПФ) кинетических констант на более простые подзадачи с использованием маршрутов.

Важной особенностью маршрута является тот факт, что часть компонент в маршруте обычно равна нулю. Это значит, маршрут выделяет из всей совокупности стадий некоторую подсистему, в которую входит только часть стадий исходного механизма. Основная идея предлагаемого метода состоит в том, что вместо анализа информативности для всей сложной схемы реакций рассматриваются те схемы, которые отвечают за протекание реакции по каждому из независимых маршрутов.

Справедлива теорема [2]:

Теорема 1. Маршрут реакции есть циклический подграф исходного графа. Объединение таких подграфов образует полный граф, т.е. граф исходной системы реакций. Число независимых маршрутов равно числу независимых циклов графа Вольперта.

Основным результатом является следующая теорема:

Теорема 2. Совокупность стадий химической реакции можно разбить на подсистемы, в которые входят части стадий исходного механизма. Число таких подсистем равно числу независимых маршрутов. Объединение базисов НПФ кинетических параметров, допускающих однозначное оценивание, совпадает с базисом НПФ исходной сложной системы реакций.

Таким образом, алгоритм анализа информативности можно разложить на следующие этапы:

1. Выделение числа и вида независимых маршрутов реакции.
2. Декомпозиция исходной системы на подсистемы меньшей размерности в числе, равном числу независимых маршрутов, соответствующим базисным итоговым уравнениям.
3. Анализ информативности каждой из подсистем.
4. Объединение полученных базисов нелинейных параметрических функций в единый базис, соответствующий сложному механизму протекания реакции.

Литература

1. Спивак С.И., Исмагилова А.С. Информативность кинетических измерений при определении параметров математических моделей химической кинетики // Журнал СВМО. 2009. Т.11, №2. С.131-136.
2. Спивак С.И., Исмагилова А.С., Хамитова И.А. Теоретико-графовый метод определения маршрутов сложных химических реакций // ДАН. 2010. Т. 434, № 4. С.499-501.

* Работа выполнена в рамках исследований по Российскому фонду фундаментальных исследований, проект № 11-01-97020.