

После электрорафинирования стадии пирохимической переработки СНУП ОЯТ в катодном осадке наряду с тяжелыми актинидами, содержится кадмий, который необходимо устранить. Операцию отгонки кадмия из катодного осадка предполагают проводить методом вакуумной дистилляции [1] в защитной камере с инертной атмосферой (аргон). Модуль разрабатывалась для опытного образца аппарата отгонки кадмия.

При разработке математической модели составлены классификация основных переменных и информационная структура модели, определено ее назначение, приняты допущения и составлено математическое описание. Математическое описание модели получено на основе условий фазового равновесия в системе жидкость-пар, закона Дальтона-Рауля, термодинамических закономерностей, материального и теплового балансов в виде систем дифференциальных и алгебраических уравнений с решением их численными методами [1, 2]. К основным переменным, характеризующим процесс относятся массы исходного сплава, кубового остатка и дистиллята; массовый расход пара на выходе конденсатора; концентрации компонентов в исходном сплаве, кубовом остатке, дистилляте и вторичном паре на выходе конденсатора; остаточное давление в аппарате; температуры исходного сплава, кубового остатка и дистиллята соответственно; мощности электронагревателей в зоне испарения и конденсации.

В дальнейшей работе планируется провести исследование адекватности разработанной математической модели с использованием среды Matlab.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дытнерский Ю.И. Процессы и аппараты химической технологии, часть 2 - Массообменные процессы и аппараты, - М.: Химия, 1995. - 366 с.
2. Френкс Р. Математическое моделирование в химической технологии. - М.: Химия, 1971. - 272с.

МОДУЛЬ РЕШАТЕЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

К.А. Мамаев, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: art707@tpu.ru

Для синтеза новых материалов с заданными свойствами применяется компьютерное моделирование с использованием различных методов расчета. Такой подход позволяет сократить затраты на экспериментальные исследования.

С точки зрения использования вычислительных ресурсов и памяти моделирование свойств материалов на молекулярном уровне представляет собой высокоинтенсивную и объемную задачу. Процесс моделирования занимает значительное время. В целях оптимизации времени моделирования возможно применение параллельных вычислений.

Суть параллельных вычислений заключается в одновременном выполнении независимых друг от друга подзадач одной общей задачи. Параллельность вычислений на современных компьютерных системах позволяет реализовать параллельная архитектура процессоров. Наибольший интерес представляет GPU (от англ. Graphic Processor Unit) или же графический процессор, который наиболее приспособлен для выполнения параллельных алгоритмов. Существует несколько программных решений, позволяющих реализовывать собственные алгоритмы на графических процессорах, однако, наибольшее распространение получила CUDA (от англ. Compute Unified Device Architecture).

При рассмотрении методов моделирования свойств материалов, в частности, метода Хартри-Фока-Рутаана, можно однозначно и явно выделить этап наиболее интенсивных расчетов – это расчет двухэлектронных интегралов [1]. Количество необходимых для расчета двухэлектронных интегралов может исчисляться тысячами в зависимости от сложности молекулы. Использование параллельных алгоритмов расчета этих интегралов позволяет сократить временные затраты на этом этапе [2].

В результате было разработано программное обеспечение, которое рассчитывает двухэлектронные интегралы с использованием графического процессора. На базе программного обеспечения также решаются задачи оптимизации использования ресурсов при расчетах. Полученные результаты используются в дальнейшем для исследования свойств изучаемых материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Peter M. W. Gill, Martin Head-Gordon, John A. Pople // An efficient algorithm for the generation of two-electron repulsion integrals over gaussian basis functions // International Journal of Quantum Chemistry, 1989, Volume 36 Issue S23, Pages 269 – 280.
2. Ufimtsev, I., Martinez, T.: Graphical processing units for quantum chemistry. Computing in Science Engineering 10(6), 26–34 (2008).

ОПИСАНИЕ И РАЗРАБОТКА СРЕДСТВ МОДЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ПО БАЛАНСИРОВКЕ НАГРУЗКИ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

А.Е. Нагиев¹, А.И. Шерстнёва¹, И.А. Ботыгин¹, Н.Ю. Галанова²

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050,

² Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050,

E-mail: andrew_nagiev09@mail.ru

Последние годы все более активно развиваются распределенные вычислительные системы (РАС) [1, 2]. Эти системы представляют собой множество территориально распределенных вычислителей, с помощью которых решаются проблемы выполнения вычислительно-емких задач, допускающих параллельную обработку. Преимуществом РАС является возможность быстрого наращивания производительности за счет динамического подключения дополнительных вычислительных узлов. Однако, такие системы имеют ряд недостатков: сложность обеспечения эффективного распределения нагрузки между узлами, ненадежность каналов связи и другие. [3]

В настоящем докладе рассматриваются результаты модельного эксперимента по динамической балансировке (динамическое подключение дополнительных вычислителей) нагрузки (БН) в РАС, эффективная реализация которой позволяет программно повысить производительность системы.

При проведении программного эксперимента была спроектирована РАС, которая состоит из:

- 1) Имитатора терминалов, посылающего запросы на обработку в отдельных потоках.
- 2) Специального буфера запросов, который накапливает принятые запросы и формирует очередь для дальнейшей их обработки системой. После обработки каждый запрос удаляется.
- 3) Основного центра управления (ОЦУ), задача которого состоит в обработке хранящихся в буфере запросов. Запросы обрабатываются в порядке поступления.