

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ЧАСТИЦ РЕАКЦИОННОЙ СМЕСИ В КАСКАДЕ РЕАКТОРОВ

И.В. Захаров, Т.А. Михайлова, С.А. Мустафина

Стерлитамакский филиал Башкирского Государственного Университета (СФ БашГУ), Стерлитамак, Россия

Статья посвящена применению технологии параллельных вычислений к моделированию задачи условного перемещения частиц реакционной смеси в каскаде реакторов. Кратко приводится актуальность применения параллельных вычислений и кластерных систем, рассматривается интерфейс передачи сообщений между процессами параллельной программы MPI. Приводятся примеры, демонстрирующие эффективность реализации предлагаемых методов.

Ключевые слова: параллельные алгоритмы, кластерная система, реакционная смесь, каскад реакторов.

Введение

Вследствие повсеместного использования вычислительной техники бурно развивается направление компьютерного моделирования. Компьютерное моделирование является промежуточным элементом между аналитическими методами изучения различных явлений или процессов и физическими экспериментами.

Однако решение подобных прикладных задач может быть трудоемким и требовать значительных затрат процессорного времени на выполнение вычислений, поскольку часто приходится иметь дело с большими объемами обрабатываемых данных.

Ускорение времени решения рассматриваемых задач может быть обеспечено при использовании нескольких вычислительных элементов (процессов или ядер). Кластерные системы в последние годы широко используются во всем мире как дешевая альтернатива суперкомпьютерам. Система требуемой производительности собирается из готовых, серийно выпускаемых компьютеров, объединенных посредством серийно выпускаемого сетевого (коммуникационного) оборудования. Это увеличивает доступность суперкомпьютерных технологий и повышает актуальность их освоения [1].

Доминирующее положение при разработке программ для параллельных систем занимает стандарт MPI (Message Passing Interface), который представляет собой интерфейс передачи сообщений между процессами, выполняющими одну задачу. Программа, разработанная на основе модели передачи сообщений, может быть представлена информационным графом, вершинам которого соответствуют параллельные ветви программы, а ребрам – коммуникационные связи между ними [2].

Постановка задачи

Пусть имеется каскад из n реакторов, в которых происходит процесс перемешивания частиц. Каждый реактор имеет следующие характеристики:

- A – число частиц в реакторе;
- p – вероятность перехода частиц из текущего реактора в следующий (для последнего реактора в каскаде - вероятность того, что частица покинет каскад);

- V – число частиц, которые перейдут в следующий реактор.

При запуске моделирования процесса в первый реактор загружается порция из M частиц. В процессе прохождения частиц по каскаду реакторов для каждой частицы разыгрывается вероятность перехода в следующий реактор. Если вероятность частицы превышает вероятность перехода, соответствующую текущему реактору, то осуществляется ее перевод в следующий реактор. Через определенные промежутки времени в первый реактор загружается порция частиц того же размера M .

Вычислительный эксперимент

Для решения поставленной задачи была написана программа в среде разработки Microsoft Visual C++ 2010 Express с использованием библиотеки MPICH версии 1.2.5.

При решении задачи каждому из 12 реакторов были заданы вероятности $p_i=0,4$, $i=0,1,\dots,11$. Было проведено два эксперимента с различным размером порций загружаемых частиц: 700 тыс. и 700 млн. В табл.1 отражено среднее время работы программы на однопроцессорном компьютере, на кластере из 7-ми компьютеров и кластере из 9-ти компьютеров.

Табл. 1. Время работы программы на различных вычислительных системах

Вычислительная система	$M=700000$	$M=700000000$
Однопроцессорный компьютер	30 сек.	9 ч. 38 мин.
Кластер из 7-ми компьютеров	3 сек.	55 мин.
Кластер из 9-ти компьютеров	3 сек.	49 мин.

Из табл. 1 видно, что применение параллельных вычислений при решении данной задачи позволяет значительно ускорить процесс расчета. В табл. 2 приведено число частиц в 12 реакторах после добавления в систему 30 порций частиц.

Табл. 2 показывает, что число частиц в реакторах при проведении вычислительного эксперимента как на одном процессоре, так и на кластере из нескольких компьютеров меняется незначительно с сохранением пропорционального соотношения между реакторами.

Табл. 2. Число молекул в реакторах в результате моделирования на различных вычислительных системах

Вычислительная система	$M=700000$	$M=700000000$	
Однопроцессорный компьютер	1866542	1866727154	
	1867326	1866692486	
	1866199	1866567326	
	1865812	1865678770	
	1862143	1862143665	
	1849967	1850498234	
	1820671	1820368513	
	1755375	1755716327	
	1639662	1639442168	
	1460926	1461053830	
	1225926	1225696595	
	955466	956036586	
	Кластер из 7-ми компьютеров	1866375	1866661580
		1866459	1866764697
1866704		1866538450	

	1866228	1865623550
	1859578	1862160783
	1852214	1850497117
	1819853	1820391671
	1757294	1755739048
	1640737	1639433803
	1460459	1461068504
	1225882	1225730303
	955556	956020471
Кластер из 9-ти компьютеров	1867731	1866708151
	1866628	1866756619
	1866339	1866479125
	1863774	1865706938
	1861210	1862146987
	1850283	1850513687
	1823702	1820362603
	1756734	1755734880
	1638971	1699392278
	1459908	1461084114
	1224558	1225631873
	956191	956016116

Заключение

Таким образом, экспериментально было показано, что применение параллельных вычислений на кластерных системах для моделирования перемещения частиц реакционной смеси в каскаде реакторов значительно ускоряет время работы программы. На примере показано, что распараллеливание алгоритма позволяет работать с большими объемами данных, при этом вычисление на кластерной системе занимает гораздо меньше времени по сравнению с однопроцессорной вычислительной системой.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№16-31-00162_мол_а «Разработка математических методов исследования структуры и качественных свойств продуктов свободно-радикальной сополимеризации с целью повышения эффективности инновационного производства») и гранта Ученого совета Стерлитамакского филиала БашГУ («Математическое моделирование и оптимальное управление физико-химическими процессами»).

Литература

1. https://ru.wikibooks.org/wiki/Распределенные_и_параллельные_вычисления/Введение (Дата обращения: 28.03.2016)
2. https://ru.wikipedia.org/wiki/Message_Passing_Interface (Дата обращения: 28.03.2016).