

УДК 519.688

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СОВРЕМЕННЫХ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

В. А. Вшивков¹, И. Г. Черных¹, В. Н. Снытников²

Для решения прямых задач химической кинетики с произвольным числом химических реакций авторами предложен программный пакет, достоинствами которого являются расширяемая база данных химических реакций с возможностями сетевого доступа и обмена данными с другими, часто используемыми базами данных (GriMech, NIST, NASA), эргономичный интерфейс ввода химических реакций с автоматическим контролем ошибок, возможность расширения банка однопроцессорных и многопроцессорных вычислительных модулей. С помощью предложенного пакета исследована применимость существующих представлений о кинетике химических реакций C_1 – C_2 углеводородов для моделирования физико-химических процессов в газодинамическом реакторе с излучением. Работа выполнена при поддержке СО РАН (интеграционный проект № 148), программы Президиума РАН № 25 и РФФИ (код проекта 05–01–00665).

Ключевые слова: программный пакет, прямая задача химической кинетики, углеводород, информационные технологии, математическое моделирование, численное решение.

1. Введение. Математическое моделирование в области физико-химической газодинамики реагирующих сред широко используется при создании новых и усовершенствовании имеющихся способов переработки добываемого углеводородного сырья. Для переработки природного газа, состоящего в основном из C_1 – C_2 углеводородов, перспективны процессы пиролиза в газодинамических реакторах с получением более тяжелых соединений [1]. При математическом моделировании процессов пиролиза необходимо решать систему уравнений динамики газа вместе с уравнениями химической кинетики. Последние уравнения представляют собой системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающих кинетические превращения отдельных компонентов реакционного газа, число которых достигает сотен и более с соответствующей размерностью системы ОДУ. Для решения задач химической кинетики с большой размерностью необходимо современное программное обеспечение, удовлетворяющее ряду требований. Среди них следует указать: наличие эргономичного интерфейса и расширяемой библиотеки вычислительных методов, возможность работы с современными базами физико-химических данных (GRIMECH [2], NIST [3], NASA [4] и др.), возможность работы в связке “персональный компьютер–суперЭВМ”. В последнее время появился ряд программных продуктов, ориентированных на описанные выше задачи. К крупным программным продуктам для широкого круга задач моделирования можно отнести FLUENT [5], CHEMKIN [6], StarCD [7], HYSYS [8] и др. Существуют и небольшие программные пакеты (CKS [9], Kintecus [10], AcuChem [11], ChemMathS [12] и др.). Кроме указанных коммерчески распространяемых пакетов программ существуют также специализированные библиотеки подпрограмм: NAG [13], Numerical Recipes [14], БанКин [15], Компьютеризированный справочник “Физико-химические процессы в газовой динамике” [16] и др. К недостаткам крупных пакетов можно отнести высокую цену и, как правило, отсутствие возможности расширения и усовершенствования пакета пользователем. К недостаткам специализированных библиотек подпрограмм можно отнести высокую сложность структуры данных, отсутствие эргономичного интерфейса, а также сложности, связанные с архитектурой библиотек, не рассчитанной на использование ее в комплекте с единым интерфейсом. Для преодоления указанных недостатков в [17] предложена библиотека классов для решения прямых задач химической кинетики. В ней продемонстрирован объектно-ориентированный подход к созданию пакета для расчета термодинамических свойств и химической кинетики для химических реакций. Однако использование этой библиотеки для решения задач химической кинетики вместе с другими уравнениями требует создания дополнительных программных интерфейсов, в том числе для работы в связке с супер-ЭВМ.

Таким образом, проведенный анализ имеющихся программных пакетов и библиотек программ показал необходимость разработки нового программного пакета, ориентированного на решение прямых задач

¹ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. Акад. М. А. Лаврентьева, 6, 630090, г. Новосибирск; e-mail: vsh@ssd.sccc.ru, chernih@mail.ru

² Институт катализа им. Г. К. Борескова, просп. Акад. М. А. Лаврентьева, 5, 630090, г. Новосибирск; e-mail: snyt@catalysis.nsk.su

химической кинетики в сетевой среде с параллельными супер-ЭВМ. В нем должны быть решены следующие задачи:

- ввод и изменение системы уравнений большого (свыше 1000) числа химических реакций в общепринятой в химии нотации;
- проверка корректности записанной системы уравнений химических реакций;
- нахождение для заданной системы уравнений химических реакций правых частей ОДУ, которые должны быть записаны в универсальной нотации алгоритмов, работающих на персональных компьютерах и на параллельных супер-ЭВМ;
- создание итеративного режима работы с возможностью проверки решений укороченных систем ОДУ на однопроцессорных ЭВМ;
- представление полученного блока решения системы ОДУ для химических реакций в виде программного модуля, встраиваемого в программы решения систем уравнений математической физики, моделирующих на ЭВМ изучаемые процессы.

Созданный программный пакет ChemPAK решает поставленную задачу. Ниже приведено описание принципов его работы и продемонстрировано использование на задаче математического моделирования газодинамического реактора с излучением.

2. Программный пакет. Прямые задачи химической кинетики решаются исследователями путем задания химических реакций для реагентов и получения систем ОДУ для реакций. В соответствии с этим решение задачи в пакете ChemPAK было разделено на три основных этапа. На первом из них выполняется работа с базой данных — ввод и редактирование химических реакций, а также различных химических данных, необходимых для моделирования. На втором — работа с транслятором (трансляция системы химических реакций в систему обыкновенных дифференциальных уравнений, генерирование матрицы Якоби для полученной системы, расчет скоростей протекания химических реакций и др.). Третий этап — работа с вычислительными модулями, в частности, решение системы уравнений, описывающей химическую кинетику, совместно с уравнениями газодинамики. Исходя из такого принципа работы, созданный программный пакет был функционально разделен на три части (рис. 1): база данных химических реакций, химический транслятор, вычислительные модули.

База данных химических реакций содержит в себе таблицы химических реакций, таблицы химических элементов, таблицы вспомогательных данных (теплоты веществ и др.). База данных является многопользовательской с сетевым доступом. Химический транслятор является ядром созданного программного пакета и представляет собой единый интерфейс, с помощью которого можно создавать и редактировать системы химических реакций, транслировать системы химических реакций в системы обыкновенных дифференциальных уравнений в различных форматах вывода с возможностью генерации дополнительных данных, необходимых для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, управлять встроенными вычислительными модулями, работать с базами данных сторонних производителей. Вычислительные модули выделены в отдельный блок. Эти модули могут быть представлены в виде встроенных в транслятор (представлены в коде транслятора или могут быть подключены в виде динамически подключаемых библиотек DLL), а также в виде внешних программ для однопроцессорных компьютеров и внешних программ для параллельных ЭВМ.

Для разработки программного пакета был использован ряд современных информационных технологий и компонент программного обеспечения. На стадии проектирования и аналитики были использованы пакеты MS Project [18] и Rational Rose [19]. Применение этих пакетов позволило наглядно представить себе пакет еще до стадии реализации и эффективно распределить вычислительную нагрузку на модули пакета, а также существенно ускорить процесс разработки программного пакета (первая рабочая версия пакета с реализованными функциями ввода, хранения химических реакций и вспомогательных данных, а также с возможностью трансляции систем химических реакций в системы обыкновенных дифференциаль-

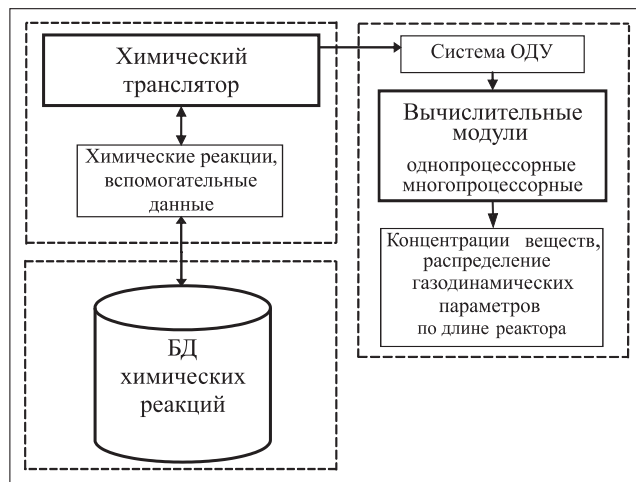


Рис. 1. Схема программного пакета CHEMPAK

ных уравнений появилась спустя четыре месяца после начала проекта). Благодаря пакету Rational Rose, на стадии аналитики был разработан интерфейс взаимодействия объектно-ориентированных модулей транслятора и вычислительных модулей обработки данных, написанных в классическом функционально-процедурном стиле. Отказ от полного перехода на объектно-ориентированное программирование обусловлен наличием высокопроизводительных алгоритмов, которые бессмысленно реализовывать в объектно-ориентированном виде. Например, объектно-ориентированная реализация алгоритма трансляции химических реакций в систему обыкновенных дифференциальных уравнений, изложенного в [20], снизила скорость трансляции в 1,5 раза по сравнению с традиционной реализацией такого класса алгоритмов.

2.1. База данных химических реакций. Моделирование базы данных велось с помощью пакета Allfusion ERWin Data Modeler [21]. Схема базы данных в стандарте IDEF1X представлена на рис. 2.

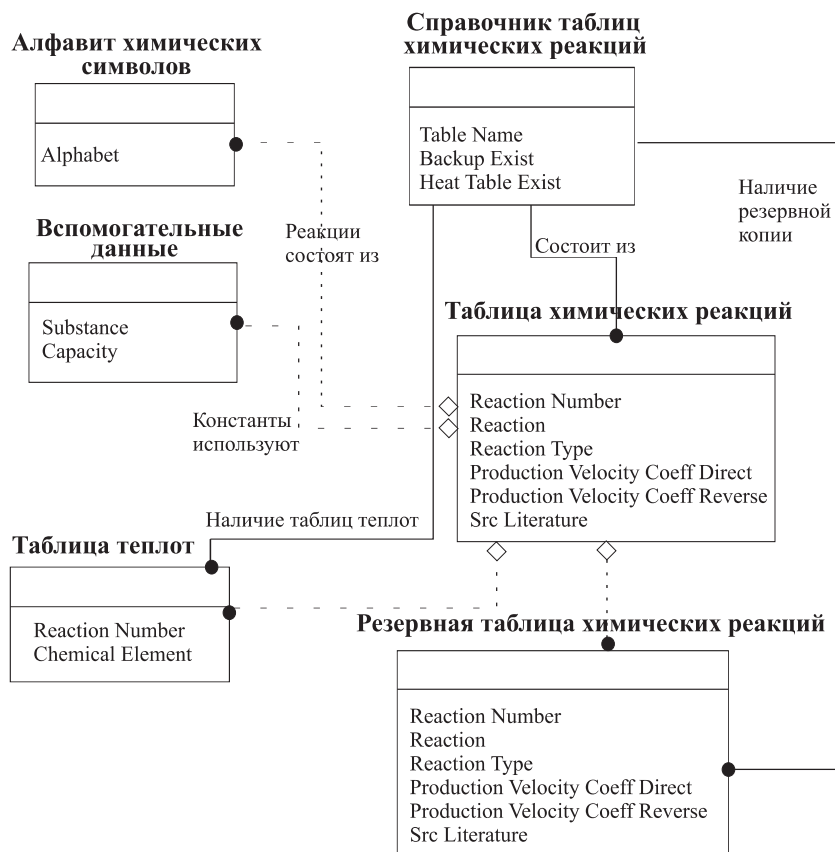


Рис. 2. Схема базы данных

Приведенная модель описывает химические данные как факты о сущностях и связях между сущностями. Кратко методология IDEF1X изложена в работе [22]. На рис. 2 прямоугольниками обозначены сущности, в частности алфавит химических элементов, химические реакции и вспомогательные данные. Сплошными и пунктирными линиями показаны связи между сущностями с краткими текстовыми комментариями, поясняющими тип связи. Идентифицирующая связь между сущностью-родителем и сущностью-потомком изображается сплошной линией. Сущность-родитель в идентифицирующей связи может быть как независимой, так и зависимой от идентификатора сущностью (это определяется ее связями с другими сущностями). Пунктирная линия изображает неидентифицирующую связь. Сущность-потомок в неидентифицирующей связи будет независимой от идентификатора, если она не является также сущностью-потомком в какой-либо идентифицирующей связи. Для реализации базы данных была использована реляционная СУБД Interbase [23]. Наличие бесплатной, свободно распространяемой версии, скромные требования к ресурсам компьютера (для работы достаточно процессора Pentium 2 и 64 мегабайт оперативной памяти), а также наличие библиотек прямого доступа (без использования интерфейсов типа ODBC, ADO) к базе данных обусловили выбор этой СУБД. Благодаря использованию Interbase, на СУБД было возложено исполнение ряда функций, таких как резервное копирование данных, оптимизация хранимых данных, отслеживание целостности данных и поиск химических реакций в базе данных. Такое решение позволило разгрузить интерфейс транслятора, а также перераспределить часть нагрузки с транслятора

на базу данных. Формат хранения данных в виде разобранной по химическим элементам реакции был выбран для увеличения скорости трансляции системы химических реакций. Хранение данных в таком виде несколько увеличило размер базы данных, однако этот подход позволил значительно увеличить скорость трансляции, поскольку разбор строки с химической реакцией перед транслированием оказывается не нужным. Кроме того, выбранный подход привел к увеличению скорости поиска реакции в базе данных по химическим веществам, входящим в реакцию. Для увеличения скорости трансляции дополнительно разработан алгоритм кэширования данных, который позволяет минимизировать обращения к базе данных в процессе трансляции.

2.2. Транслятор химических реакций. Транслятор химических реакций является ядром программного пакета. Функциональная модель транслятора представлена на рис. 3.



Рис. 3. Функциональная модель транслятора

Современные концепции создания многомодульных систем (пакетов программ) предполагают использование единого интерфейса для всех модулей программного пакета, а также возможность встраивания новых модулей без новой сборки ядра. Химический транслятор отвечает этим требованиям и является ядром программного пакета. Для оптимизации процесса разработки архитектуры транслятора было использовано CASE-средство Rational Rose. Благодаря возможности в короткий срок создавать многооконные интерфейсы любого уровня сложности, наличия библиотеки VCL, облегчающей реализацию алгоритмов обработки текстовых данных и наличия библиотеки IBX (библиотека прямого доступа к базам данных СУБД Interbase), для создания транслятора была выбрана среда разработки Borland C++ Builder. Особенности представления данных в задачах химической кинетики, а также алгоритм трансляции систем химических реакций [20] в систему обыкновенных дифференциальных уравнений предполагают использование специализированных типов данных, необходимых для эффективной работы с данными. Для ускорения работы алгоритмов трансляции система химических реакций кэшируется из базы и хранится в оперативной памяти. Для хранения в памяти исходной и оттранслированной системы реакции используется класс AnsiString библиотеки VCL. Использование этого класса позволяет избежать ограничений на длину строк (она ограничена лишь объемом оперативной памяти), обеспечивает эффективное использование памяти и предоставляет набор методов работы со строками (поиск подстроки в строке, сравнение строк, замена части строки на другую строку, удаление части строки, склейка строк), реализованных на языке Ассемблер. Визуальная часть транслятора и системные функции реализованы объектно-ориентированно. На рис. 4 представлена объектная схема транслятора.

Транслятор состоит из 12 окон. Каждое окно является экземпляром класса TForm библиотеки VCL. Каждая форма является контейнером для визуальных и не визуальных объектов. К визуальным объектам относятся элементы окна — поля ввода/вывода текстовых данных, объекты визуального представления табличных данных и др. К не визуальным объектам относятся компоненты доступа к базе данных, классы, реализующие системные функции, и т.д. Форма TMainForm является основным окном транслятора. Кроме того, эта форма содержит классы обработки систем химических реакций. Форма TImportForm отвечает за импорт данных из баз данных сторонних производителей. Форма TExportForm отвечает за экспорт химических данных в текстовый формат или формат Microsoft Excel. Форма TSearchForm отвечает за поиск

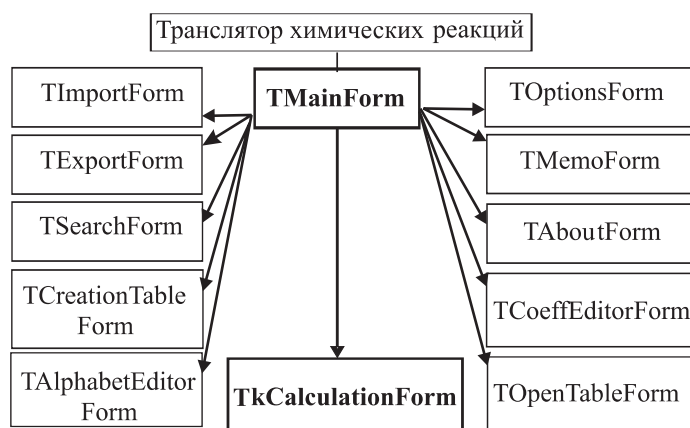


Рис. 4. Объектная схема транслятора химических реакций

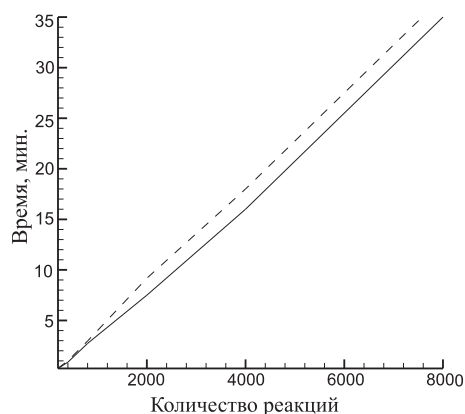


Рис. 5. Производительность транслятора

химических реакций в базе данных химических реакций. Форма TCreationTableForm отвечает за создание и удаление таблиц химических реакций. Форма TAlphabetEditorForm отвечает за редактирование алфавита химических элементов. Форма TOptionsForm — форма редактирования настроек химического транслятора. Форма TMemoForm — вспомогательная форма, предназначенная для вывода данных диагностики состояния базы данных. Форма TAboutForm — форма вывода информации об авторах пакета CHEMPAK. Форма TCoeffEditorForm — форма редактирования констант скоростей протекания химических реакций. Форма TOpenTableForm отвечает за открытие таблиц систем химических реакций. Форма TkCalculationForm — форма расчета констант скоростей протекания химических реакций. Отдельно выделим главную форму и форму TkCalculationForm. Эти формы содержат объектно-ориентированный код и вычислительные алгоритмы, написанные по правилам функционального программирования и заключенные в методы класса вычислительных алгоритмов. Благодаря такой реализации были достигнуты преимущества объектно-ориентированного подхода к написанию программ и сохранена высокая скорость вычислительных алгоритмов, реализованных по классической функциональной схеме.

2.3. Вычислительные модули. Вычислительные модули программного пакета предназначены для численного решения полученных систем ОДУ для записанной схемы химических реакций при задаваемых начальных данных. Имеется возможность воспользоваться как включенными в состав пакета методами, так и новыми процедурами, исходя из особенностей решаемой задачи. В программный пакет для жестких систем включены диагонально-неявный метод Рунге–Кутты RADAU5, имеющий пятый порядок аппроксимации, и полунявный метод Розенброка четвертого порядка RODAS. Подробное описание особенностей реализации этих методов и результатов численных экспериментов приведено в [25]. Проведенные нами расчеты для систем химических реакций, включающих несколько десятков компонентов, подтвердили вывод [25], что использование RADAU5 целесообразно в тех случаях, когда требуемая точность расчетов выше 10^{-4} . В случаях, когда такая точность не требуется, эффективно применяется RODAS. Для решения нежестких задач применяется процедура DOPRI8, созданная авторами [24] и включенная в пакет ChemPAK. Численный алгоритм основан на явной схеме Дорманда и Принса восьмого (седьмого) порядка аппроксимации с процедурой выбора шага по вложенной формуле. Эти методы в свободно распространяемой реализации [24, 25] в настоящее время широко используются для интегрирования систем ОДУ. В случае необходимости работы с внешними вычислительными модулями их подключение осуществляется динамически в виде библиотеки DLL.

Код, сгенерированный ChemPAK, может быть включен в программы численного моделирования физико-химических процессов как на персональных, так и на супер-ЭВМ, в том числе и в пакет FLUENT.

3. Тестирование транслятора химических реакций. Для тестирования транслятора использовалась следующая конфигурация компьютера: AMD Athlon XP 2600 (1,9 ГГц), RAM 768Mb. Тестирование производительности транслятора проводилось на системах из 200, 400, 800, 2000, 4000, 8000 модельных реакций. На рис. 5 приведены два графика зависимости времени трансляции от количества химических реакций (пунктирная линия — трансляция химических реакций и генерация матрицы Якоби, сплошная линия — только трансляция химических реакций). Из рис. 5 следует, что производительность транслятора линейна. Небольшие отклонения от прямой линии на рисунке обусловлены архитектурой процессора.

Примером использования созданного пакета ChemPAK служит изучение динамики реагирующего

потока в коническом сопле с дополнительным воздействием излучения. К целям математического моделирования относилось исследование различных предполагаемых кинетических схем разложения C_1 – C_2 углеводородов, а также изучение влияния газодинамических параметров и начальных данных (расхода, мощности излучения, состава газовой смеси) на режим работы реактора. Схема исследуемого процесса, математическая модель реактора, кинетические схемы химических реакций, а также результаты расчетов приведены в [26].

Заключение. Предложен программный пакет, созданный для решения прямых задач химической кинетики с произвольным числом химических реакций. Достоинствами данного пакета являются: расширяемая база данных химических реакций с возможностью сетевого доступа, возможность обмена данными с другими, часто используемыми базами данных (GrMech, NIST, NASA), эргономичный интерфейс ввода химических реакций с автоматическим контролем ошибок, возможность расширения банка однопроцессорных и многопроцессорных вычислительных модулей. Программный пакет успешно эксплуатируется в Институте катализа СО РАН. С помощью созданного пакета решена задача о моделировании газодинамического реактора с лазерным вводом энергии, моделирование химической кинетики в протопланетном диске.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Буянов Р.А., Васильева Н.А., Пармон В.Н., Поздняков Г.А., Правдин С.С., Снытников В.Н., Фомин В.М., Фомичев В.М., Шепеленко В.Н. Эндотермический химический реактор с газодинамическим управлением. Препринт № 5-2001 ИТПМ СО РАН. Новосибирск, 2001.
2. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
3. <http://www.nist.gov/>
4. <http://www.nasa.gov/>
5. <http://www.fluent.com/>
6. <http://www.ca.sandia.gov/chemkin/>
7. <http://www.cd-adapco.com/>
8. <http://www.aspentech.ru/RU/products/eng/hysys/process/>
9. https://www.almaden.ibm.com/st/computational_science/ck/msim/
10. <http://www.kintecus.com>
11. http://www.enveng.ufl.edu/homepp/andino/Extra_2002.htm
12. <http://www.cesd.com/cesdcls.html>
13. <http://www.nag.co.uk/>
14. <http://www.nr.com/>
15. Бабкин В.С., Бабушок В.И., Дробышев Ю.П., Молин Ю.Н., Новиков Е.А., Скубневская Г.И. Автоматический банк кинетической информации, общее описание. Препринт ВЦ СО АН СССР. **704**. Новосибирск, 1987.
16. Физико-химические процессы в газовой динамике: Компьютеризированный справочник. Т. 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме / Под ред. Г.Г. Черного и С.А. Лосева. М.: Изд-во МГУ, 1995.
17. Мизун А.Н., Матвейчик Е.А., Чернухо А.П., Жданок С.А. Объектно-ориентированный подход к моделированию химической кинетики // ИФЖ. 2005. **78**, № 1. 153–158.
18. <http://www.microsoft.com/>
19. <http://www.rational.com/>
20. Замахаев К.И. Химическая кинетика. Курс лекций. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1994.
21. <http://www.ca.com/>
22. http://www.citforum.ru/database/case/glava2_4_2.shtml
23. <http://www.interbase.com/>
24. Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений, нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
25. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений, жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
26. Вишнев В.А., Скляр О.П., Снытников В.Н., Черных И.Г. Применение пакета ChemPAK при моделировании газодинамического реактора // Вычислительные технологии (в печати).

Поступила в редакцию
30.09.2005