

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.

4) Диспетчеров, которые динамически подключают дополнительные центры управления (ДЦУ) и перераспределяет хранящиеся в буфере запросы между ними.

5) Дополнительных центров управления, которые запускаются диспетчерами и представляют собой дополнительные вычислители. ДЦУ предназначены для обработки поступающих от диспетчеров запросов. После обработки полученных запросов ДЦУ закрываются.

С повышением частоты отправки запросов от имитатора, ОЦУ не успевает обрабатывать поступающие запросы, что приводит к тому, что они начинают накапливаться в буфере. При достижении определенного (задаваемого программно) количества хранимых запросов в буфере, начинают работу в отдельных потоках диспетчеры. Они динамически, также в отдельных потоках, запускают дополнительные центры управления, задача которых сводится к обработке хранимых в буфере запросов. Количество ДЦУ ограничивается частотой поступления запросов для обработки и наличием дополнительных вычислительных мощностей в системе. Дополнительные центры управления увеличивают быстродействие распределенной вычислительной системы до требуемого уровня.

Описанный метод динамического подключения ресурсов позволяет значительно повысить производительность и гибкость системы, которая, в отличие от системы с классическим серверным решением, способна работать при значительном повышении частоты поступающих на обработку запросов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Э. Таненбаум, М. ван Стеен. Распределенные системы. Принципы и парадигмы – СПб.: Питер, 2003. – 877 с.
2. Введение в распределенные системы // НОУ «ИНТУИТ» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.intuit.ru/studies/courses/1115/177/lecture/4778>. – 11.02.16.
3. Косяков М.С. Введение в распределенные вычисления. – Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2014. – 155 с.
4. Исследование стратегий балансировки нагрузки в системах распределенной обработки данных // КиберЛенинка [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://cyberleninka.ru/article/n/issledovanie-strategiy-balansirovki-nagruzki-v-sistemah-raspredeleynoy-obrabotki-dannyh>. – 23.11.15.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ФИЛЬТРАЦИИ КАДМИЯ

В.С. Нефедов, В.А. Малиновская, О.В. Егорова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: nefedov.vs@gmail.com

В процессе проектирования узла в новой технологической цепочке необходимо учитывать его соответствие поставленным задачам, требованиям безопасности, а также экономической целесообразности. В виду уникальности разрабатываемого объекта, использование в качестве него типового элемента не представляется возможным. Для подбора оптимальных конструкционных параметров и проверки функционирования будущего узла технологической цепочки разрабатывается математическая модель.

Настоящая работа посвящена разработке математической модели технологического процесса фильтрации расплава кадмия стадии пирохимической переработки ШУП ОЯТ для программного комплекса «Код оптимизации и диагностики технологических процессов», предназначенного для имитации работы технологической схемы ПЯТЦ с целью исследования работоспособности, управляемости и оптимизации как отдельных процессов, узлов и установок, так и технологической схемы ПЯТЦ, а также систем контроля и управления элементами схемы и ПЯТЦ в целом.

Объект моделирования представляет собой фильтр, т.е. емкость с фильтровальной перегородкой, которая пропускает через себя фильтрат и задерживает на своей поверхности осадок из примесей - продуктов