

УДК 621

АВТОМАТИЗАЦИЯ И СИСТЕМЫ
УПРАВЛЕНИЯ

А.В. ГУЛЯН

**АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СО
СТОХАСТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКОЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

Описана функциональность и архитектура автоматизированной системы и ее подсистем для исследования процессов со стохастической динамикой взаимодействия. Предложены различные алгоритмы, реализованные в подсистеме управления.

Ключевые слова: стохастическая динамика взаимодействия, параллельные алгоритмы, автоматизированная система.

Функциональность автоматизированной системы. В связи с ростом производительности современных вычислительных систем и развитием средств параллельного программирования появляется возможность численного моделирования и исследования задач астрофизики, газодинамики, квантовой химии, требующих претенциозных вычислений и больших вычислительных ресурсов. Одной из задач квантовой химии является исследование процесса многоканального рассеяния в системе взаимодействующих тел. Аналитическое решение задачи пока не найдено, поэтому возникла необходимость численного моделирования, что требует больших вычислительных ресурсов и применения различных методов для исследования процессов со стохастической динамикой взаимодействия [1,2].

Для полноценного и всеобъемлющего исследования и анализа процессов со стохастической динамикой взаимодействия в [3] предложено математическое обеспечение, которое позволяет:

- моделировать различные поверхности бимолекулярных химических реакций и строить геодезические траектории на данных поверхностях;
- производить преобразование координатных систем;
- применять различные методы на реальной задаче и сравнивать результаты вновь добавленных собственных методов с существующими;
- применять данную систему с целью сравнительного анализа и сопоставления различных алгоритмов;
- использовать уникальные модели системы и схемы распараллеливания для эффективного отображения системы под конкретные многопроцессорные системы;
- визуализировать полученные результаты и производить статистический анализ модели, метода, алгоритма.

Весь вышеописанный функционал заложен в основу **автоматизированной системы** для исследования процессов со стохастической динамикой взаимодействия.

Пример системы со стохастической динамикой взаимодействия. Для исследования конкретных квантовых процессов со стохастической динамикой взаимодействия, предложенных в [1,2], описана модель универсальной энергетической поверхности (потенциала взаимодействия) и дается геодезическая траекторная задача, расширенная в комплексной области.

В результате анализа геометрических и топологических особенностей разных двумерных реакционных поверхностей выбран модельный потенциал, предложенный в [2]:

$$U(u,v)=U_1(u)\left[A(u)+(C(u)+G(u)v+a(u)v^2)\exp(-2a(u)v)-B(u)\exp(-\beta(u)v)\right], \quad (1)$$

где u, v – координаты криволинейной системы; $U_1(u), A(u), C(u), G(u), a(u), \beta(u), B(u)$ и $\beta(u)$ – функции зависимости от одной из криволинейных координат u , которые имеют вид

$$F(u)=C_{i-}+\frac{C_{i+}-C_{i-}}{1+\exp(-2g_{C_i}u)}+\frac{C_{i0}g_{C_i}^2}{\left[\exp(g_{C_i}u)+\exp(-g_{C_i}u)\right]^2}, \quad i=1,\dots,8, \quad (2)$$

$C_{i-}, C_{i+}, C_{i0}, g_{C_i}$ – подгоночные параметры.

Рассмотренная модель (1) представляется следующим образом:

$$U=U(u, v, C), \quad (3)$$

где C – вектор подгоночных параметров;

Вычисленная двумерная реакционная поверхность посредством модельного потенциала (1) используется при решении геодезической траекторной задачи (2).

На этой стадии решается система из четырех нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка или восьми нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с начальными условиями (2).

Начальные условия задачи следующие:

$$\begin{aligned} x_{R0}^1, x_{R;so}^1 &= u_0, x_{30}^1, x_{3;so}^1 = \bar{u}_0, x_{R0}^2, x_{R;so}^2 = v_0, x_{30}^2, x_{3;so}^2 = \bar{v}_0, \\ x_{R0}^1, x_{R;so}^1 &= u_0, x_{30}^1, x_{3;so}^1 = \bar{u}_0, x_{R0}^2, x_{R;so}^2 = v_0, x_{30}^2, x_{3;so}^2 = \bar{v}_0. \end{aligned}$$

Для представления решения вышеуказанной системы опишем ее, используя следующие обозначения: U – потенциал, который описывается уравнением (1), соответственно $x_R^1 = u$ и $x_R^2 = v$. Используя следующие обозначения, потенциал примет вид: $U(u, v) = U(x_R^1, x_R^2)$.

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{aligned}
& \mathbf{u} = \mathbf{x}_{R;s}^1, \\
& \bar{\mathbf{u}} = \mathbf{x}_{S;s}^1, \\
& \mathbf{u}_s = -\frac{\mathbf{E} - \mathbf{U}}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{u}^2 - \bar{\mathbf{u}}^2] - 2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{u}\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{v}}] + \right. \\
& \left. + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{v}^2 - \bar{\mathbf{v}}^2] \right\} + \\
& + \frac{\varepsilon}{[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}} - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\bar{\mathbf{u}}\mathbf{v} + \mathbf{u}\bar{\mathbf{v}}] + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} \mathbf{v}\bar{\mathbf{v}} \right\}, \\
& \bar{\mathbf{u}}_s = -\frac{\mathbf{E} - \mathbf{U}}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}} - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\bar{\mathbf{u}}\mathbf{v} + \mathbf{u}\bar{\mathbf{v}}] + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} \mathbf{v}\bar{\mathbf{v}} \right\} - \\
& - \frac{\varepsilon}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{u}^2 - \bar{\mathbf{u}}^2] - 2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{u}\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{v}}] + \right. \\
& \left. + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{v}^2 - \bar{\mathbf{v}}^2] \right\}, \\
& \mathbf{v}_s = -\frac{\mathbf{E} - \mathbf{U}}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{u}^2 - \bar{\mathbf{u}}^2] - 2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{u}\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{v}}] - \right. \\
& \left. - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{v}^2 - \bar{\mathbf{v}}^2] \right\} + \\
& + \frac{\varepsilon}{[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\bar{\mathbf{u}}\mathbf{v} + \mathbf{u}\bar{\mathbf{v}}] - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} \mathbf{v}\bar{\mathbf{v}} \right\}, \\
& \bar{\mathbf{v}}_s = -\frac{\mathbf{E} - \mathbf{U}}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\bar{\mathbf{u}}\mathbf{v} + \mathbf{u}\bar{\mathbf{v}}] - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} \mathbf{v}\bar{\mathbf{v}} \right\} - \\
& - \frac{\varepsilon}{2[(\mathbf{E} - \mathbf{U})^2 + \varepsilon^2]} \left\{ \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{u}^2 - \bar{\mathbf{u}}^2] + 2 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^1} [\mathbf{u}\mathbf{v} - \bar{\mathbf{u}}\bar{\mathbf{v}}] - \right. \\
& \left. - \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{x}_R^2} [\mathbf{v}^2 - \bar{\mathbf{v}}^2] \right\}, \\
& \mathbf{v} = \mathbf{x}_{R;s}^2, \\
& \bar{\mathbf{v}} = \mathbf{x}_{S;s}^2.
\end{aligned} \right\} \tag{4}
\end{aligned}$$

Описание автоматизированной системы. На рис. 1 приведены архитектура и функциональная блок-схема программного комплекса для проведения численного эксперимента с квантовыми системами.

Подсистема ввода-вывода дает возможность выбора методов, описания начальных условий задачи, получения данных от модуля базы данных, выбора локального/удаленного компьютера, схемы распараллеливания на удаленной машине, статистических критериев.

Подсистема работы с базой данных обеспечивает работу с СУБД MySQL. Для работы с базой данных используется технология DAO.

Подсистема преобразования координатных систем обеспечивает следующие преобразования координат: декартовые координаты(косоугольные координаты $\Leftrightarrow$ криволинейные координаты.

Подсистема расчета статистических данных обеспечивает интерпретацию полученных результатов вычислений с помощью статистических критериев регрессионного и корреляционного анализа, т.к. задача нахождения параметров модели потенциала взаимодействия приведена к регрессионному уравнению. В дальнейшем предполагается реализация данной подсистемы, однако сейчас используются известные математические пакеты программ.

Подсистема межмашинного взаимодействия обеспечивает работу с удаленным сервером с использованием протокола XML RPC. Посредством данной подсистемы осуществляется взаимодействие между клиентом и сервером (пересылка начальных данных задачи, получение результатов экспериментов, проверка состояния системы и других служебных функций).

Подсистема отображения и сохранения результатов вычислений ответственна за визуализацию и сохранение результатов в том формате, который выбирает пользователь. Система отображения предназначена для построения различного рода трехмерных и двумерных графиков, однако обладает довольно существенной особенностью. Она связана с системой описания начальных данных, т.е. пользователь может интерактивно определять энергетические поверхности с различными топологическими и геометрическими особенностями и запускать на ней различные задачи.

Подсистема управления расчетом задачи вызывается в случае запуска программы на многопроцессорных вычислительных комплексах. В подсистеме используются различные схемы и алгоритмы распараллеливания, которые описаны в [4]. Наиболее интересной особенностью подсистемы являются различные алгоритмы управления:

- децентрализованный алгоритм применяется для задач с существенной степенью параллелизма. В частности, подобной задачей является построение карты траекторий;
- централизованный алгоритм управляет:
 - очередью задач,
 - распределением задач на основе анализа состояния процесса на вычислительном узле с использованием различных весовых коэффициентов и критериев.

Подсистема вычисления состоит из 4-х модулей, представленных на рис.1. Каждый из этих модулей связан с банком алгоритмов, из которого на основе выбора метода производится загрузка данной процедуры и начинается процесс вычислений.

Вычислительный модуль выполняется на вычислительных узлах многопроцессорной системы.

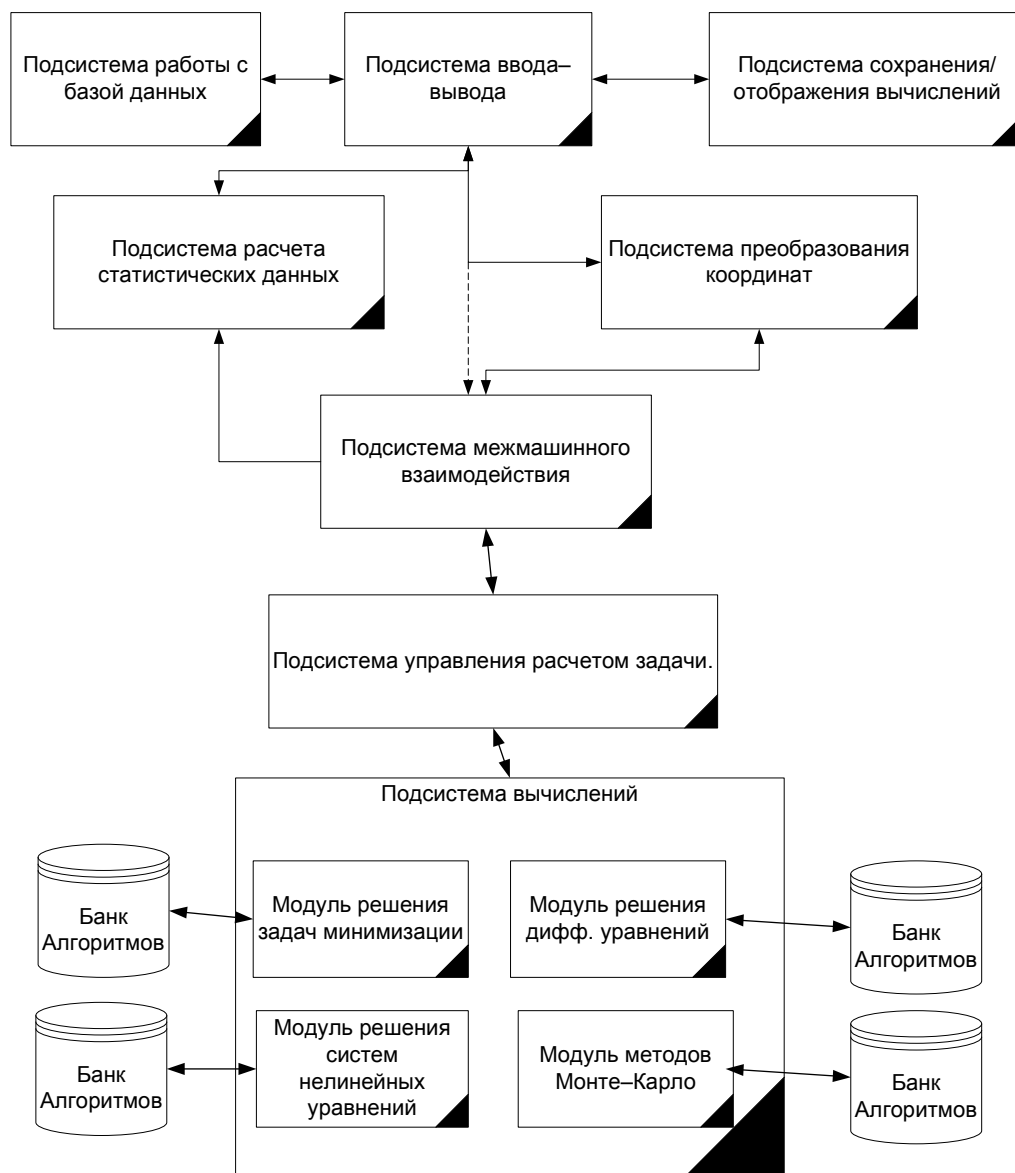


Рис 1. Архитектура автоматизированной системы

Архитектура данного программного комплекса разработана таким образом, что имеется возможность добавления новых моделей, численных методов и алгоритмов и их апробирования на данной конкретной задаче.

Алгоритмы управления. Децентрализованный алгоритм работает следующим образом. На каждом из доступных процессоров создается по два процесса: процесс управления и процесс вычисления. Часть управления, являющаяся платформо-зависимой, полностью отделена от процесса вычисления, который реализован на языке ANSI C, и полностью переносимой. Процесс управления управляет очередью задач, процесс вычисления производит вычисления. Процессы управления связаны между собой виртуальными связями. Логика работы процедуры управления состоит из следующих шагов:

1. Управляющий процесс периодически производит опрос остальных процессов, в ответ получая количество задач, которые должны быть выполнены на опрашиваемом процессоре. После чего производится анализ полученных результатов и перераспределение заданий.
2. При наличии необработанных точек и свободном вычислительном процессе одна из необработанных точек передается последнему для обработки. После окончания обработки вычислительный процесс посылает соответствующее сообщение управляющему процессу, расположенному на одном с ним процессоре.
3. Если необработанных точек нет, управляющий процесс посылает запрос на получение необработанных точек какому-либо другому управляющему процессу.
4. Управляющий процесс переходит к ожиданию альтернативного ввода либо с локального канала, соединяющего его с вычислительным процессом, либо с любого из внешних виртуальных каналов. Он может получить сообщение о том, что локальная точка обработана, может получить сообщение, содержащее запрошенные ранее точки, может получить запрос на предоставление локальных точек другим процессорам.
5. После получения любого из сообщений оно считывается, обрабатывается, и действия 1-5 повторяются.

В работе [5] рассчитывается ускорение данного алгоритма для задачи построения карты траекторий, которая имеет вид, представленный на рис. 2

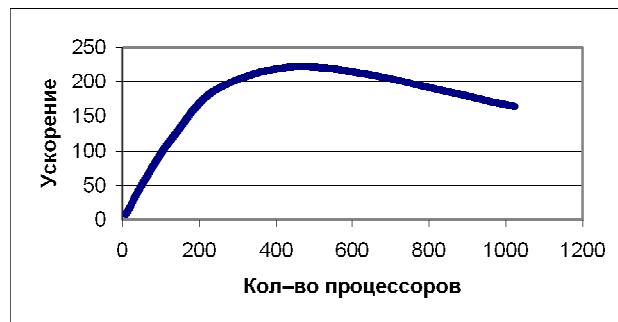


Рис 2. Зависимость ускорения от числа процессоров

При централизованном алгоритме подсистема управления расчетом работает следующим образом:

- все запросы передаются подсистеме и ставятся в очередь со статусом "ГОТОВО";
- из очереди задача с наивысшим приоритетом выбирается и пересылается соответствующему вычислительному узлу на основе следующего критерия:

$$A \cdot \text{sessionCount} + B \cdot \text{memUsage} + C \cdot \text{respTime} \rightarrow \min,$$

где sessionCount – количество задач на вычислительном узле; memUsage – используемая память на вычислительном узле; respTime – время ответа; A, B, C – весовые коэффициенты;

- при выборе из очереди задача ставится в состояние "ОЖИДАНИЕ";
- после обработки задача удаляется из очереди.

Данный алгоритм имплементирован в схеме с диспетчерским управлением [3, 4] при аппроксимации энергетической поверхности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Gevorkyan A.S., Bogdanov A.V.** Three-body Multi-Channel Scattering as a Model of Micro-Irreversible Quantum Mechanics // Proc. of the International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications.– Hilton Hawaiian Village. – 1997. – V.1. – P.693-696.
2. **Gevorkyan A., Ghulyan A., Barseghyan A.** Modeling of the Potential Energy Surface of Regrouping Reaction in Collinear Three-Atom Collision System using Nonlinear Optimization // International Conference Melbourne, Australia and St. Petersburg, Russia, June 2-4, 2003: Proceedings, Springer Verlag LNCS 2659. – 2003. – P. 545-555.
3. **Гулян А.В., Киракосян Г.Т.** Разработка математического обеспечения для бимолекулярных химических реакций // Вестник Инженерной академии Армении. – 2008. – Т.5, №1. – С.98-106.
4. **Ghulyan A.** Parallel algorithms // Information Technologies and Management. – Yerevan: §Encyclopedia – Armenika, 2003. – №1. – P.8-24.
5. **Гулян А.В.** Измерение эффективности параллельных алгоритмов при исследовании процессов со стохастической динамикой взаимодействия // Вестник Государственного Инженерного университета Армении. Сер. Моделирование, оптимизация, управление. – Ереван, 2008. – Вып. 11, том 2. – С.47-52.

ГИУА. Материал поступил в редакцию 15.02.2009.

Ա. Վ. ԴՈՒԼՅԱՆ

ԶՈՒԳԱՆԵՌ ԱԼԳՈՐԻԹՄՆԵՐԻ ԱՐԴՅՈՒՆԱՎԵՏՈՒԹՅԱՆ ԳՆԱՀԱՏԱԿԱՆԸ ՍՏՈԽԱՍՏԻԿ ԴԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ՓՈԽԱԶԴԵՅՈՒԹՅԱՄԲ ԳՈՐԾԸՆԹԱՑՆԵՐԻ ՀԵՏԱԶՈՏՄԱՆ ՀԱՄԱՐ

Տրված է ստոխաստիկ դինամիկական փոխազդեցությամբ գործընթացների հետազոտման համար ավտոմատացված համակարգի ու ենթահամակարգերի ֆունկցիոնալությունն ու ճարտարապետությունը, առաջարկված են տարբեր ալգորիթմներ, որոնք կիրառված են կառավարման ենթահամակարգում:

Առանցքային բաներ. ստոխաստիկ դինամիկական փոխազդեցություն, զուգահեռ ալգորիթմներ ու ավտոմատացված համակարգեր:

A.V. GHULYAN

AUTOMATED SYSTEM FOR INVESTIGATION OF THE PROCESSES WITH STOCHASTIC AND DYNAMIC INTERACTIONS

The functionality and architecture of the automated system and its subsystems for investigation of the processes with stochastic and dynamic interaction are described. Different algorithms which are implemented in a management subsystem are suggested.

Keywords: stochastic and dynamic interaction, parallel algorithms, automated system.