

Параллелизм в задаче структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций

И.М. Губайдуллин, ИНК РАН

А.П. Карпенко, МГТУ им. Баумана

Е.Ю. Селиверстов, МГТУ им. Баумана

М.В. Тихонова, БашГУ

Проблема катализа

- Полимеризационные процессы
- Металлокомплексные катализаторы
- Сложность натурального эксперимента
- Управление протеканием реакции:
 - Температура
 - Давление
 - Концентрации
- Некоторые исследуемые процессы – цикло-, карбо-, гидроалюмирование

Программный комплекс

Complex-Macro – программный комплекс структурной и параметрической идентификации кинетических моделей химических реакций.

Цели комплекса:

- Построение кинетических моделей химической реакции в присутствии металлокомплексных катализаторов
- Поиск оптимальных управляющих параметров реакции

Задачи химической кинетики

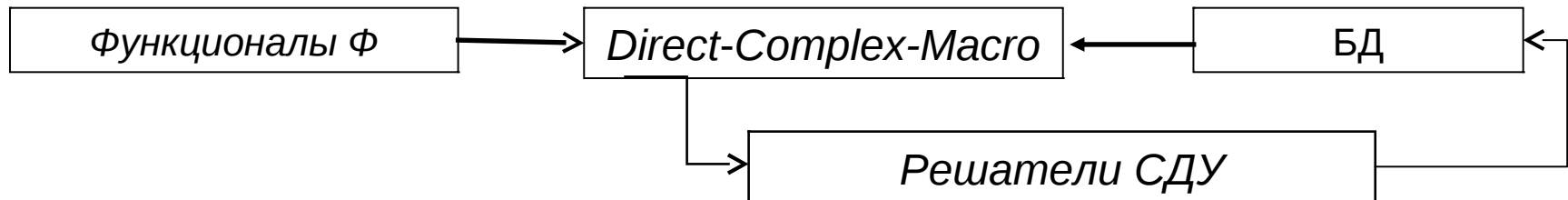
- Комплекс решает три основные задачи:
 - Прямая задача
 - Обратная параметрическая (параметрическая идентификация)
 - Обратная структурная (структурная идентификация)
- Большой объём задач
- Высокая вычислительная сложность

Схема работы подсистем

- Выбор модели из БД
- Выбор используемых функционалов
- Выбор программного решателя
- Решение задачи
- Представление результатов ЛПР
- Сохранение результатов в БД

Прямая задача

Подсистема прямой задачи



Прямая задача

- Математическая модель - система ОДУ в нормальной форме Коши

$$\dot{X}(t) = F(X(t), A), t \in [0; T], X(0) = X^0$$

A – константы скоростей $\dim A = d$

X – вектор концентраций веществ

- Константы скоростей существенно разных порядков
- Жесткая или сверхжесткая система

Прямая задача

■ Программные решатели СОДУ

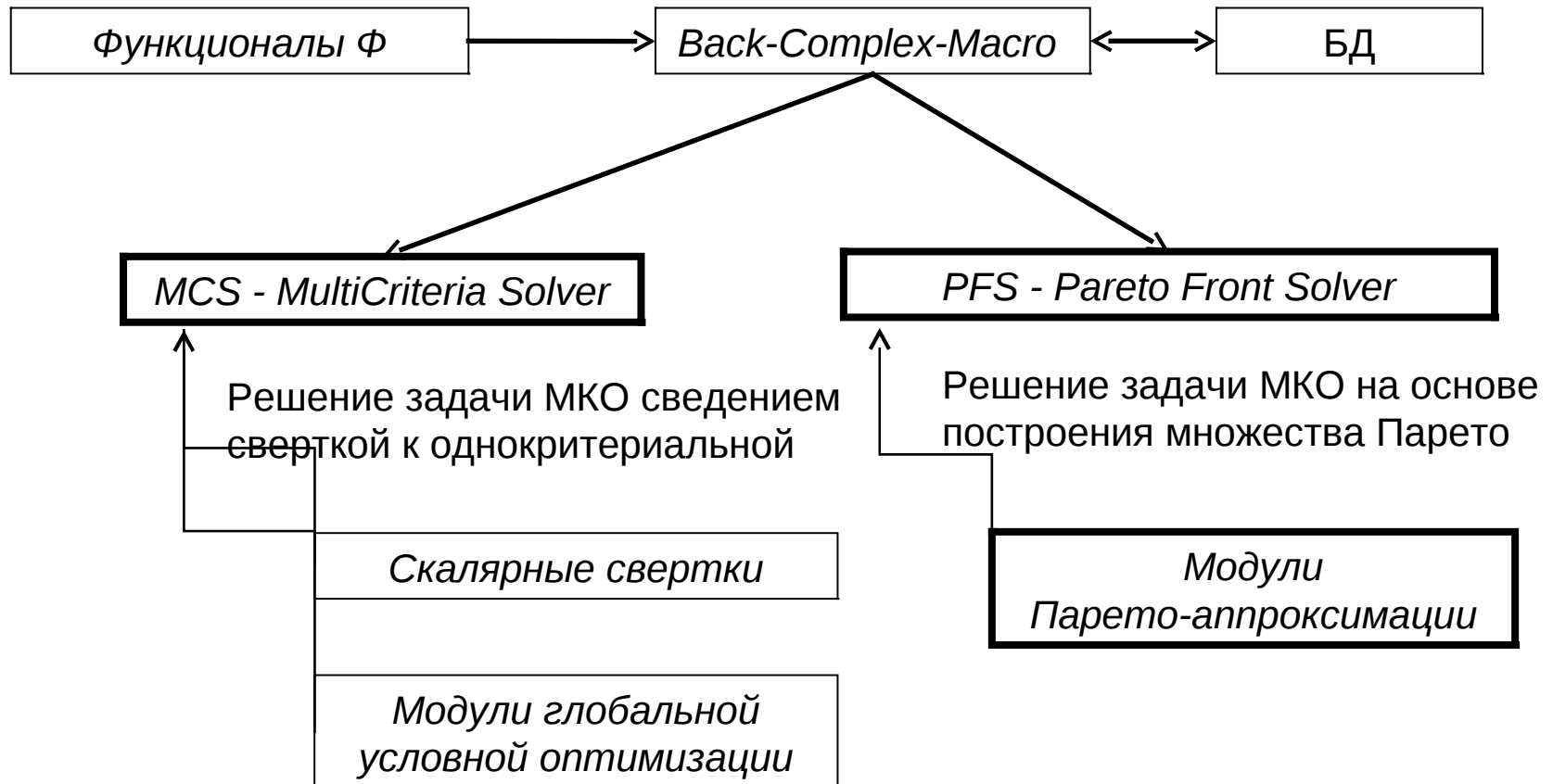
- Рунге-Кутта
- Мишельсена
- SADEL-ПА10
- ...

■ Источники параллелизма

- Явные методы – декомпозиция СДУ по подсистемам
- Неявные методы – блочные, неявные Р.-К.
- Внутренний параллелизм
- ...

Обратная параметрическая задача

Подсистема параметрической идентификации



Обратная параметрическая задача

- Математическая модель – система ОДУ в форме Коши
- Экспериментальные точки (t_i, \tilde{X}_i)
- Многопараметрическая многокритериальная задача условной глобальной оптимизации

$$\min_{A \in \Omega_A} \Phi(X, \tilde{X}, A) = \Phi(X, \tilde{X}, A^*)$$

Обратная параметрическая задача

- Функционалы Φ

- Меры близости экспериментальных и расчетных точек

$$\Phi(X, \tilde{X}, A) = \max_{i \in [1; K]} \|X_i(A) - \tilde{X}_i\|$$

- Регуляризующие функционалы

Подсистема MCS

- Решатели MCS
 - Эволюционные алгоритмы (GA, ES)
 - Популяционные алгоритмы (PSO, IA)
 - ...
- Модели параллелизма – по методам
 - Master-slave, островная, диффузная

Подсистема PFS

- Решатели PFS

- ЛП τ

- NSGA-II

- SPEA2

- AWS

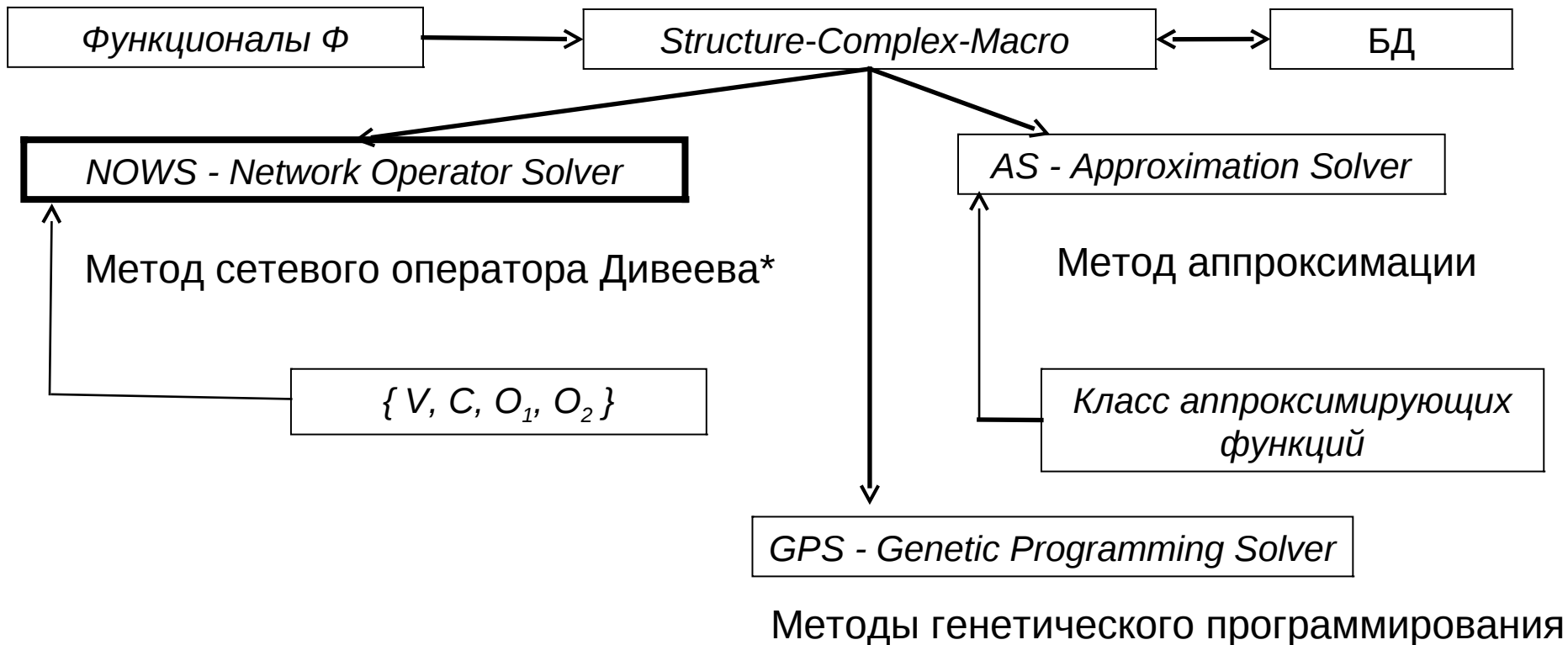
- ...

- Модели параллелизма – по методам

- Master-slave, островная, диффузная

Обратная структурная задача

Схема подсистемы структурной идентификации



* A.I. Diveyev, E.A. Sofronova. Application of network operator method for synthesis of optimal structure and parameters of automatic control system. Proceedings of 17-th IFAC

Обратная структурная задача

- Математическая модель – система ОДУ

$$\dot{X}(t) = F(X(t), A), t \in [0; T], X(0) = X^0$$

- Экспериментальные точки (t_i, \tilde{X}_i)
- Задача структурной оптимизации - поиск оптимальной вектор-функции $F(X, A)$

$$\min_{F \in \tilde{\Sigma}_F, A \in \Omega_A} \Phi(F(X, A), \tilde{X}) = \Phi(\hat{F}^*, \tilde{X})$$

Сетевой оператор

- Сетевой оператор – ориентированный ациклический граф оптимизируемой формулы
- Принцип базисного решения
- Оптимизация на множестве малых вариаций над матрицей сетевого оператора
- Решение – последовательность вариаций от базовой до оптимальной структуры
- Применяемое распараллеливание – мультистарт

Реализации решателей MCS

- Один из решатели типа MCS подсистемы Back-Complex-Macro
 - канонический PSOMCS
 - параллельный GIPSOMCS
- Популяционный метод оптимизации PSO
- Сведение многокритериальной задачи MCS к задаче однокритериальной безусловной оптимизации

Метод PSO

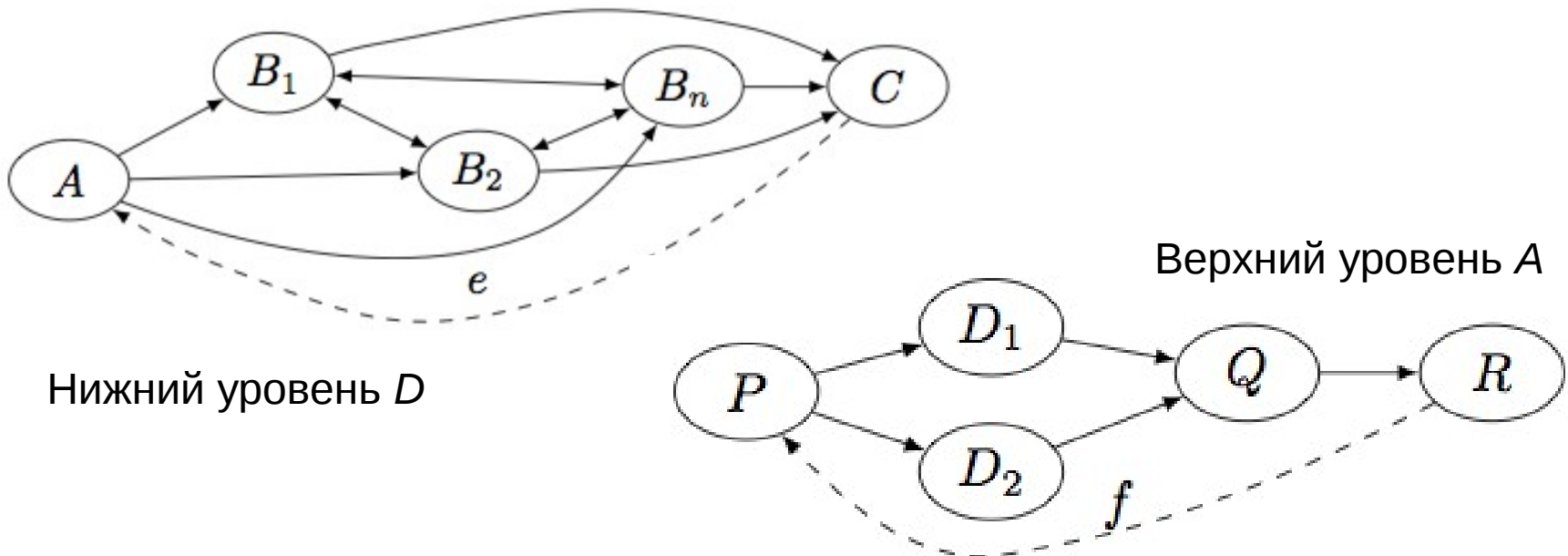
- Популяционный стохастический метод глобальной безусловной оптимизации. Kennedy, 1995
- Частица – вектор координат Y и скорости V в d -мерном пространстве оптимизации
- Рой – множество частиц с заданной топологией связей
- Итерация – определение новых координат и скоростей
- Коммуникация – передача данных между частицами о лучшем результате частицы и всего роя

Решатель GIPSOMCS

- Параллелизм уровня алгоритма
- Островная параллельная модель
- Многоуровневый алгоритм, k суброев по n частиц, d -мерная задача
- Миграции между суброями
- Параллельная система – multi-GPU + host

Решатель GIPSOMCS

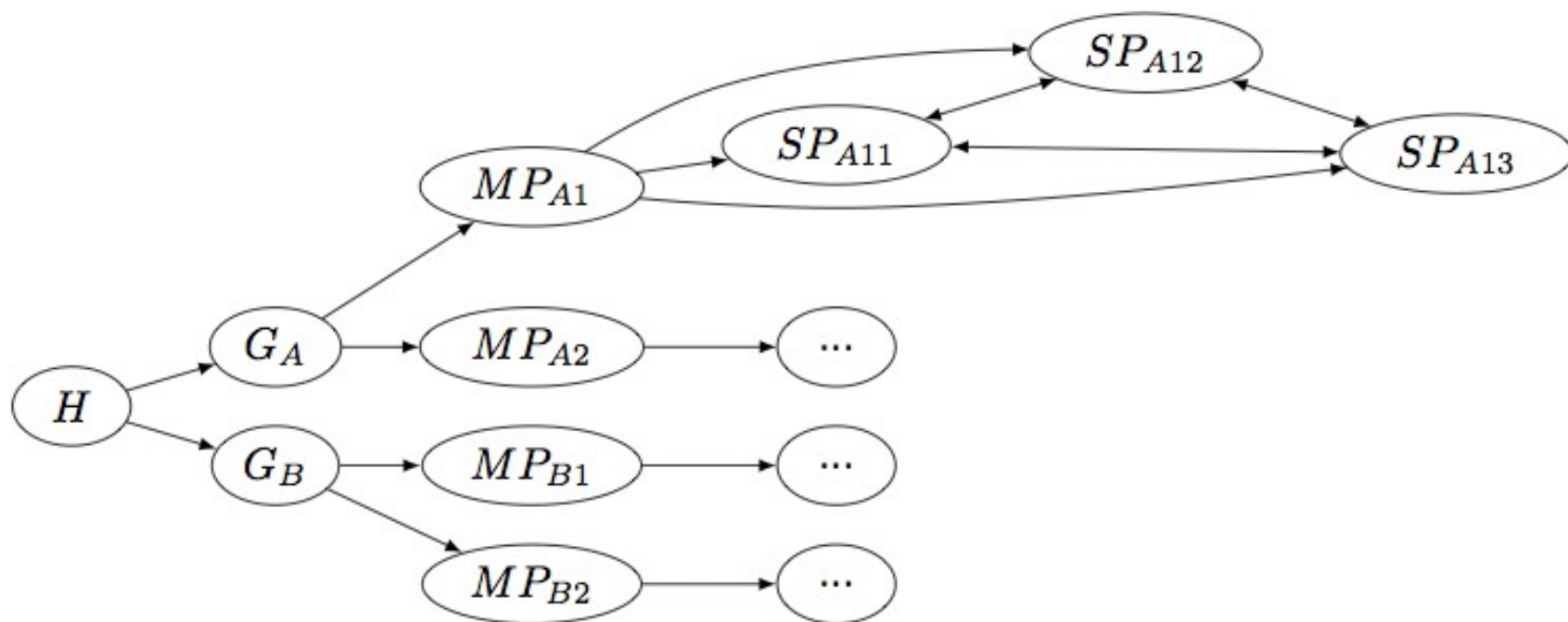
- Модель алгоритма PSO – граф потока управления $GA=(VA,EA)$



Решатель GIPSOMCS

- Уровни графа системы BC: $GS=(VS,ES)$
 - хост-система H
 - графические модули G
 - мультипроцессоры MP
 - скалярные процессоры SP
- Формулы систем:
 - NG1 - Nvidia 8800 GTS (1-1-32-8)
 - NG2 - Nvidia Tesla M1060 (1-3-30-8)

Решатель GIPSOMCS



Графовая модель системы GS

Отображение GIPSOMCS

- Система дополнительных ограничений графа GS

- Отображение M

$$M = (VM, EM)$$

$$VM = VA \cup VS, EM = (VA \rightarrow VS)$$

- Множество допустимых отображений
- Выбор отображений алгоритма на ВС

Отображение GIPSOMCS

Модули для построения по отображению:

- Обработка суброя на мультипроцессоре
- Вычислительное ядро CUDA **K1**:
- расчет движения частиц суброя в течение одного сезона
- k вычислительных блоков из n потоков
- **K1a**: поток на одну частицу; n потоков в блоке
- **K1b**: поток на одну размерность области поиска; $n*d$ потоков в блоке

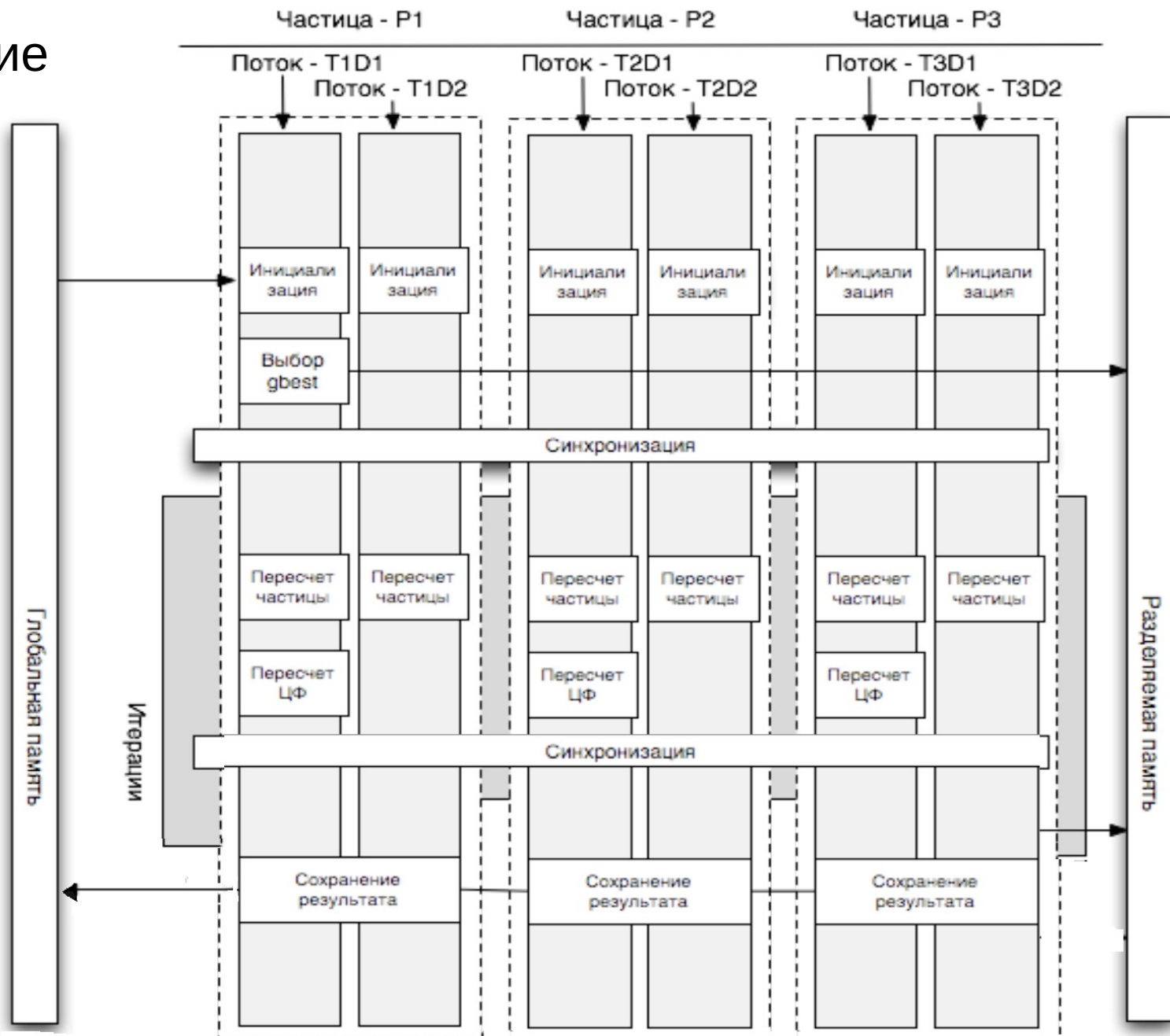
Отображение GIPSOMCS

Модули для построения по отображению:

- Вычислительное ядро CUDA **K2**:
- миграция частиц между суброями
- стратегия миграции репликацией и перемещением
- один блок, состоящий из потоков
- **K2a**: оптимизированные обмены данными в миграциях на GPU
- **K2b**: миграции через хост-систему

Отображение 1-GPU

модули
K1a, K2a



Конфигурация системы

Рабочая станция:

- 2x Nvidia Tesla C1060

- Nvidia Quadro FX5800

СС 1.3, 4 ГБ, 240 ядер



~ 3x Tesla C1060

Программное обеспечение:

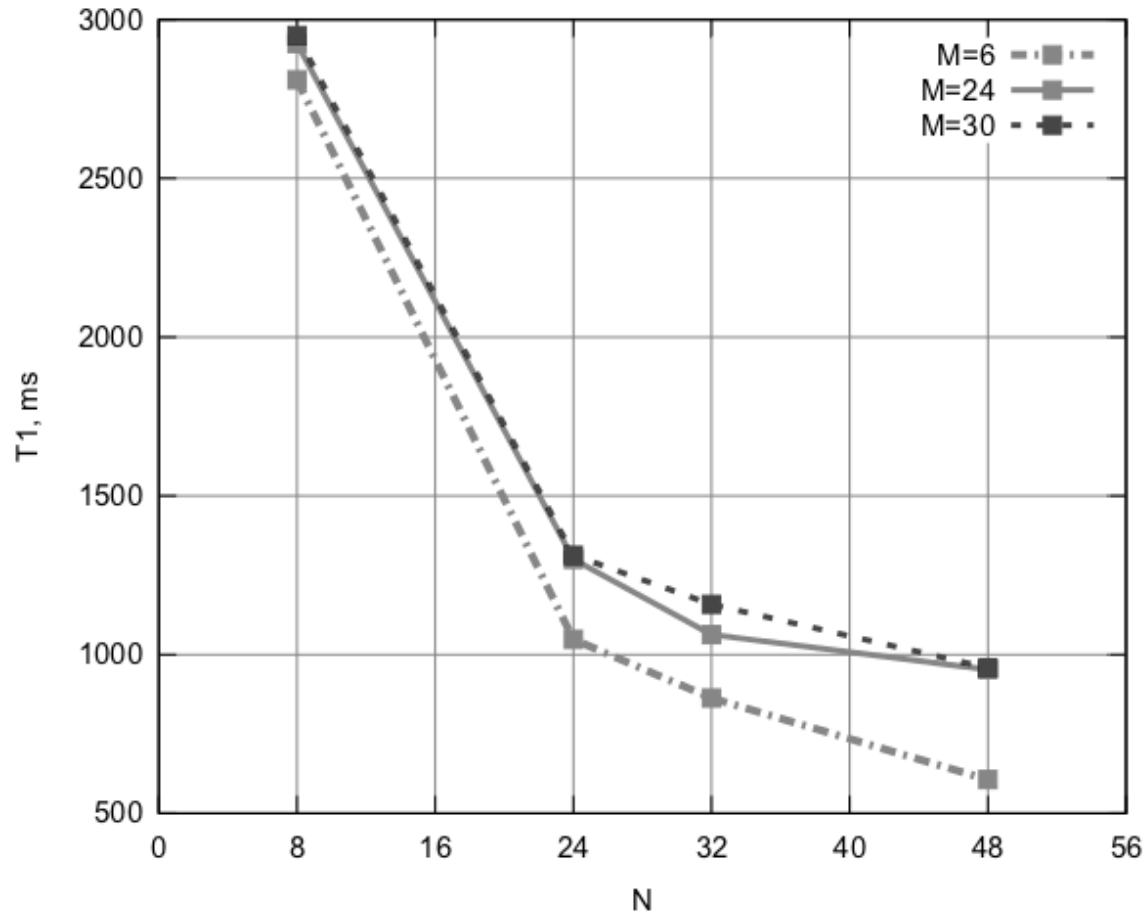
- CUDA 4.0, pthreads

- Linux x86_64

Оценка производительности

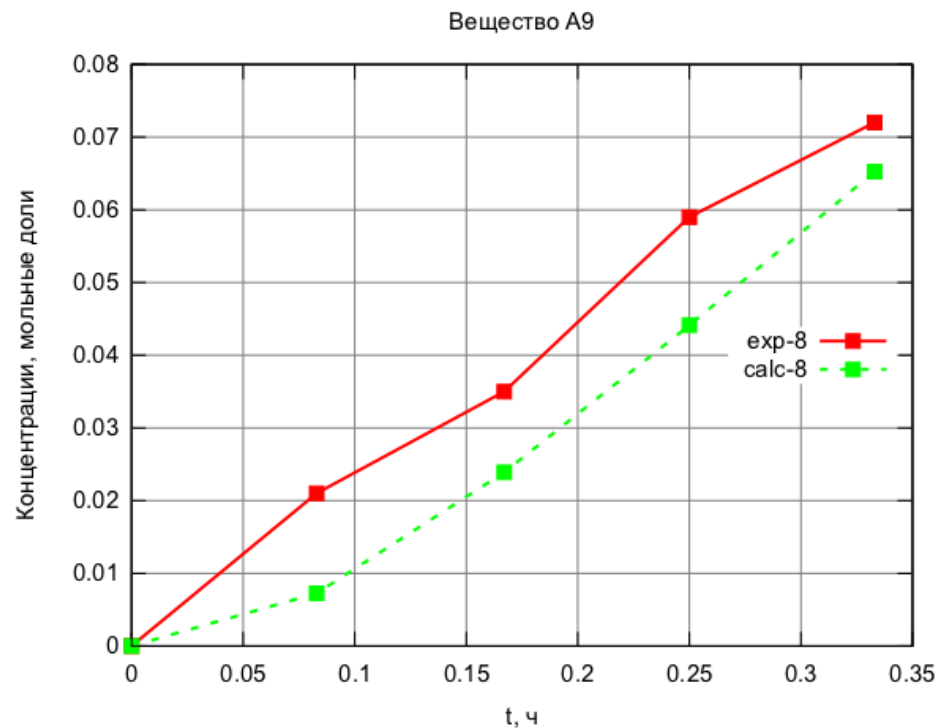
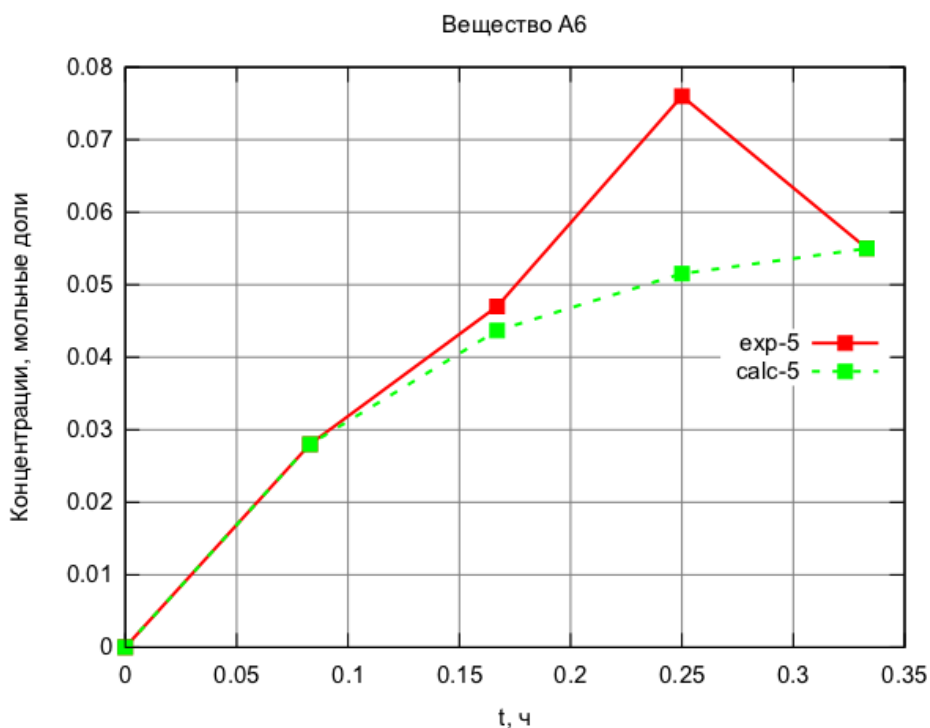
- Модельная реакция гидроалюмирования олефинов
- Совместное решение связанных задач {ДИБАГ, ДИБАХ, ТИБА, олефины}
- Распараллеливание на уровнях:
 - целевой функции (отдельные СОДУ)
 - оптимизационного алгоритма (отдельные агенты популяции)
- Отображение 3-GPU+host

Оценка производительности



Приведенное время расчета GIPSOMCS для различных размеров роя

Оценка адекватности



Значение функционала Φ (невязка с экспериментальными данными) для наблюдаемых веществ A_6 , A_9

Решатели PFS

- Решатель типа PFS подсистемы Back-Complex-Macro – PFSAWS
- Основан на алгоритме адаптивных взвешенных сумм Парето-аппроксимации
 - Аддитивная свертка критериев
 - Адаптация весовых коэффициентов
 - Метамоделли целевых функций

Решатели PFS

- Критерии:
 - MXSE – максимум невязки концентраций
 - MLSE – максимум невязки МНК-оценок уравнения Аррениуса
 - ITSE – квадрат невязки индукционного времени
- Методы параллелизма:
 - островная модель

Результаты

- Предложена структура расширяемого программного комплекса оптимизации с параллельными решателями
- Параллельная реализация GIPSOMCS
- Параллельные модели PFSAWS, NOWS
- Определен оптимальный режим проведения реакции циклоалюминирования олефинов

Направления развития

- Параллельная реализация других решателей системы Complex-Macro
- Решение новых задач химической кинетики
- Разработка методов динамического согласования алгоритмов решателей с архитектурами параллельных систем

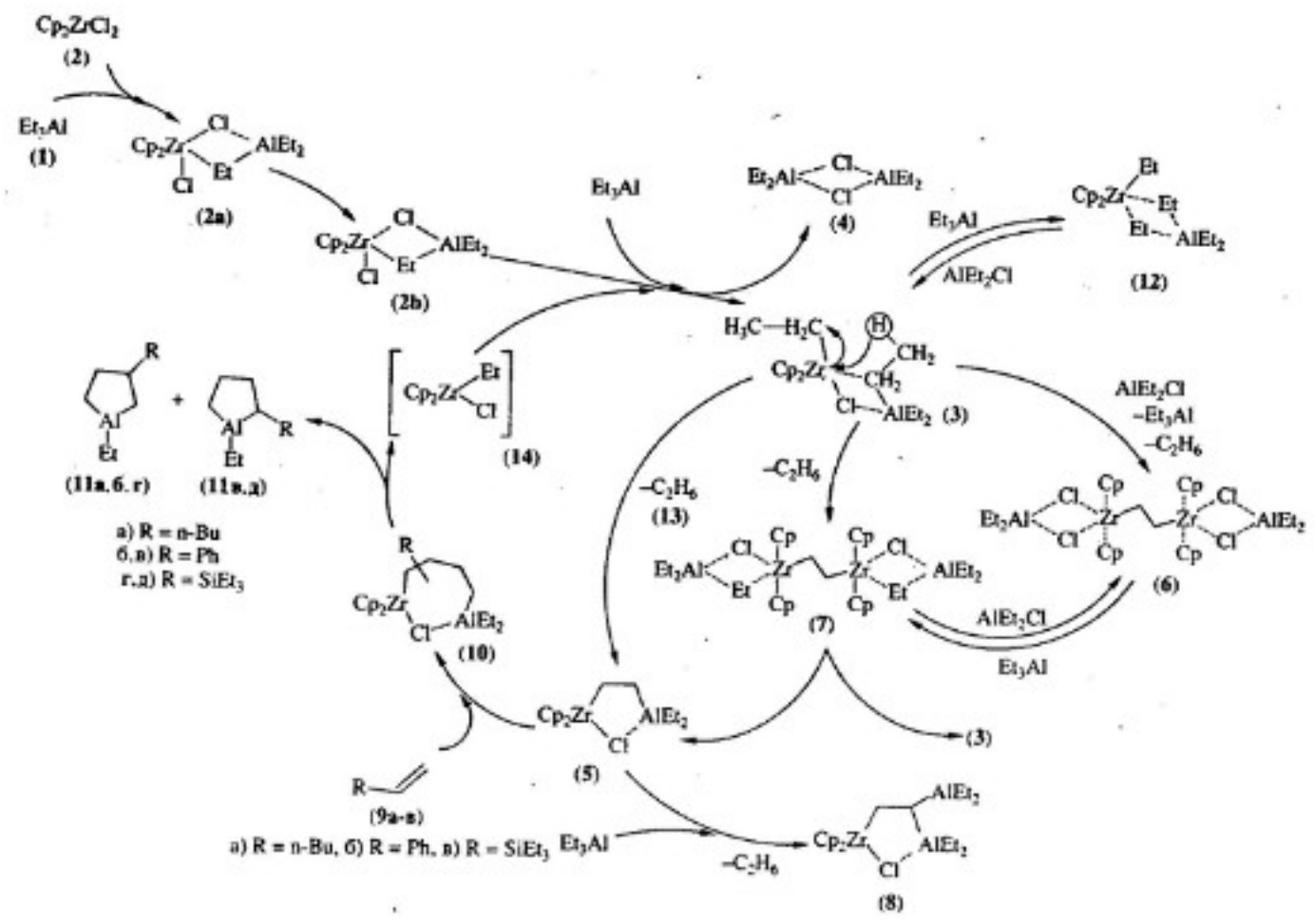
Спасибо за внимание!

Вопросы?

Запасные слайды

Here be dragons

Проблема катализа



Проблема катализа

Схема химических превращений

$$2A_1 + A_2 = A_3 + A_4$$

$$A_1 + A_3 = A_4 + A_{12}$$

$$2A_3 + 2A_4 = 2A_1 + A_{13} + A_6$$

$$A_3 = A_5 + A_{13}$$

$$A_5 + A_1 = A_8 + A_{13}$$

$$A_5 + A_9 = A_{10}$$

$$A_1 + A_{10} = A_3 + A_{11}$$

$$A_6 + 2A_1 = 2A_4 + A_7$$

$$A_7 = A_3 + A_5$$

$$W_1 = k_1 X_1^2 X_2 - k_{10} X_3 X_4$$

$$W_2 = k_2 X_1 X_3$$

$$W_3 = k_3 X_3^2 X_4^2$$

$$W_4 = k_4 X_3$$

$$W_5 = k_5 X_1 X_5$$

$$W_6 = k_5 X_5 X_9$$

$$W_7 = k_7 X_1 X_{10}$$

$$W_8 = k_8 X_1^2 X_6$$

$$W_9 = k_9 X_7$$

Проблема катализа

Уравнения материального баланса

$$\frac{d(NX_i)}{dt} = F_i = \sum_{j=1}^Q v_{ij} W_j$$

$$\begin{aligned} F_1 &= -2W_1 - W_2 + 2W_3 + 2W_5 - W_7, & F_2 &= -W_1, \\ F_3 &= W_1 - W_2 - 2W_3 - W_4 + W_7 + W_9, & F_4 &= W_1 - W_2 - 2W_3 + 2W_8, \\ F_5 &= W_4 - W_5 - W_6 + W_9, & F_6 &= W_3 - W_8, \\ F_7 &= W_8 - W_9, & F_8 &= W_5, \\ F_9 &= -W_6, & F_{10} &= W_6 - W_7, \\ F_{11} &= W_7, & F_{12} &= W_2, \\ F_{13} &= W_3 + W_4 + W_5. \end{aligned}$$

Результаты

- Определен оптимальный режим проведения реакции циклоалюминирования:
 - исходные концентрации взаимодействия октена-1 с AlEt_3 и Cp_2ZrCl_2 – 0,4, 0,4 и 0,02 моль/л
 - температура реакции – 43°C ;
 - время реакции – ~9 мин
- Натурная проверка эксперимента