

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И БУРОВОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Ю.Б. Линд

1. Введение

Многие физико-химические задачи, решаемые с использованием вычислительной техники, предполагают значительный объем вычислений при достаточно низкой точности. Эту проблему позволяет решить применение высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем (суперкомпьютеров). В данной работе рассмотрена методология использования технологии параллельных вычислений для решения сложных производственных задач в применении к задачам построения кинетической схемы реакции гидроалюминирования олефинов и оперативного управления технологическими параметрами буровых растворов. При этом рассматривается применение параллельных систем различной архитектуры: для построения кинетической модели реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами рассматривается применение суперкомпьютера МВС-100К Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, а для проектирования и управления свойствами буровых растворов – распределенной вычислительной среды на основе локальной сети ООО «Башнефть-Геопроект». Рассматриваемые 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 [1].

2. Вопросы исследования механизмов сложных химических реакций

Каталитическое гидроалюминирование олефинов широко применяется в металлоорганическом синтезе как эффективный способ синтеза алюминийорганических соединений (АОС) заданной структуры [2].

Реакция гидроалюминирования – сложный многостадийный процесс. Она включает последовательные и параллельные стадии. Исследования таких сложных механизмов в ИНК РАН ведутся методом динамической ЯМР-спектроскопии, квантовохимическими расчетами и методами кинетического анализа с применением современных информационно-аналитических систем (ИАС) [3]. В таблице 1 представлены схемы протекания процесса, которые были предложены в ходе исследования каталитической реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами.

Из обобщенного механизма гидроалюминирования олефинов алкилаланами катализируемого Cr_2ZrCl_2 на основании экспериментальных, а затем и расчетных данных были выделены отдельные стадии для АОС - HAlBu_2 (диизобутилалюминийгидрид, ДИБАГ), ClAlBu_2 (диизобутилалю-минийхлорид, ДИБАХ), AlBu_3 (триизобутилалюминий, ТИБА) и олефинов. Так была предложена схема №1.

Однако в дальнейшем, на основании квантовохимических расчетов были уточнены каждая из отдельных стадий. То есть были выявлены промежуточные вещества и добавлены новые элементарные стадии. Например, была добавлена обратимая стадия перехода димера в мономер, которая ранее не учитывалась. Поэтому для каждого АОС и олефина появилась первая стадия $X_1 - 2X_2$. Это отражено в схеме №2.

Дальнейшие экспериментальные исследования структуры промежуточных комплексов, их реакционной способности и дополнительные квантовохимические расчеты позволили уточнить схему №2: разбить некоторые стадии, добавить новые, выявить новые промежуточные вещества. Так, например, было обнаружено, что не только мономер вступает в реакцию с АОС, но и димер может параллельно реагировать с алкилаланом - появилась новая стадия $X_1+X_5 > X_8+X_2$. Химиками-экспериментаторами была предложена схема №3.

Далее, после анализа элементарных стадий схемы №3 были предложены два детальных механизма реакции гидроалюминирования олефинов алкилаланами – схема №4 и №5.

Таблица 1. Последовательное определение схем превращений реакций

СХЕМА № 1	СХЕМА № 2	СХЕМА № 3	СХЕМА № 4	СХЕМА № 5
I ДИБАГ $X_1+2X_5 > 2X_8$	X_1-2X_2 $X_2+X_5-X_8$	X_1-2X_2 $X_1+X_5 > X_2+X_8$ $X_2+X_5 > X_8$		
II ТИБА $X_1+2X_{14} > 2X_8+$ $+2X_{13}$	X_1-2X_2 $X_2+X_5-X_8$ $X_{12} > X_2+X_{13}$ $X_2+X_{14} > X_5+X_{12}$	X_1-2X_2 $X_1+X_{14} > X_2+X_8+$ $+X_{13}$ $X_2+X_{14} > X_8+X_{13}$	$X_1+X_5 > X_2+X_8$ $X_1+X_9 > X_8+X_{10}$ $2X_2-X_1$ $2X_2-X_1$ $X_2+X_3 > X_4+X_5$	$X_1+X_5 > X_2+X_8$ $X_1+X_9 > X_8+X_{10}$ $2X_2-X_1$ $X_2+X_3 > X_4+X_5$ $X_2+X_5-X_8$ $X_3+X_8 > X_4+2X_5$
III ДИБАХ			$X_2+X_5-X_8$	$X_4+X_5 > X_6+X_7$

$X2+2X9>X8+X11+$ $+X13$	$X1-2X2$ $X2+X5-X8$ $X12>X2+X13$ $X2+X9>X5+X10$ $X9+X10>X11+X12$	$X1-2X2$ $X1+X5>X2+X8$ $X2+X5>X8$ $X1+X9>X8+X10$ $X2+X9>X5+X10$ $X9+X10>X2+X11+$ $+X13$	$X3+X8>X4+2X5$ $X4+X5>X6+X7$ $X5+X7>X2$ $X5+X10-X2+X9$ $X5+X15-X10$ $X7+X9>X10$	$X5+X7>X2$ $X5+X10-X2+X9$ $X5+X15-X10$ $X6+X11-X9+X19$ $X7+X9>X10$ $X9+X15-2X11+X18$ $X9+X18>X10+X13$
IV ОЛЕФИНЫ $X2+2X3>X4+X6$	$X1-2X2$ $X2+X5-X8$ $X2+X3>X4+X5$ $X2+X3>X6+X7$ $X5+X7>X2$	$X1-2X2$ $X1+X5>X2+X8$ $X2+X5>X8$ $X2+X3>X4+X5$ $X4+X5>X6+X7$ $X3+X8>X4+2X5$ $X5+X7>X2$		$X9+X10>X2+X11+X13$

Т.о., рассматриваемый процесс обладает внутренним параллелизмом: во-первых, общая схема реакции включает протекающие параллельно стадии. Во-вторых, задача определения кинетических параметров заданной реакции сводится к циклическому решению множества прямых и обратных задач. Соответственно возникает необходимость использования технологий распараллеливания вычислительных процессов решения прямой и обратной кинетических задач.

Предлагаемая модель распараллеливания вычислительного процесса рассматривает три подхода:

- использование внутреннего параллелизма задачи, т.е. решение кинетических задач отдельно для частных стадий реакции;
- распараллеливание по экспериментальным данным, полученным при разных температурах или по разным экспериментам;
- использование принципа геометрического параллелизма, т.е. декомпозиции расчетной области при решении обратной задачи.

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

Регулирование свойств буровых растворов при строительстве скважины производится путем их химической обработки, включающей в себя комплекс физико-химических воздействий, обеспечивающих заданные характеристики раствора [4, 5]. 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. При этом немаловажное значение приобретает скорость расчетов, которую можно значительно увеличить благодаря использованию для расчета параллельных вычислений.

Распределенная вычислительная среда формируется на основе компьютеров ООО «Башнефть-Геопроект», объединенных в локальную сеть. Суммарная производительность компьютеров сети весьма высока и, в отличие от традиционных суперкомпьютеров, среда сформирована на основе уже действующих компьютеров сети, что делает такой подход экономически привлекательным [6].

4. Используемые методы и численная реализация

4.1. Методы решения прямой и обратной кинетических задач

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

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

с начальными условиями: при $t = 0$, $x_i = x_{i0}$, $z = 1$, где x_i – мольные доли веществ, участвующих в реакции; z – число молей реакционной смеси; M – количество веществ (в нашем случае $M=10$); N – количество стадий (в нашем случае $N=4$ или 5); S_{ij} – стехиометрические коэффициенты; W_j – скорость j -ой стадии (1/с); k_i – константы скорости реакции; t – время.

Прямая кинетическая задача, т.е. задача расчета состава многокомпонентной реагирующей смеси по модели (1) 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:

$$k_i = k_i^0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2)$$

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. Нами был выбран следующий критерий:

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

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 (2), если известны значения констант скоростей при разных температурах.

Прямая кинетическая задача решается методом Кутты-Мерсона [7]. Алгоритм решения системы данным методом требует пятикратного вычисления правых частей $f(z)$:

$$F_1 = f(z_1) \cdot h; \\ F_2 = f(z_1 + F_1/3) \cdot h; \\ F_3 = f(z_1 + (F_1 + F_2)/6) \cdot h; \\ F_4 = f(z_1 + (F_1 + 3F_2)/8) \cdot h; \\ z_{n+1} = z_1 + (F_1 + 3F_2 + 4F_3)/2; \\ F_5 = f(z_{n+1}) \cdot h; \\ z_{n+1}^* = z_1 + (F_1 + 4F_2 + F_5)/6, \quad (4)$$

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 Кутты-Мерсона с точностью $O(h^5)$.

Обратная кинетическая задача решается методом случайного поиска с последующим параболическим спуском в выбранном направлении. Суть этого метода состоит в последовательных интерполяциях кривой рассматриваемого сечения поверхности функции параболой с отбрасыванием точек с наибольшим значением функции. Для нахождения энергии активации используется метод наименьших квадратов.

Распараллеливание вычислительного процесса достигается как использованием внутреннего параллелизма задачи (см. таблицу 1), так и распараллеливанием по экспериментальной базе. Идея параллельной обработки экспериментальной базы заключается в следующем. Для реакции (1) расчет производится при четырех вариантах олефинов с пятью вариантами температур. Каждую из полученных 20 задач обрабатывает

отдельный процесс. На основе найденных констант еще один процесс определяет энергию активации E_i , а также дисперсии адекватности, т.е. отклонения от полученной прямой, для каждой константы. Если дисперсия оказывается больше некоторого наперед заданного числа δ , то соответствующая константа пересчитывается. В реакциях (II)-(IV) аналогично рассматриваются разные АОС при разных температурах. Расчет экспериментов разными процессами позволяет добиться значительного уменьшения времени счета.

4.2. Методы решения прямой и обратной задач управления свойствами буровых растворов

При неполном знании механизма исследуемого явления для описания объекта исследования удобно пользоваться представлением о кибернетической системе («черном ящике»). При этом численные характеристики целей исследования y_1, \dots, y_m называют параметрами оптимизации, а способов воздействия на поведение «черного ящика» x_1, \dots, x_k – факторами. Здесь k – количество факторов, m – количество параметров оптимизации. Функция зависимости параметров оптимизации от входных факторов называется целевой. Целевая функция представляется 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 [8]. 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:

$$Y_i = b_0 + b_1 X_1 + \dots + b_k X_k + b_{12} X_1 X_2 + \dots + b_{k-1k} X_{k-1} X_k, \quad (5)$$

где Y_i , $i=1, \dots, m$ – регрессионная функция для i -го технологического параметра, m – число исследуемых параметров, b_j , $j=0, \dots, k$ и $b_{j_1 j_2}$, $j_1, j_2=1, \dots, k$, $j_2 \neq j_1$ – коэффициенты модели, X_j , $j=1, \dots, k$ – безразмерное значение j -го фактора. Коэффициенты уравнения регрессии (5) находятся на основании экспериментальных данных по следующей формуле:

$$b_{i_1 i_2} = \frac{1}{N} \sum_{u=1}^N X_{1u}^{i_1} X_{2u}^{i_2} X_{3u}^{i_3} y_u, \quad i_1 < i_2 < i_3. \quad (6)$$

Для оптимизации состава бурового раствора при заданном интервале свойств необходимо решить обратную задачу – по модели (5) определить оптимальное содержание компонентов раствора (такое, чтобы технологические параметры раствора попадали в заданный интервал, а коэффициент нелинейности был минимален). Т.о., обратная задача решается методом перебора с малым шагом точек факторного пространства с минимизацией функций показателей нелинейности $n(p)$ и $n(a)$:

$$Y_{i \min} \leq Y_i(x^*) \leq Y_{i \max}, \quad i=1, \dots, n; \quad (7)$$

$$Y^* = Y_{j_1}(x^*) \cdot Y_{j_2}(x^*) \rightarrow \min \quad (8)$$

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 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 раствора и в каких количествах необходимо ввести в раствор для улучшения требуемых параметров.

Задача решается путем двукратного определения по модели технологических параметров раствора (5-6) его состава – при фактических значениях свойств и требуемых. После этого производится пересчет процентного содержания компонентов раствора на его объем:

$$\begin{aligned} \Delta c_i \geq 0 &\Rightarrow \Delta V_i = \Delta c_i \cdot 10V; \quad \Delta V_j = 0, \quad j \neq i; \\ \Delta c_i < 0 &\Rightarrow \Delta V_i = 0; \quad \Delta V_j = |\Delta c_i| \cdot 10V \cdot (c_j^0 / c_i^0), \quad j \neq i \end{aligned} \quad (9)$$

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

Параллельная обработка данных на стадии оптимизации состава раствора для его проектирования предполагает использование принципа геометрического параллелизма, который заключается в декомпозиции расчетной области на подобласти соответственно числу процессоров. Процессор-мастер (узел распределенной среды, выполняющий функции сервера) сообщает остальным узлам коэффициенты математической модели, после чего происходит разделение факторного пространства на подобласти, в каждой из которых действует один узел распределенной среды, перебирая с малым шагом точки «своей» подобласти с минимизацией функции показателей $n(p)$ и $n(a)$ (8) и проверкой выполнения ограничений на остальные функции (7). Найденные узлами значения отправляются на узел-мастер, который выбирает оптимальное. Поскольку основная часть времени

работы узлов тратится на решение задачи (7)-(8), удается достичь значительного ускорения счета по сравнению с последовательной программой.

4.3. Численная реализация используемых методов

С использованием последовательных и параллельных алгоритмов, изложенных в п. 5.2, был составлен программный комплекс Gidroal на языке C++ с применением библиотеки функций передачи сообщений MPI, и найдены кинетические константы и энергии активации для всех параллельно протекающих стадий реакции гидроалюминирования олефинов, на основании чего была построена кинетическая модель реакции.

Значения кинетических параметров, рассчитанные по схеме №2 (таб. 2), были затем уточнены на основании детализированной схемы №3 (таб. 3).

Таблица 2. Значения кинетических параметров стадий реакции по схеме №2

T, °C	k11, 1/мин	k2, 1/мин	k5, 1/мин	k6, 1/мин	k7, 1/мин	k8, 1/мин	k9, 1/мин	k10, 1/мин	k11, 1/мин	
-60	1.97	2.63	0.15	4.08	0.22	0.03	0.003	0.03	0.03	0.01
-40	3.96	4.97	0.80	15.77	1.72	0.14	0.08	0.08	0.08	0.05
-20	7.11	8.52	3.16	49.26	9.85	0.51	0.05	0.17	0.17	0.14
7	13.75	15.60	14.86	177.04	69.75	2.21	0.22	0.39	0.39	0.47
30	21.96	23.98	44.72	439.82	280.76	6.27	0.65	0.71	0.71	1.09
50	31.27	33.17	102.59	873.4	802.18	13.75	1.47	1.12	1.12	2.05
Ea, ккал/моль		3.4	3.2	8.0	6.7	10.2	7.7	7.9	4.4	6.2

Таблица 3. Значения кинетических параметров стадий реакции по детализированной схеме №3

T, °C	k1, 1/мин	k2, 1/мин	k3, 1/мин	k4, 1/мин	k5, 1/мин	k6, 1, 1/мин	k7, 1/мин	k8, 1/мин	k9, 1/мин	k10, 1/мин
-65	0.2	0.6966	0.1692	3.48	0.034	0.0002	0.0006	0.014	0.311	0.239
-60	0.28	0.9973	0.2267	4.53	0.043	0.0003	0.001	0.022	0.585	0.437
-55	0.33	1.5256	0.3269	7.63	0.053	0.0004	0.002	0.035	1.067	0.776
-40	0.664	4.291	0.777	20.73	0.096	0.001	0.01	0.112	5.561	3.763
-30	0.993	8.034	1.32	38.76	0.1359	0.003	0.025	0.23	14.93	9.671
-20	1.438	14.32	2.14	68.99	0.1878	0.006	0.062	0.43	37.06	23.07
-10	2.024	24.412	3.35	117.52	0.2532	0.01	0.14	0.79	85.87	51.53
Ea, ккал/моль		4.53	7.07	5.94	7.05	3.96	8.47	10.96	7.93	11.12

На основании полученных результатов было сделано несколько важных выводов касательно механизма реакции гидроалюминирования олефинов. Сравнивая скорости прямой и обратной реакции образования мономерного комплекса 2 из 1, можно сделать вывод о том, что в интервале температур -60?500C равновесие смещено в сторону димерной формы, однако, с увеличением температуры доля 2 в смеси возрастает. Самой быстрой оказалась стадия перехода комплекса 2 в неактивный тригидридный комплекс 3, а равновесие 2 - 3 сильно смещено в сторону тригидридного комплекса, особенно при низких температурах. В случае ClAlBui2 и AlBui3 комплекс 2 может регенерироваться через ряд последовательных медленных стадий (константы k8-k11), поэтому экспериментально наблюдается некоторое уменьшение скорости перехода комплекса 1 в 3.

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 последовательных и параллельных алгоритмов, изложенных в п. 5.2, был составлен программный комплекс Optim на языке C++ с применением библиотеки функций передачи сообщений MPI. Разработанный программный комплекс был протестирован для ингибирующего бурового раствора с высокой транспортирующей способностью (ИБРВТС). Варьируемыми факторами здесь являются концентрации трех компонентов раствора: крахмала, биополимера и карбонатного утяжелителя (таблица 3). Исследовалось также влияние на технологические параметры раствора температуры (при 23, 45, 65 оС) и содержания глинистой фазы (5, 10, 15 масс. об. %).

Таблица 3. Результаты экспериментов по базовым точкам

№	Био-пол.	Крах-мал	КУ г/см3	?, с	УВ, см3	ПФ, мм	hk, мПа? с	ПВ, дПа	?, оС	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 в виде полиномов 2-го порядка (2) следующего вида:

$$\begin{aligned}
 \rho &= 1,088 + 0,002X + 0,014X + 0,03X - 0,001X^2 + 0,001X^2 + 0,001X^2 + 0,004X^2 X; \\
 \rho_{600} &= 45,66 + 4,59X + 10,71X + 2,13X + 8,12X - 6,07X + 0,02X^2 + 0,33X^2 + 1,91X^2 - 0,67X^2 X - 0,68X^2 X + 1,97X^2 X - \\
 &\quad - 0,12X^2 X + 0,36X^2 X - 0,58X^2 X - 1,25X^2 X; \\
 \rho_{300} &= 32,35 + 3,01X + 8,8X + 1,27X + 6,14X - 4,02X + 0,02X^2 + 0,18X^2 + 1,27X^2 - 0,39X^2 X - 0,45X^2 X + 1,63X^2 X - \\
 &\quad - 0,22X^2 X + 0,36X^2 X - 0,33X^2 X - 0,73X^2 X; \\
 \rho_{100} &= 20,58 + 1,38X + 6,36X + 0,65X + 4,16X - 1,93X - 0,02X^2 + 0,09X^2 + 0,93X^2 - 0,06X^2 X - 0,33X^2 X + 1,23X^2 X + \\
 &\quad + 0,07X^2 X + 0,37X^2 X - 0,15X^2 X - 0,24X^2 X; \\
 \rho_3 &= 6,7 - 0,18X + 2,75X + 0,1X + 1,53X - 0,47X - 0,25X^2 - 0,1X^2 + 0,3X^2 + 0,05X^2 X - 0,2X^2 X + 0,48X^2 X - 0,03X^2 X + \\
 &\quad + 0,06X^2 X - 0,07X^2 X - 0,09X^2 X; \\
 УВ &= 41,31 + 4,26X + 11,92X + 0,87X + 6,99X - 6,77X + 1,55X^2 + 0,69X^2 + 2,93X^2 - 1,26X^2 X - 1,02X^2 X + 4,28X^2 X - \\
 &\quad - 2,58X^2 X + 0,65X^2 X - 1,23X^2 X - 1,98X^2 X; \\
 СНС-10сек &= 36,44 - 0,51X + 13,42X + 0,61X + 5,3X - 1,81X - 1,28X^2 - 0,61X^2 + 1,24X^2 - 0,12X^2 X - X^2 X + 1,34X^2 X + \\
 &\quad + 0,01X^2 X + 0,33X^2 X - 0,24X^2 X - 0,05X^2 X; \\
 СНС-10мин &= 51,55 - 1,2X + 18,16X + 1,6X + 6,9X - 3,21X - 2,14X^2 - 1,35X^2 + 1,07X^2 - 0,3X^2 X - 1,71X^2 X + 0,35X^2 X + \\
 &\quad + 0,22X^2 X + 0,32X^2 X - 0,57X^2 X + 0,31X^2 X; \\
 ПФ &= 9,89 - 1,04X - 0,33X - 0,38X + 1,61X + 2,93X + 0,31X^2 - 0,16X^2 - 0,41X^2 + 0,18X^2 - 0,12X^2 X - 0,32X^2 X - \\
 &\quad - 0,03X^2 X + 0,06X^2 X - 0,14X^2 X + 0,73X^2 X; \\
 МФТ &= 14,62 - 0,01X - 0,81X + 0,79X + 14,62X - 0,26X^2 + 0,01X^2 - 0,01X^2 - 0,79X^2 - 0,81X^2 X + 0,79X^2 X; \\
 рН &= 8,01 - 0,03X + 0,02X - 0,52X - 0,01X^2 - 0,05X^2 - 0,02X^2 - 0,08X^2 - 0,02X^2 X; \\
 ПВ &= 13,3 + 1,58X + 1,9X + 0,85X + 1,97X - 2,04X - 0,01X^2 + 0,15X^2 + 0,64X^2 - 0,27X^2 - 0,22X^2 X + 0,33X^2 X + 0,09X^2 X - \\
 &\quad - 0,24X^2 X - 0,52X^2 X; \\
 ДНС &= 91,22 + 6,83X + 33,04X + 1,99X + 20X - 9,46X + 0,14X^2 + 0,11X^2 + 3,03X^2 - 0,6X^2 X - 1,1X^2 X + 6,24X^2 X - \\
 &\quad - 1,51X^2 X + 1,75X^2 X - 0,44X^2 X - 0,99X^2 X.
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Произведена проверка адекватности полученных моделей (10) с использованием критерия Фишера (таблица 4), которая показала, что погрешность модели не выходит за рамки погрешности лабораторного эксперимента, т.е. модель является адекватной.

№ опыта	р, г/см3	ф600, град.	ф300, град.	ф100, град.	ф3, град.	УВ, с	СНС-10сек, дПа	СНС-10мин, дПа	ПФ, мл	МВТ, г/л	рН											
1	1,045	1,046	29,00	27,48	19,00	18,48	13,25	11,85	3,25	3,12	28,00	26,07	20,40	19,14	30,30	26,50	7,15	7,19	0,00	0,00	8,37	8,37
2	1,045	1,046	20,75	20,59	14,00	13,81	8,50	8,75	2,75	2,45	22,30	26,65	15,60	16,10	20,35	20,73	12,00	11,59	0,00	0,00	8,37	8,37
3	1,095	1,097	36,50	37,72	25,50	25,68	15,25	15,58	5,00	4,66	29,85	28,27	25,15	23,82	36,00	36,17	10,60	10,31	27,75	28,24	7,43	7,41
4	1,095	1,097	25,50	25,82	18,00	18,08	11,75	11,51	3,75	3,63	23,45	20,92	21,60	21,00	33,55	31,66	17,83	17,64	27,75	28,24	7,43	7,41
5	1,074	1,072	30,75	32,85	20,00	21,52	11,75	13,18	3,50	3,96	27,35	29,62	21,60	23,45	33,50	34,36	6,10	7,18	0,00	0,52	8,68	8,73
6	1,074	1,072	22,25	23,64	14,75	15,50	8,75	9,47	2,50	2,99	21,45	25,27	19,20	19,43	22,75	26,29	10,40	10,99	0,00	0,52	8,68	8,73
7	1,125	1,124	45,75	44,56	30,50	30,18	18,50	18,41	5,50	5,76	34,50	34,44	28,20	29,45	43,15	45,33	10,55	10,54	32,95	32,99	7,73	7,70
8	1,125	1,124	32,50	30,34	22,75	21,24	14,75	13,75	4,75	4,43	26,50	22,16	26,30	25,65	39,95	38,52	18,09	17,29	32,95	32,99	7,73	7,70
9	1,040	1,045	43,20	49,50	32,00	36,00	20,70	23,50	8,00	9,00	42,50	49,70	46,50	47,90	67,00	71,90	6,70	7,30	0,00	0,00	8,70	8,39
10	1,043	1,042	38,75	39,14	28,25	28,56	19,60	19,89	7,50	7,86	36,50	35,69	43,80	44,89	62,25	64,53	11,30	11,12	0,00	1,08	8,55	8,54
11	1,113	1,111	65,25	64,66	48,25	47,87	31,50	31,35	12,10	12,12	64,50	64,79	57,95	57,89	79,00	80,49	8,95	8,67	27,62	27,10	7,55	7,58
12	1,113	1,111	52,10	52,27	39,00	39,39	27,25	27,57	10,60	10,96	44,25	47,11	54,35	55,15	75,45	76,89	14,43	15,88	27,62	27,10	7,55	7,58
13	1,069	1,071	50,65	49,18	36,75	35,33	23,75	22,69	9,15	8,68	49,80	44,92	49,60	48,14	71,35	70,36	6,25	6,32	0,00	0,00	8,62	8,57
14	1,069	1,071	40,40	39,48	29,00	28,43	20,10	19,27	8,15	7,59	32,40	30,23	46,00	44,19	65,40	63,21	11,05	10,01	0,00	0,00	8,62	8,57
15	1,138	1,139	67,50	66,78	49,75	50,56	32,50	32,85	12,35	12,40	60,35	66,88	59,15	59,50	82,60	82,77	8,85	8,39	28,67	28,66	7,52	7,54
16	1,138	1,139	53,10	54,07	40,00	40,73	28,00	28,48	10,85	10,94	45,45	44,27	55,55	55,78	79,00	76,87	14,43	15,01	28,67	28,66	7,52	7,54
17	1,048	1,047	35,25	33,47	24,25	22,34	13,40	12,74	3,15	2,75	31,70	26,75	20,40	19,67	28,75	29,54	6,00	5,27	0,00	0,00	8,43	8,47
18	1,048	1,047	23,75	23,89	15,65	16,07	9,25	9,39	2,00	2,29	21,10	22,28	16,80	16,12	22,80	22,56	9,90	10,40	0,00	0,00	8,43	8,47
19	1,100	1,097	50,50	51,36	33,65	34,63	19,50	20,20	5,00	5,53	37,75	40,71	26,80	29,32	41,95	43,50	6,00	6,72	27,62	28,72	7,41	7,39
20	1,100	1,097	35,85	36,78	24,50	25,44	15,00	15,89	4,25	4,71	25,80	28,31	24,40	25,99	34,75	37,78	14,43	14,79	27,62	28,72	7,41	7,39
21	1,074	1,076	39,90	40,18	25,75	26,10	14,15	14,44	3,25	3,17	35,20	33,08	21,60	21,52	32,30	32,00	5,40	4,60	0,00	1,08	8,70	8,61
22	1,074	1,076	28,75	28,29	18,90	18,48	11,25	10,49	2,75	2,41	26,30	23,68	16,80	16,98	23,95	22,72	9,40	9,14	0,00	1,08	8,70	8,61
23	1,125	1,126	59,50	59,54	40,15	39,86	24,00	23,41	6,50	6,20	44,25	49,66	34,70	32,49	48,60	47,26	6,30	6,30	35,17	33,54	7,39	7,46
24	1,125	1,126	42,65	42,64	29,40	29,32	18,50	18,50	5,25	5,08	34,70	32,33	28,75	28,18	41,40	39,24	13,56	13,78	35,17	33,54	7,39	7,46
25	1,040	1,041	49,75	52,61	36,00	38,08	22,35	23,48	6,90	7,26	45,70	52,33	42,60	43,25	62,30	63,86	5,65	6,19	0,00	0,52	8,66	8,62
26	1,040	1,041	42,65	42,54	31,25	30,93	20,75	20,41	7,00	6,67	41,35	37,53	40,20	39,78	58,70	57,79	10,80	11,19	0,00	0,52	8,66	8,62
27	1,105	1,107	79,60	78,39	57,50	56,93	36,40	35,86	12,15	11,96	84,20	83,43	58,70	58,27	80,95	79,26	6,20	6,35	27,60	26,53	7,53	7,54
28	1,105	1,107	79,60	78,39	57,50	56,93	36,40	35,86	12,15	11,96	84,20	83,43	58,70	58,27	80,95	79,26	6,20	6,35	27,60	26,53	7,53	7,54
29	1,074	1,072	57,25	56,60	40,25	40,02	24,15	23,84	6,75	6,86	48,95	54,58	40,70	41,08	57,50	59,44	5,05	5,01	0,00	0,00	8,35	8,44
30	1,074	1,072	44,50	44,22	31,50	31,52	19,65	20,18	5,60	5,98	34,80	34,86	35,90	36,62	52,70	51,08	9,00	9,42	0,00	0,00	8,35	8,44
31	1,140	1,139	84,25	83,86	60,75	60,33	37,75	37,74	11,85	11,82	101,10	86,31	57,50	57,42	78,55	76,14	5,25	5,42	26,55	28,15	7,36	7,29
32	1,140	1,139	65,00	66,47	47,85	48,92	32,25	33,11	10,15	10,57	51,85	60,65	51,50	53,18	61,80	69,03	12,45	12,76	26,55	28,15	7,36	7,29
F	0,038	0,084	0,090	0,132	0,236	1,341	0,187	0,240	0,331	0,193	0,088											
Ад-ть	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.	Адекв.											
	эксперимент				расчет						При F < 2,2 модель адекватна											

Таблица 4 – Проверка адекватности математической модели

В настоящее время разработка новых составов растворов в лабораториях ООО «Башнефть-Геопроект», а также их сопровождение в процессе бурения осуществляется с использованием разработанного программного комплекса. Получаемые рекомендации позволяют значительно сократить время на химическую обработку раствора в условиях буровой, а также сэкономить дорогостоящие химические реагенты, что приводит к повышению технико-экономических показателей бурения.

5. 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 и оперативного управления их технологическими параметрами в условиях буровой на месторождениях ОАО «АНК «Башнефть». Параллельные варианты программных продуктов тестированы на суперкомпьютере МВС-15000ВМ Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и распределенной вычислительной среде на основе ЭВМ ООО «Башнефть-Геопроект»; применяются для расчетов в случаях, когда ресурсов персональных ЭВМ не хватает для решения поставленных задач или требуется значительное ускорение их решения.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Лупин С.А., Посыпкин М.А. Технологии параллельного программирования. – М.: ИД «Форум» – ИНФРА-М, 2008. – 205 с.
2. 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 HAlBui_2 and AlBui_3 in Presence of Cp_2ZrCl_2 Catalyst // Int. J. Chem. Kinet., 2007. V.39, No 6, p.333-339. Слинко М.Г. Основы и принципы моделирования каталитических процессов.– Новосибирск: ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, 2004.– 488 с.
3. И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики // Системы управления и информационные технологии № 1.1(31). – 2008. – С 150 -153.
4. Грей Дж.Р., Дарли Г.С.Г. Состав и свойства буровых агентов (промывочных жидкостей). – М.: Недра, 1985. – 509 с.
5. Кистер Э.Г. Химическая обработка буровых растворов. – М.: Недра, 1972. – 392 с.

6. Воеводин Вл.В. Решение больших задач в распределенных вычислительных средах // Автоматика и телемеханика, 2006. –? №5, с. 32-45.
7. Полак Л.С., Голденберг М.Я., Левицкий А.А. Вычислительные методы в химической кинетике. – М.: Наука, 1984. – 280 с.
8. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.