

На правах рукописи

ЧЕРНЫХ
Игорь Геннадьевич

**ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ СНЕМРАК ДЛЯ
ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ ЗАДАЧ
ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ В СЕТЕВОЙ СРЕДЕ ИЗ
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЭВМ**

05.13.11 - математическое и программное обеспечение
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Новосибирск – 2006

Работа выполнена в Институте Вычислительной Математики и
Математической Геофизики СО РАН

Научный руководитель: Вшивков Виталий Андреевич,
доктор физико-математических
наук

Официальные оппоненты:

Ведущая организация:

Защита состоится 26 декабря в 14 ч. 00 мин. на заседании
диссертационного совета К003.032.01 в Институте систем
информатики имени А.П.Ершова Сибирского отделения РАН по
адресу: 630090, г.Новосибирск, пр.Акад.Лаврентьева, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале ИСИ СО
РАН (г.Новосибирск, пр.Акад.Лаврентьева, 6).

Автореферат разослан 22 ноября 2006г.

Ученый секретарь
Диссертационного совета,
к.ф.-м.н

Мурзин Ф.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Проблемы численного решения прямых задач химической кинетики с большим (свыше тысячи) числом химических реакций много лет привлекают внимание исследователей. Необходимость решения таких систем обусловлена современными потребностями промышленности. Остро стоит ряд задач по улучшению процесса переработки нефти, газа, усовершенствованию химических реакторов. Для каждой из этих задач необходимо проводить математическое моделирование, и перед тем как менять производственные процессы, необходимо улучшать химические схемы на разных стадиях производства. Очевидно, что вручную данные задачи решить практически невозможно, ввиду огромного размера систем обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующих системам химических реакций. Одним из решений поставленной проблемы является использование известных программных пакетов или создание нового программного пакета предназначенного для численного решения прямых задач. Существующие пакеты имеют ряд ограничений: ограничение на количество химических реакций, отсутствие современного эргономичного интерфейса, отсутствие интерфейса ввода системы химических реакций с проверкой корректности вводимых реакций, отсутствие единого хранилища химических данных, отсутствие возможности расширения пакета, отсутствие возможности использования параллельных суперкомпьютеров для проведения вычислений, высокая стоимость имеющихся пакетов. На рынке программного обеспечения представлены как крупные программные продукты, позволяющие решать широкий круг задач моделирования (FLUENT, CHEMKIN, StarCD, HYSYS и др.), так и небольшие программные пакеты (CKS, Kintecus, AcuChem, ChemMathS и др.). Наиболее широко для решения химических задач используются пакеты FLUENT, HYSYS, CHEMKIN. Кроме указанных промышленных пакетов программ существует также ряд специализированных библиотек подпрограмм (NAG, Numerical recipes, БанКин, Компьютеризированный справочник "Физико-химические процессы в газовой динамике"),

разработанных в разные годы. 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.

Отдельно можно выделить библиотеку классов, разработанную для моделирования задач химической кинетики, описанную в работе*. В ней продемонстрирован объектно-ориентированный подход к созданию пакета для расчета термодинамических свойств и химической кинетики для химических реакций. Такой подход эффективен для решения задач химической кинетики, однако использование этой библиотеки в рассматриваемых задачах затруднено необходимостью создания дополнительных программных интерфейсов. Весьма трудоемка адаптация библиотеки для работы в связке с супер-ЭВМ. Чрезвычайно важен факт наличия возможности работы с различными химическими базами данных. Такая возможность повышает эффективность работы. Таким образом, проведенный анализ имеющихся программных пакетов и библиотек программ, а также анализ современного класса прямых задач химической кинетики показывают необходимость разработки нового программного пакета, ориентированного на сетевую среду с параллельными супер-ЭВМ.

Цель работы состоит в разработке нового программного пакета, ориентированного на сетевую среду с параллельными супер-ЭВМ. В нем должны быть решены следующие задачи:

- ввода и изменения системы уравнений большого, свыше 1000, числа химических реакций в общепринятой в химии нотации;

* Мигун А.Н., Матвейчик Е.А., Чернухо А.П., Жданок С.А. Объектно-ориентированный подход к моделированию химической кинетики // ИФЖ. 2005. Т.78, №1. С.153-158.

- проверки корректности записанной системы уравнений химических реакций;
- нахождения для заданной системы уравнений химических реакций правых частей ОДУ, которые должны быть записаны в универсальной нотации для вычислительных методов, работающих как на персональных компьютерах, так и на параллельных супер-ЭВМ (создание программного транслятора системы химических реакций в правые части системы ОДУ);
- создания итеративного режима работы с возможностью проверки решений укороченных систем ОДУ на однопроцессорных ЭВМ;
- представления полученного блока решения системы ОДУ для химических реакций в виде программного модуля, встраиваемого в программы решения систем уравнений математической физики, моделирующих на одно- и многопроцессорных ЭВМ изучаемые процессы.

Методы исследования

Методы объектно-ориентированного программирования, проектирования и анализа алгоритмов и программ, разработки человеко-машинных интерфейсов; метод проектирования и разработки баз данных; методы решения прямых задач химической кинетики, численные эксперименты на ЭВМ.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. разработка метода генерации параллельного кода решателя систем обыкновенных дифференциальных уравнений из набора входных данных и последовательного решателя.
2. разработка программного пакета, предназначенного для решения прямых задач химической кинетики с использованием параллельных суперЭВМ, обладающего следующими свойствами:

- открытый межплатформенный встраиваемый код последовательного и параллельного решателей систем обыкновенных дифференциальных уравнений;
- итеративный режим решения прямых задач химической кинетики;

Научная и практическая ценность работы заключается в возможности решения с помощью разработанного пакета прямых задач химической кинетики с большим (свыше 1000) количеством химических реакций. Программный пакет эксплуатируется сотрудниками Института Катализа СО РАН. Созданный программный пакет позволил итеративно в сетевой среде из последовательных и параллельных компьютеров решить прямые задачи химической кинетики (пиролиз легких углеводородов, конверсия метана и др.). Разработанный генератор параллельного кода автоматически распараллеливает последовательный решатель систем обыкновенных дифференциальных уравнений по данным. Благодаря открытой структуре пакета решена проблема исследования целого класса задач, где необходимо решать прямые задачи химической кинетики как одну из подзадач.

Достоверность результатов.

Разработанный программный пакет прошел детальное тестирование на модельных задачах, близких по физической постановке к изучаемым явлениям и допускающим аналитическое решение, а также на реальных задачах пиролиза легких углеводородов с сопоставлением результатов расчетов с экспериментальными данными. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в рецензируемых журналах из списка ВАК. Достоверность подходов к численному моделированию подтверждается совпадением результатов, полученных разными численными методами, а также совпадением их с экспериментальными данными (в диссертационной работе представлены результаты проведенных расчетов). Полученные результаты расчетов с использованием

пакета непротиворечивы и дополняют друг друга. Представленные в диссертации исследования проводились в рамках программы Президиума РАН «Происхождение и эволюция биосферы», Интеграционного проекта СО РАН №148, гранта РФФИ № 05-01-00665.

Автор защищает:

- Многомодульный прикладной программный пакет «ChemPAK», предназначенный для численного решения прямых задач химической кинетики в сетевой среде из однопроцессорных и многопроцессорных компьютеров. Пакет состоит из базы данных химических реакций, транслятора химических реакций и вычислительных модулей;
- Метод генерации параллельного кода решателя систем обыкновенных дифференциальных уравнений из набора входных данных и последовательного решателя.

Личный вклад соискателя заключается в обсуждении постановок задач, разработке адекватных алгоритмов и методов решения, создании и тестировании алгоритмов и программ, проведении расчетов и интерпретации результатов численного моделирования. Все выносимые на защиту результаты принадлежат лично автору. Представление изложенных в диссертации и выносимых на защиту результатов, полученных в совместных исследованиях, согласовано с соавторами.

Апробация работы. Основные научные результаты диссертации докладывались и обсуждались на семинаре "Математическое и архитектурное обеспечение параллельных вычислений" под руководством д.т.н., профессора В.Э. Малышкина (ИВМиМГ СО РАН); на семинаре "Математическое моделирование больших задач" под руководством д.ф.-м.н. В.А. Вшивкова; на семинаре под руководством академика РАН В.Н. Пармона (ИК СО РАН) по интеграционному проекту СО РАН, на международном рабочем совещании «Происхождение и эволюция биосферы» (Новосибирск, 26-29 июня 2005г), на второй

международной школе-конференции молодых ученых «Каталитический дизайн – от исследований на молекулярном уровне к практической реализации» (Новосибирск – Алтай, 25 – 29 июля 2005г), на конференции молодых ученых ИВМиМГ СО РАН (Новосибирск, 2005, 2006), XLIII Международной Научной Студенческой Конференции (Новосибирск, 2005).

Основные научные результаты диссертации опубликованы в 9 работах, список которых приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Диссертация изложена на 127 страницах, включает библиографический список из 102 наименований работ. Рисунки, формулы, таблицы и библиографические ссылки имеют сквозную нумерацию по всей работе.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, изложены основные характеристики наиболее известных программных пакетов и библиотек подпрограмм для численного решения прямых задач химической кинетики. Приведена классификация наиболее часто используемых баз данных химических реакций и вспомогательных химических данных. Изложен обзор технологий разработки программного обеспечения (ПО), а именно: характеристики объектов внедрения, технические характеристики проектов создания ПО, организационные характеристики проектов создания ПО применительно к поставленной задаче. Приведен краткий обзор CASE технологий для разработки ПО и обоснована целесообразность применения CASE технологий и средств для разработки научного ПО.

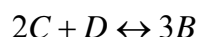
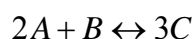
Первая глава посвящена постановке задачи, разработке алгоритма трансляции системы химических реакций в систему обыкновенных дифференциальных уравнений, а также методике построения многомодульных программных пакетов.

В § 1 изложены цели создания программного пакета, перечислены задачи, которые необходимо решить с помощью пакета. Приведены методы решения поставленной задачи и реализации программного пакета.

В § 2 излагается алгоритм трансляции системы химических реакций в систему обыкновенных дифференциальных уравнений, а также приведен пример системы ОДУ, описывающей систему из 3 химических реакций. Любая сложная реакция может быть представлена в виде сочетания обратимых, параллельных и последовательных реакций. Алгоритм построения системы дифференциальных уравнений, описывающих кинетику сложной реакции заключается в следующем:

1. Для любого соединения (исходного вещества, продукта реакции или промежуточного вещества) выписываются уравнения, левая часть которых представляет собой производную от концентрации по времени $\frac{\partial y_i}{\partial t}$, где y_i - концентрация i -ого вещества.
2. Для каждого вещества правая часть уравнения представляет собой сумму членов, каждый из которых представляет собой правую часть закона действующих масс для стадии (т.е. простой реакции), в которых образуется или расходуется данное вещество. Число таких членов равно числу простых реакций, в которых участвует данное вещество.
3. Член, соответствующий простой реакции, входит в правую часть уравнения $\frac{\partial y_i}{\partial t}$ со знаком плюс, если i -тое вещество в этой реакции образуется, и со знаком минус, если оно в этой реакции расходуется.
4. Численный коэффициент при каждом члене равен числу частиц j -того вещества, образующихся или расходуемых в данной простой реакции.
5. Порядок простой реакции по j -тому веществу, то есть показатель степени ν_j для сомножителя $y_j^{\nu_j}$ в члене, соответствующем данной простой реакции, равен числу частиц j -того вещества, участвующих в этой реакции.

Для иллюстрации приведен пример системы, построенной по данному алгоритму. Рассмотрим сложную реакцию, состоящую из 6 стадий:



Этой реакции соответствует следующая схема кинетических уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_A}{\partial t} = -2k_1 c_A^2 c_B + 2k_{-1} c_C^3 \\ \frac{\partial c_B}{\partial t} = -k_1 c_A^2 c_B + k_{-1} c_C^3 + 3k_2 c_C^2 c_D - 3k_{-2} c_B^3 - 2k_3 c_B^2 c_D + 2k_{-3} c_P^2 \\ \frac{\partial c_C}{\partial t} = 3k_1 c_A^2 c_B - 3k_{-1} c_C^3 - 2k_2 c_C^2 c_D - 2k_{-2} c_B^3 \\ \frac{\partial c_D}{\partial t} = -k_2 c_C^2 c_D + k_{-2} c_B^3 - k_3 c_B^2 c_D + k_{-3} c_P^2 \\ \frac{\partial c_P}{\partial t} = 2k_3 c_B^2 c_D - 2k_{-3} c_P^2 \end{cases}$$

В случае большого числа компонент химической реакции написание системы ОДУ связано с определенными сложностями: большой объем системы химических уравнений дает большую систему ОДУ, правильность формирования которой отследить практически невозможно. Решение этих вопросов лежит на пути написания специализированного транслятора, сочетающего в себе приведенный выше алгоритм и классические алгоритмы трансляции.

В § 3 представлен обзор технологий создания программных пакетов. Приведены методы структурного и объектно-ориентированного анализа и проектирования программного обеспечения. Изложены преимущества языка UML при использовании объектно-ориентированного анализа и проектирования программного обеспечения. Описана поэтапная схема создания программного пакета и приведено сравнение

передовых технологий создания программного обеспечения таких как Rational Unified Process, технология компании Oracle, технология компании Borland. Выполнен обзор объектно-ориентированных языков программирования применительно к поставленной задаче.

Во **второй главе** диссертации изложена технологическая цепочка численного решения класса прямых задач химической кинетики.

Прямые задачи химической кинетики решаются исследователем посредством задания химических реакций для реагентов, получения систем ОДУ для реакций и численного интегрирования этих систем. Технологическая цепочка численного решения прямых задач химической кинетики состоит из 5 пунктов представленных на Рис. 1.

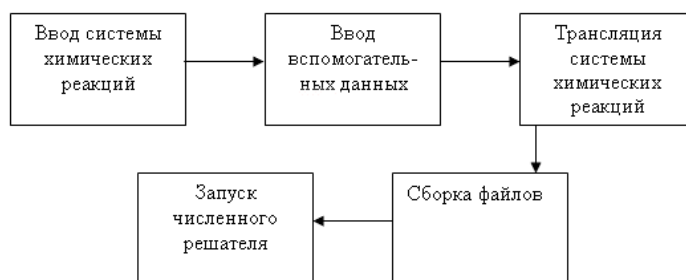


Рис. 1. Технологическая цепочка численного решения прямых задач химической кинетики.

На рисунке 2 представлена схема разработанного программного пакета СНЕМРАК, реализующего решение класса прямых задач химической кинетики по приведенной на Рис. 1 технологической цепочке.

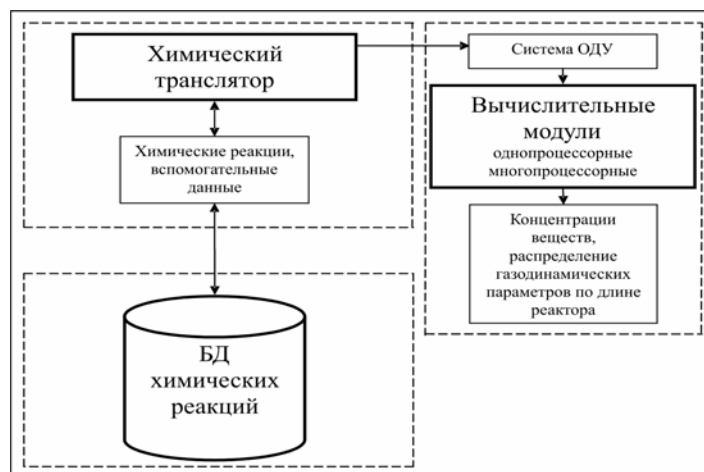


Рис.2. Схема программного пакета ChemPAK

Изложено обоснование выбора программных средств реализации, описание модулей разработанного программного пакета.

В § 1 приведены средства проектирования и реализации программного пакета с описанием технологии создания программного пакета CHEMPAK. Обоснован выбор средств проектирования и реализации.

В § 2 дано изложение созданной базы данных пакета CHEMPAK. Приведена модель базы данных в стандарте IDEF1X и структура основных таблиц на примере системы химических реакций, описывающей схему пиролиза этилена.

В § 3 описан транслятор химических реакций, являющийся ядром программного пакета CHEMPAK. Приведена функциональная схема транслятора, подробно описан интерфейс. Представлен фрагмент модуля работы с базами данных сторонних производителей. Приведены форматы выходных файлов транслятора и примеры файлов описывающих систему ОДУ, соответствующую системе химических реакций «Пиролиз этилена». Описана работа пользователя с транслятором. Приведены результаты тестирования транслятора на системах химических реакций различного размера. 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. 3 приведены 2 графика зависимости времени трансляции от количества химических реакций (пунктирная линия - трансляция химических реакций и генерация матрицы Якоби, сплошная линия – только трансляция химических реакций).

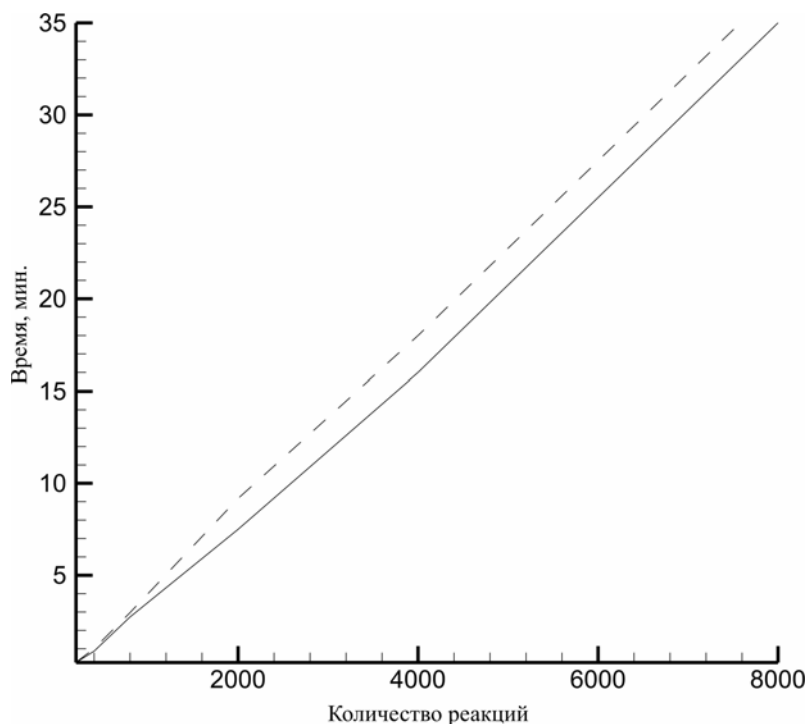


Рис.3. Производительность транслятора химических реакций пакета СНЕМРАК.

Производительность, показанная транслятором, превосходит более чем в 2 раза большинство используемых программных пакетов.

В § 4 описаны вычислительные модули, входящие в состав пакета. Приведены два вычислительных модуля для решения

жестких систем ОДУ и один модуль для решения нежестких систем ОДУ.

В § 5 описана работа пакета СНЕМРАК в связке последовательный компьютер – параллельный компьютер.

В **третьей главе** приведен пример практического использования созданного пакета СНЕМРАК для численного решения прямых задач химической кинетики при моделировании физико-химических процессов в химическом реакторе [1,2]. Приведена математическая модель газодинамического реактора с вводом энергии в виде излучения, в рамках которой проводилось численное решение.

В § 1 представлены результаты расчетов для задачи пиролиза легких углеводородов на примере пиролиза этилена. Показано влияние расхода и состава газовой смеси на параметры системы.

В § 2 приведены результаты расчетов для задачи разложения метана. Представлены 2 схемы разложения метана: схема Касселя и схема дегидроконденсации метана в неравновесных условиях. Для схемы Касселя получено численное решение и установлено влияние химических реакций на параметры системы.

В § 3 приведены результаты численного решения прямых задач химической кинетики на параллельных суперкомпьютерах. Продемонстрирована эффективность использования генератора параллельного кода для получения параллельного кода решателя из нескольких вариантов входных данных и последовательного кода решателя. Также приведена схема работы пакета в итеративном режиме с использованием параллельных суперкомпьютеров.

В **заключении** представлены основные результаты и выводы, полученные в работе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе создан и реализован многомодульный программный пакет СНЕМРАК, предназначенный для численного решения прямых задач химической кинетики в сетевой среде из последовательных и параллельных

суперкомпьютеров. Программный пакет состоит из базы данных химических реакций, химического транслятора и вычислительных модулей.

Созданный программный пакет отличается:

1. Наличием легко расширяемой базы данных химических реакций и вспомогательных химических данных с возможностью сетевого доступа к данным.
2. Наличием открытой архитектуры для пополнения пакета однопроцессорными и многопроцессорными вычислительными модулями.
3. Наличием программного интерфейса поиска химических реакций в базе данных по шаблону с возможностью занесения поисковой выборки в новую систему химических реакций в рамках единого программного интерфейса пакета.
4. Наличием программного интерфейса взаимодействия с базами данных сторонних разработчиков.
5. Наличием различных форматов входных и выходных файлов пакета для обеспечения возможности работы с различными типами вычислительных модулей (модули, встроенные в интерфейс пакета, модули в виде внешних программ, как на последовательных, так и на параллельных суперЭВМ).
6. Наличием генератора параллельного кода для численного решения прямых задач химической кинетики на параллельном суперкомпьютере.
7. Наличием возможности встраивания полученной в результате трансляции системы ОДУ и вспомогательных данных в пакет программ по моделированию протопланетного диска на суперЭВМ.

Таким образом, разработанный пакет решает следующий ряд задач

- ввода и изменения системы уравнений большого, свыше 1000, числа химических реакций в общепринятой в химии нотации,
- проверки корректности записанной системы уравнений химических реакций,

- нахождения для заданной системы уравнений химических реакций правых частей ОДУ, которые должны быть записаны в универсальной нотации для вычислительных методов, эффективно работающих как на персональных компьютерах, так и на параллельных супер-ЭВМ,
- создания итеративного режима работы с возможностью проверки решений укороченных систем ОДУ на однопроцессорных ЭВМ,
- представления полученного блока решения системы ОДУ для химических реакций в виде программного модуля, встраиваемого в программы решения систем уравнений математической физики, моделирующих на одно- и многопроцессорных ЭВМ изучаемые процессы.

Программный пакет успешно прошел тестирование на задачах моделирования пиролиза легких углеводородов, конверсии метана.

Автор выражает благодарность научному руководителю д.ф.-м.н. Виталию Андреевичу Вшивкову за постоянное внимание к работе. Автор также благодарит к.ф.-м.н. Снытникову Валерию Николаевича (ИК СО РАН) за постоянную помощь в работе.

Список опубликованных работ

1. Вшивков В.А., Склад О.П. Снытников В.Н., Черных И.Г. Применение пакета СЧЕМПРАК при моделировании газодинамического реактора // Вычислительные Технологии, Т. 11, №1, 2006, с. 35-51
2. Вшивков В.А., Снытников В.Н., Черных И.Г. Использование современных информационных технологий для численного решения прямых задач химической кинетики // Вычислительные методы и программирование, 2005, т.6, №2, с. 71-76.

3. Вшивков В.А., Снытников В.Н., Черных И.Г. Программный пакет для решения задач физико-химической газовой динамики // Научный вестник НГТУ, 2005, Т.2(20), с. 47-56
4. Черных И.Г. Численное решение прямых задач химической кинетики с использованием суперкомпьютеров // Труды конференции молодых ученых, Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2006 (в печати)
5. Черных И.Г. Прикладной программный пакет для решения прямых задач химической кинетики // Труды конференции молодых ученых, Новосибирск: Изд. ИВМиМГ СО РАН, 2005, с. 202-210
6. Вшивков В.А., Скляр О.П. Снытников В.Н., Черных И.Г. Численное решение прямых задач химической кинетики для астрокатализа // Международное рабочее совещание «Происхождение и эволюция биосферы». Тезисы докладов, с. 151-152, Новосибирск: Изд. ИК СО РАН, 2005
7. Скляр О.П. Снытников В.Н., Черных И.Г. Моделирование «бесстеночного» газодинамического реактора с лазерным вводом энергии // 2-я Международная Школа - конференция молодых ученых по катализу. Сборник тезисов, с. 301, Новосибирск – Алтай: Изд. ИК СО РАН, 2005
8. Скляр О.П. Снытников В.Н., Черных И.Г. Программный пакет СНЕМПРАК для решения прямых задач химической кинетики с использованием многопроцессорных ЭВМ // 2-я Международная Школа - конференция молодых ученых по катализу. Сборник тезисов, с. 325-326, Новосибирск – Алтай: Изд. ИК СО РАН, 2005

9. Черных И.Г. Прикладной программный пакет для решения задач физико-химической газовой динамики // Материалы XLIII Международной Студенческой Конференции «Студент и научно-технический прогресс»: информационные технологии, с. 139-140, Новосибирск: Изд. Новосибирского госуниверситета, 2005