

# Распараллеливание в технологически ориентированных моделирующих средах

С.Н.Святный

Институт динамики сложных технических систем им. М.Планка,  
Магдебург, Германия  
email: svjatnyj@mpi-magdeburg.mpg.de

## Abstract

*Sviatnyi S.N. Parallelisation of dynamic process simulation tools.* The present paper reviews main approaches to dynamic simulation and discussed an application of equation oriented approach to the simulation on MIMD computers.

## Введение

В течение последнего десятилетия моделирование динамических процессов химической технологии широко применяется как инструмент на всех стадиях проектирования и функционирования производства. Моделирование динамических процессов требует огромных вычислительных ресурсов. Недостаток производительности компьютеров – одно из наиболее существенных препятствий на пути эффективного применения моделирования динамических процессов в управлении, а также обучении и тренировке персонала, когда необходимо моделирование в реальном режиме времени. Высокопроизводительные компьютеры позволят увеличить эффективность работы уже существующих моделей, а также сделать доступными более сложные и качественные модели, которые непригодны для использования на традиционных ЭВМ. Одним из способов достижения более высокой производительности и является использование параллельных вычислительных средств [1].

## 1. Подходы к динамическому моделированию

Для моделирования динамических процессов на параллельных архитектурах используются два основных подхода. Это блочно-ориентированный подход (БО) (иногда его называют последовательным модульным подходом) и уравнение-ориентированный подход (УО). Представление уравнений, описывающих технологическую схему процесса, для этих двух случаев, а также стратегии решения уравнений существенно различаются между собой.

При БО-подходе отдельные устройства представляются блоками (процедурное представление) с заданными входными и выходными сигналами. Выходные сигналы вычисляются из входных в каждом блоке. При решении стационарной задачи, выход одного модуля используется последовательно как вход другого. Примерами стационарных последовательных БО-симуляторов являются FLOWTRAN [2] и Aspen Plus [3].

В динамических БО-симуляторах состояния и значения входных величин в каждом блоке известны в начале каждого временного шага. Значения на следующем временном шаге могут быть вычислены явно или неявно по значениям состояний и входов на текущем временном шаге. В таких системах каждый блок может содержать свои собственные подпрограммы интегрирования и последовательность вычислений может быть комбинацией явных и неявных методов. Примерами динамических БО-симуляторов являются DYFLO [4] и CADAS [5].

При УО-подходе уравнения, описывающие отдельные устройства и блоки, объединяются в одну большую систему уравнений. Для стационарного случая – это система нелинейных алгебраических уравнений (АУ), представленная разреженной (спарс) матрицей с несимметричными блоками вдоль главной диагонали. Обычно такая система уравнений решается на основе модифицированного метода Ньютона. При этом производится оценка или аппроксимация матрицы Якоби и решается большая спарс-система алгебраических уравнений. Для этого применяются или прямые методы (Гауссово исключение) или итерационные методы (метод Гаусса-Зейделя).

Когда УО-подход применяется к динамическому случаю, система уравнений является набором обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений (ДАУ), которые, в общем случае, являются нелинейными, "жесткими" и имеют спарс-структуру. При решении "жестких" систем временной шаг определяется соображениями устойчивости, а не соображениями точности. При этом идеальными для "жестких" систем являются неявные методы интегрирования. Примерами базирующихся на УО-подходе симуляторов являются Ascend II [6], DynSim [7], Speedup[8], DIVA [9].

## 2. Способы распараллеливания средств моделирования динамических систем

Применение параллельных вычислительных систем для моделирования динамических процессов химической технологии имеет давние традиции. В последнее время, в связи с развитием кластерных технологий, повышением производительности процессоров и увеличением скорости передачи данных в локальных сетях, появилась реальная возможность использования вместо дорогостоящих параллельных ЭВМ MIMD-архитектуры кластеров на основе рабочих станций или РС.

Нами предложено два способа распараллеливания: химико-технологических процессов. Первый способ ориентирован на переформулировку постановки задачи, с целью приведения ее в соответствие с используемой

вычислительной архитектурой и объектно-ориентированной реализацией. В работе [10] представлен БО-подход к моделированию динамических систем и его программная объектно-ориентированная реализация.

Во втором способе принципы формирования модели остаются прежними, но при этом делаются попытки распараллеливания отдельных частей среды моделирования и ее адаптации к конкретной архитектуре параллельных вычислительных средств (рис. 1).

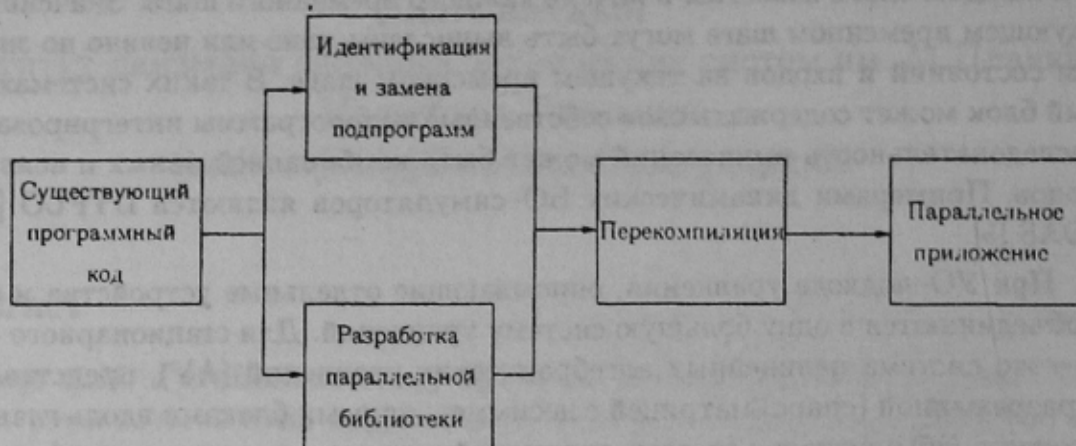


Рис. 1. Стратегия распараллеливания

При таком подходе конечный пользователь продолжает работать в рамках привычной среды моделирования и получает в свое распоряжение дополнительные возможности. В рамках такого подхода невозможно достичь полного распараллеливания процесса моделирования, но можно существенно повысить его эффективность. Рассмотрим данный подход на примере моделирующей среды DIVA.

### 3. Параллелизация моделирующей среды DIVA

Моделирующая среда DIVA – мощный, высокопроизводительный инструмент для моделирования динамических процессов химической технологии. В общем случае, модель в системе DIVA описывается системой ДАУ и для решения этой системы используется уравнение-ориентированный подход. При этом интегрирование системы уравнений на каждом временном шаге сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Этот шаг требует наибольших затрат времени и обладает наибольшим потенциалом с точки зрения распараллеливания.

Обычно в системе DIVA для решения систем АУ используется набор последовательных подпрограмм MA48 из библиотеки численных методов Harwell [11]. Этот набор подпрограмм основан на классическом методе исключения Гаусса с использованием LU-разложения.

Для распараллеливания решения систем АУ была выбрана библиотека Super\_LU [12], реализованная с помощью коммуникационного стандарта

MPI[13] и использующая метод исключения Гаусса со статическим выбором ведущего элемента. Этот алгоритм известен как GESP-алгоритм (Gaussian elimination with staic pivoting).

#### 4. GESP алгоритм

В отличие от метода исключения Гаусса с частичным выбором ведущего элемента, известного как GEPP-алгоритм (GEPP (Gaussian elimination with partial pivoting)), являющегося оптимальным для ЭВМ с разделяемой памятью, GESP-алгоритм больше подходит для ЭВМ с распределенной памятью и в частности для компьютерных кластеров. Для стабилизации алгоритма используется статическое перемещение наибольших элементов матрицы  $A$  системы уравнений на диагональ и итеративное уменьшение погрешности решения. Ниже представлена структура GESP алгоритма.

1. Нормировка строк/столбцов:  $A \leftarrow D_r \cdot A \cdot D_c$   
 $D_r$  и  $D_c$  - диагональные матрицы выбранные таким образом, чтобы наибольшие элементы каждого столбца/строки были равны  $\pm 1$
2. Перестановка строк:  $A \leftarrow P_r \cdot A$   
 $P_r$  - перестановка строк таким образом, чтобы диагональные элементы были больше недиагональных
3. Поиск перестановки столбцов  $P_c$  для сохранения спарс-структуры:  
 $A \leftarrow P_c \cdot A \cdot P_c^T$
4. Нахождение LU-разложения  $A = L \cdot U$  с контролем величины диагональных элементов, где  $L$  верхняя, а  $U$  нижняя треугольные матрицы  

```

if ( $|a_{ii}| < \sqrt{\epsilon} \cdot \|A\|$ ) then
  set  $a_{ii}$  to  $\sqrt{\epsilon} \cdot \|A\|$ 
endif

```
5. Решение системы уравнений  $A \cdot x = b$  с итеративным уменьшением погрешности  

```

iterate:
   $r = b - A \cdot x$ 
  Solve  $A \cdot dx = r$ 
   $berr = \max_i \frac{|r_i|}{(|A| \cdot |x| + |b|)_i}$ 
  if ( $berr > \epsilon$  and  $berr \leq \frac{1}{2} \cdot lastberr$ ) then
     $x = x + dx$ 
     $lastberr = berr$ 
  go to iterate
endif

```

Численные эксперименты показывают, что для широкого класса задач GESP-алгоритм обладает такой же устойчивостью, как и GEPP-алгоритм.

Для иллюстрации возможности предлагаемого способа распараллеливания, рассмотрим задачу идентификации параметров процесса ферментации в изотермическом биореакторе [14]. Модель процесса описывается шестью дифференциальными уравнениями сохранения массы:

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1 &= -k_2 x_2 x_8 \\
 \dot{x}_2 &= -k_1 x_2 x_6 + k_3 x_{10} - k_2 x_2 x_8 \\
 \dot{x}_3 &= k_2 x_2 x_8 + k_1 x_4 x_6 - 0.5 k_3 x_9 \\
 \dot{x}_4 &= -k_1 x_4 x_6 + 0.5 k_3 x_9 \\
 \dot{x}_5 &= k_1 x_2 x_6 + k_3 x_{10} \\
 \dot{x}_6 &= -k_1 x_2 x_6 - k_1 x_4 x_6 + k_3 x_{10} + 0.5 k_3 x_9
 \end{aligned} \tag{1}$$

четырьмя условиями равновесия:

$$\begin{aligned}
 0 &= -x_7 + x_6 + x_8 + x_9 + x_{10} - Q^+ \\
 0 &= -x_8 (k_5 + x_7) + k_5 x_1 \\
 0 &= -x_9 (k_6 + x_7) + k_6 x_3 \\
 0 &= -x_{10} (k_4 + x_7) + k_4 x_5
 \end{aligned} \tag{2}$$

с параметрами  $p = [k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6]^T$  и вектором входных величин  $u = [Q^+]$ .

В данной задаче необходимо найти значения параметров  $p$ , минимизирующих целевую функцию, заданную квадратичным отклонением экспериментальных и полученных в результате моделирования данных. При решении этой задачи происходит около 6000 вызовов подпрограмм решения системы линейных алгебраических уравнений. В таблице 1 представлены полученные в результате моделирования оптимальные параметры и их погрешности.

$k_1$	$= 0.2257\text{E}+2$	[kg/(h gmol)]	$\epsilon_1$	$= 3.496 \%$
$k_2$	$= 0.2918\text{E}+2$	[kg/(h gmol)]	$\epsilon_2$	$= 2.303 \%$
$k_3$	$= 0.4357\text{E}+7$	[1/h]	$\epsilon_3$	$= 2.260 \%$
$k_4$	$= 0.2361\text{E}-15$	[gmol/kg]	$\epsilon_4$	$= 1.740 \%$
$k_5$	$= 0.3032\text{E}-11$	[gmol/kg]	$\epsilon_5$	$= 0.731 \%$
$k_6$	$= 0.1653\text{E}-15$	[gmol/kg]	$\epsilon_6$	$= 1.379 \%$

Таблица 1. Оптимальные параметры биореактора

Моделирование проводилось с использованием процедур последовательной библиотеки Harwell и параллельной библиотеки Super\_LU на кластере из 4 РС. Результаты моделирования совпадают между собой. На рис.2 показаны взаимодействие процессоров и их загрузка во время решения задачи идентификации на кластере из 4 ЭВМ, полученные с помощью разработанного фирмой PALLAS GmbH пакета трассировки параллельных программ VAMPIR [15].

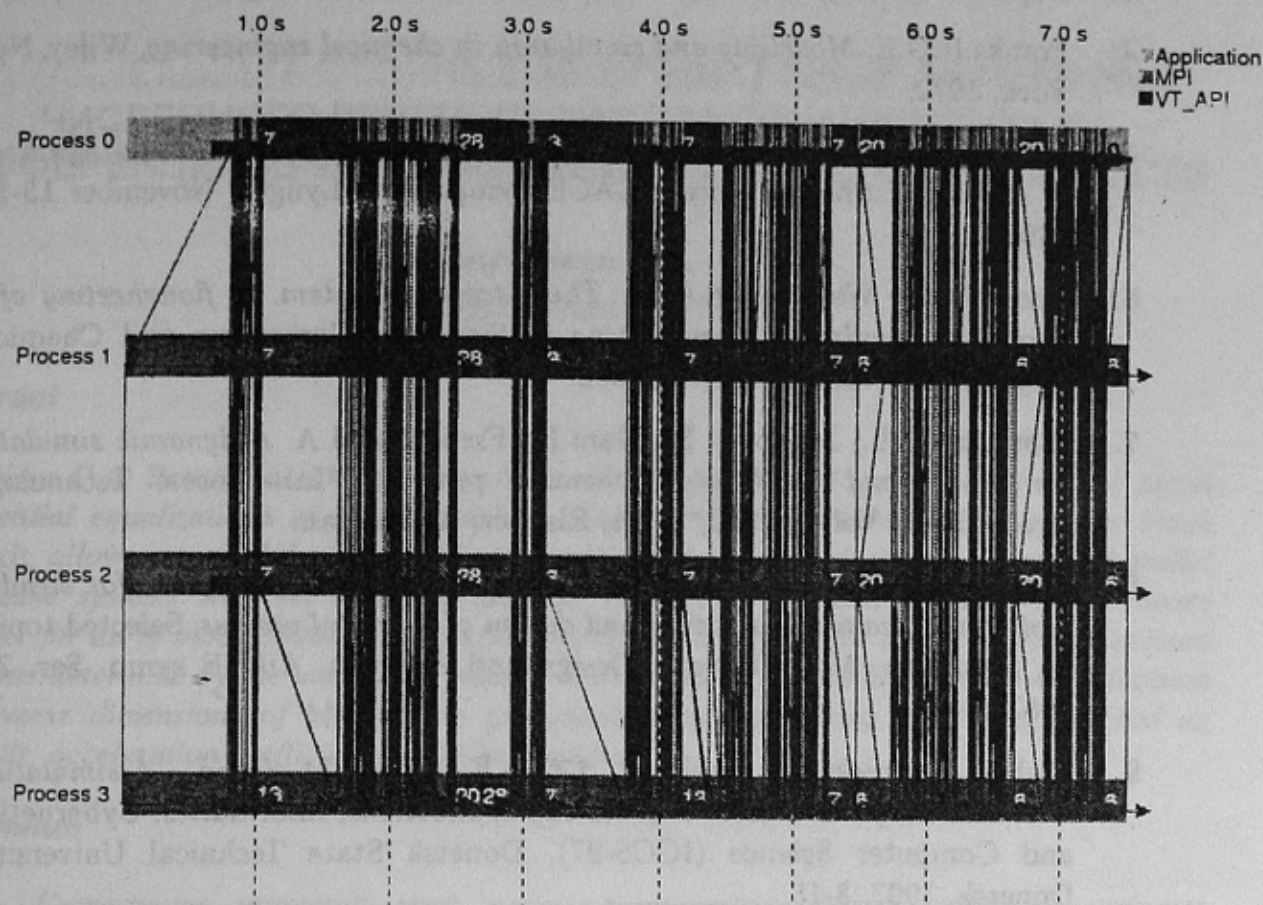


Рис. 2. Выполнение параллельной программы

## Заключение

Предложенный метод распараллеливания моделирующей среды DIVA основан на уравнение-ориентированном подходе и заключается в распараллеливании решения систем алгебраических уравнений, возникающих при моделировании динамических систем. Этот метод был использован для решения задачи идентификации параметров биореактора и дал небольшое увеличение производительности по сравнению с последовательным моделированием (порядка 5 %). Существенного повышения производительности следует ожидать при моделировании систем, содержащих порядка 1000 ДАУ.

## Литература

1. Moe H.I., Hertzberg T. *Advanced computer architectures applied in dynamics process simulation: A review*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 18, 1994.
2. Rosen C.M, Pauls A.C. *Computer-Aided Chemical Process Design: The FLOWTRAN System*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 1, 1977, 11-21.

3. Aspen Technology Inc. *Aspen Plus User Guide*, Cambridge, MA 02139, 1988.
4. Franks R.G.E. *Modelling and simulation in chemical engineering*, Wiley, New York, 1972.
5. Eikaas T.I. *A System for Computer Aided Design, Analysis and Synthesis of Industrial Process*, Nordic CACE Symposium, Lyngby, November 15-16, 1990.
6. Locke M.H., Westerberg A.W. *The Ascend-II system. A flowsheeting of a successive quadratic programming methodology*, Computers and Chemical Engineering, Vol. 7, 1983, 615-630.
7. (Sørensen E.L., Johansen H., Gani R., Fredenslund A. *A dynamic simulator for design and analysis of chemical processes*, In: Process Technology Proceedings, Vol. 9, 1990, 13-18, Elsevier, Amsterdam.
8. Perkins J.D., Sargent R.W.H. *SPEEDUP: a computer program for steady-state and dynamic simulation and design of chemical process*, Selected topics on Computer-Aided Process Design and Analysis, AIChE symp. Ser. 78, 1982, 1-11.
9. Mohl K.D., Spieker A., Kohler R., Gilles E.D., Zeitz M. *DIVA - A simulation environment for chemical engineering applications*, Informatics, Cybernetics and Computer Science (ICCS-97), Donetsk State Technical University, Donetsk, 1997, 8-15.
10. Moldovanov A.V., Sviatnyi S.N. *Blockorientierter Ansatz zur Herleitung paralleler Modelle für dynamische Systeme*, Simulationstechnik. 13 Simposium in Weimar, September 1999, Tagungsband, SCS (1999), 319-324
11. HSL *Harwell Subroutine Library. A Catalog of Subroutines (Release12)*, AEA Technology, Harwell Laboratory, Oxfordshire, England, 1996.
12. Li X. S., Demmel J. W. *A scaleable sparse direct solver using static pivoting*, Proceedings of the 9th SIAM Conference on Parallel Processing and Scientific Computing, March 22-24, 1999, San Antonio, Texas.
13. Lusk E., Skjellum A., Gropp W. *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*, Cambridge, MA, MIT Press, 1994.
14. C. Majer *Parameterschätzung, Versuchsplanung und Trajektorienoptimierung für verfahrenstechnische Prozesse*, PhD. Thesis, Universität Stuttgart, 1997.
15. PALLAS GmbH, *Vampir 2.5 - Visualization and Analysis of MPI Programs: User's Manual*, 1999.