

На правах рукописи
УДК 004.023

ЕВСЕГНЕЕВ ОЛЕГ АНАТОЛЬЕВИЧ

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ
КИНЕТИКИ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРИСТАЛЛАХ
С ПРИМЕНЕНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2012

Работа выполнена на кафедре вычислительной техники в ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», г. Екатеринбург.

Научный руководитель:	кандидат физико-математических наук, доцент Рогович Валерий Иосифович
Научный консультант:	доктор физико-математических наук, доцент Вайнштейн Илья Александрович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, доцент Мелких Алексей Вениаминович доктор технических наук, профессор Зобнин Борис Борисович
Ведущая организация:	Институт математики и механики УрО РАН, г. Екатеринбург

Защита состоится **29 мая 2012 г. в 15:00 часов** на заседании диссертационного совета Д 212.285.13 при ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, аудитория I главного учебного корпуса (зал учебного совета).

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале библиотеки ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Отзыв на автореферат в одном экземпляре, заверенный гербовой печатью, просим направить по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», ученому секретарю УрФУ.

Автореферат разослан

25 апреля 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.285.13,
к. ф.-м. н., доцент

Рогович В.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования

Метод параллельных вычислений используется для моделирования сложных систем уже свыше 30 лет, однако наибольшее распространение данные технологии получили только в последнее десятилетие. Благодаря интенсивному развитию высокопроизводительных кластеров, многоядерных рабочих станций и программно-аппаратной архитектуры на основе графических процессоров, стало возможным решать ресурсоемкие задачи без применения специальных параллельных вычислительных систем (ПВС).

Одной из областей, где необходимы высокопроизводительные вычисления, является изучение кинетических процессов, протекающих в твердых телах. При моделировании релаксационных механизмов в метастабильных системах с изменяющейся во времени концентрацией основных компонентов применяются различные численные методы, которые предполагают проведение громоздких итерационных вычислений. В качестве примера такого процесса можно рассмотреть явление термолюминесценции (ТЛ) в широкозонных материалах. Для генерации модельных кривых ТЛ необходимо решать системы обыкновенных дифференциальных уравнений, которые описывают перераспределение носителей заряда и конкуренцию центров захвата и рекомбинации в возбужденных кристаллах. При изучении кинетики указанных процессов возникает и более комплексная задача идентификации модели ТЛ. Для её эффективного решения применяются эволюционные подходы на основе генетических алгоритмов (ГА), работа которых может занимать значительное время в зависимости от количества варьируемых параметров.

Ещё одной ресурсоемкой задачей в рамках моделирования кинетики ТЛ является проведение вычислительных экспериментов, в ходе которых требуется сгенерировать большое число кривых при варьировании параметров модели. Для её решения можно использовать инструментарий высокоуровневого программирования, позволяющего составлять сценарии расчетов. Генерация множества пиков ТЛ, как и в случае процедуры генетического поиска, может потребовать значительной вычислительной мощности для того, чтобы получить результат в приемлемый срок.

Таким образом, эффективное распараллеливание процедуры генетического поиска и сценариев вычислительного эксперимента является актуальной задачей математического моделирования. Благодаря ускорению расчетов, связанных с работой ГА, становится доступным расширение факторного пространства исследуемых моделей. Перспективным представляется и разработка программ-

ного комплекса (ПК), способного объединить в себе функции информационной системы и средства моделирования процессов ТЛ с использованием ПВС.

Объект исследования. Параллельные алгоритмы генетического поиска моделей ТЛ в кристаллах.

Предмет исследования. Параллельный генетический алгоритм и методы повышения его эффективности для решения задач по моделированию кинетики ТЛ.

Цель работы и задачи исследования. Целью диссертации является разработка и реализация программного комплекса для моделирования кинетических процессов с использованием методов параллельных вычислений. В качестве объекта исследования были выбраны кинетические процессы ТЛ в твердых телах.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. выполнен обзор аналогов программных средств моделирования кинетических процессов и выбран прототип;
2. проведен анализ существующих схем распараллеливания ГА, из которых выбрана наиболее подходящая для исследуемой области;
3. предложен эффективный подход к распределению вычислений ГА, применяемого для параметрической и структурной идентификации моделей ТЛ;
4. выполнено проектирование программного комплекса с веб-сервисной архитектурой для моделирования кинетики ТЛ в кристаллах на ПВС;
5. осуществлена программная реализация спроектированного ПК и проведено его тестирование.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. предложен метод балансировки нагрузки ПВС на основе упорядоченной очереди для процедуры генетического поиска моделей процесса термолюминесценции в кристаллах;
2. разработан механизм распараллеливания сценариев вычислительного эксперимента, составленных с помощью специального высокоуровневого языка;
3. реализована структура программного средства для моделирования процессов ТЛ, которая отличается от структуры прототипа новым блоком распределения вычислений и подсистемой сценариев и позволяет строить математические модели адекватные исследуемому физическому процессу;
4. синтезирована веб-сервисная архитектура параллельного программного комплекса, имеющая в своей основе сервер приложений, который может

быть размещен в глобальной сети в виде сервиса со стандартными внешними интерфейсами и использоваться в рамках идеологии облачных вычислений.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Предлагаемый параллельный ГА с балансировкой на основе упорядоченной очереди эффективно использует ПВС и позволяет значительно снизить время идентификации моделей ТЛ.

2. Подсистема высокоуровневого языка, использующая метод равномерной загрузки ПВС такой же как в параллельном ГА, позволяет значительно ускорить выполнение программ вычислительного эксперимента.

3. Структура разработанного ПК, в отличие от прототипа, включает в себя новые блоки интерпретации программ вычислительного эксперимента и распределения вычислений, которые расширяют функциональность системы и позволяют использовать ПК как на кластерных ПВС, так и на многоядерных рабочих станциях.

4. Веб-сервисная архитектура делает возможным размещение созданного ПК в глобальной сети в виде сервиса со стандартными протоколами взаимодействия, благодаря чему упрощается обслуживание и развитие созданного программного средства.

Практическая значимость работы. Разработанный программный комплекс позволяет проводить идентификацию экспериментальных кривых термолюминесценции одновременно при помощи поиска оптимальных параметров модели и построения системы уравнений, использующих эти параметры. Благодаря использованию метода параллельных вычислений время работы программы значительно снижается, тем самым появляется возможность расширять факторное пространство модели. Время работы генетического поиска сокращается в 14 раз при использовании вычислительного кластера с 16-ю узлами и в 4 раза – при работе на 4-ядерной рабочей станции. Кроме того, предложенный подход к распределению вычислений обеспечивает эффективное распараллеливание сценариев вычислительных экспериментов, составленных с помощью встроенного высокоуровневого языка, включая сценарии ПФЭ.

Применение в составе ПК развитого сервера приложений Zore, созданного в рамках идеологии открытого программного обеспечения, упрощает задачу по модернизации системы и добавлению в неё других кинетических моделей. Веб-сервисный подход, использованный при разработке архитектуры, позволяет интегрировать ПК с внешней информационной системой с помощью известных протоколов.

Имеются два Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ и акт о внедрении разработанного ПК. Созданная система может использоваться в образовательном процессе при обучении студентов физических и информационных специальностей, а также при подготовке научных кадров высшей квалификации.

Апробация работы. Основные результаты и положения исследований докладывались и обсуждались на: VIII международной конференции «Оптоэлектроника, нанотехнологии и микросистемы» (Ульяновск, 2006); международной научно-практической конференции «Снежинск и наука – 2006. Трансфер технологий, инновации, современные проблемы атомной отрасли» (Снежинск, 2006); the 5-th international scientific conference «Chaos and structures in nonlinear systems. Theory and experiment» (Astana, 2006); конференции молодых ученых ГОУ ВПО УГТУ-УПИ (Екатеринбург, 2007); юбилейной научно-практической конференции ФТФ – 60 (Екатеринбург, 2009); Втором Международном форуме по нанотехнологиям (RusNanoTech 09) (Москва, 2009).

Работа частично поддержана в рамках выполнения Государственного контракта по ФЦП «Научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы». Часть результатов получена при выполнении НИР в рамках Государственного контракта по ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2013 годы».

Публикации. По теме диссертации опубликовано 12 научных работ, в том числе 5 статей в научных журналах из перечня ВАК 2005 – 2011 гг. и в материалах международных конференций, а также 2 Свидетельства об официальной регистрации программ для ЭВМ.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы из 92 наименований, 4 приложений и содержит 114 стр. основного машинописного текста, 45 рисунков, 14 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении показана актуальность решаемой проблемы, выделены научная новизна и практическое применение поставленных задач.

В первой главе проведен обзор известных схем распараллеливания ГА и современных программ для моделирования кинетических процессов, осуществлен выбор прототипа. Рассмотрены подходы к созданию программных комплексов с веб-сервисной архитектурой.

В результате аналитического обзора программных пакетов, предназначенных для математического моделирования кинетических процессов родственных ТЛ, в качестве прототипа была выбрана система - Программный модуль «Электронный ГА-конструктор люминесцентных моделей с термоактивной кинетикой» («GenTL») / И.А. Вайнштейн, Е.А. Попко // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2006614299. – Москва, 18.12.2006. Основное достоинство данного инструмента заключается в возможности одновременно проводить структурную и параметрическую идентификацию модели ТЛ при использовании оригинального ГА. Главным недостатком прототипа является отсутствие поддержки параллельных вычислений, что затрудняет дальнейшее развитие процедуры генетического поиска в части увеличения факторного пространства исследуемой кинетической модели. Кроме того, ПК «GenTL» не имеет встроенного инструментария для составления сценариев вычислительного эксперимента, что также сужает его применимость.

Выполнен обзор существующих способов распараллеливания программ для ЭВМ. Проведен анализ распространенных схем распределения вычислений для ГА, включая глобальную, островную, клеточную и гибридную, а также синхронных и асинхронных режимов их работы. Для реализации программного комплекса выбран синхронный глобальный алгоритм, который позволяет получать решение с таким же качеством, как и в случае исходного последовательного ГА. Основным недостатком выбранной схемы является низкая эффективность распараллеливания, связанная с потерей вычислительного ресурса во время простоя узлов ПВС на этапе синхронизации.

Рассмотрен веб-сервисный подход к созданию программного комплекса. В качестве основы для разрабатываемой системы выбран сервер приложений Zore. Данная платформа относится к разряду открытого ПО и благодаря кросс-платформенности может быть использована на различных ПВС, включая кластер «Beowulf» и многоядерные рабочие станции. Ещё одним преимуществом Zore является наличие интегрированной объектной базы данных, которая может использоваться для хранения результатов моделирования и параметров исследуемых кинетических процессов.

Проведен обзор различных средств высокоуровневого программирования, применяемых в распространенных научно-ориентированных математических пакетах. Выполнен анализ синтаксиса языков в таких программных пакетах, как Mathcad, Matlab и Mathematica.

Рассмотрены различные подходы к распараллеливанию программ, составленных с помощью данных систем.

Вторая глава посвящена разработке алгоритма распределения вычислений ГА с использованием процедуры балансировки на основе упорядоченной очереди. Также в этой главе приведены расчеты показателей ускорения при традиционном и предлагаемом подходах к распараллеливанию.

Для распределения вычислений ГА в рамках выбранной глобальной синхронной схемы необходимо использовать параллелизм задач. При генетическом моделировании процессов ТЛ такой задачей является процедура оценки приспособленности особи. В основе этой операции лежит расчет показателя качества аппроксимации FOM, который применяется во многих исследованиях ТЛ-процессов. Функция пригодности f имеет вид:

$$f = FOM = \frac{\sum_{i=1}^n |I_i^{calc} - I_i^{exp}|}{\sum_i^n I_i^{calc}} \times 100\%,$$

где I^{calc} – расчетное значение интенсивности термолюминесценции, соответствующее данному набору параметров, I^{exp} – экспериментальное значение интенсивности, n – количество экспериментальных точек. Таким образом, для определения значения функции пригодности необходимо провести генерацию пика ТЛ. В зависимости от параметров кинетической модели данная процедура может быть выполнена за разное время. На рисунке 1 представлена диаграмма распределения времени оценки для 256 особей из одного поколения, полученная при проведении генетического поиска на однопроцессорной системе. Видно, что время расчета функции пригодности для отдельных особей может различаться в несколько раз. Подобный разброс в скорости оценки приводит к неравномерной нагрузке узлов ПВС на этапе син-

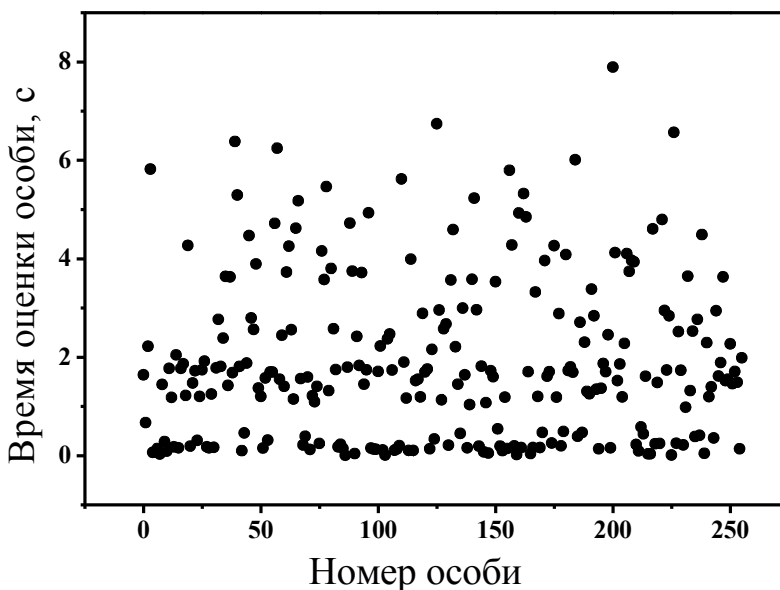


Рисунок 1 – Распределение времени оценки для особей из одного поколения

хронизации ГА, который выполняется каждый раз после расчета очередного поколения.

Схема оценки особей из одного поколения, применяемая в традиционном глобальном ГА представлена на рисунке 2. Согласно данному подходу на начальном шаге (0) производится разделение всего множества особей на $N_p=8$ равных частей и последующая их загрузка в N_p процессоров. Во время дальнейших шагов (1-8) происходит поэтапное высвобождение узлов по мере того как в них не остается необработанных особей. Для того чтобы ГА смог продолжить свою работу, необходимо дождаться момента синхронизации, когда оценка будет проведена для всего поколения. Таким образом, узлы ПВС, которые освободились до момента синхронизации, будут простаивать без нагрузки.

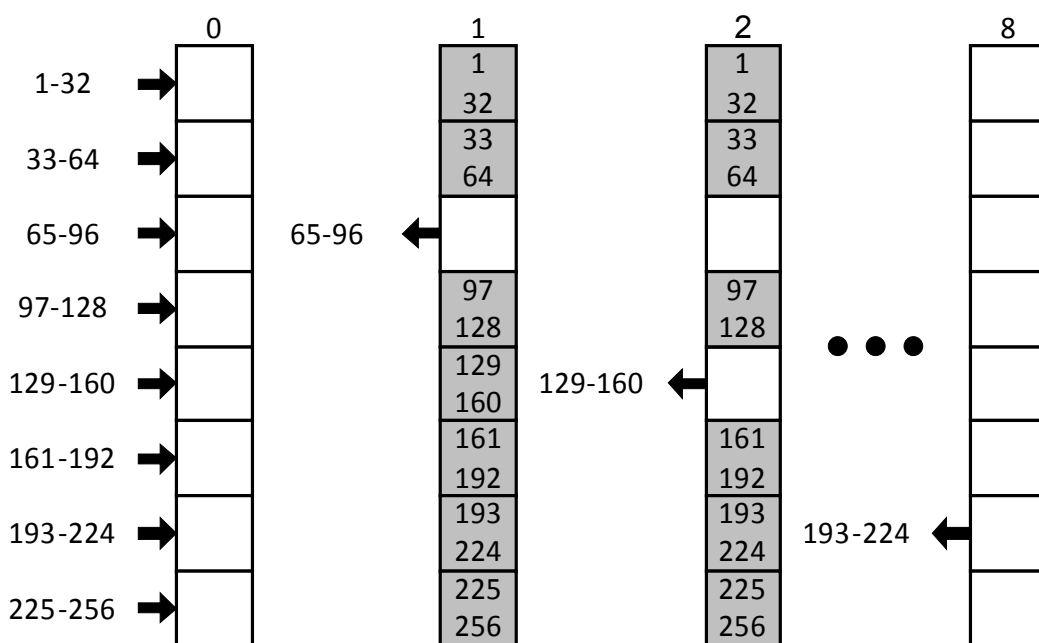


Рисунок 2 – Диаграмма занятости второстепенных узлов ПВС в традиционном алгоритме распределения

Для устранения данного недостатка традиционной схемы распараллеливания ГА был разработан алгоритм балансировки нагрузки между второстепенными узлами на основе очереди. Диаграмма занятости узлов ПВС при использовании предложенного подхода представлена на рисунке 3. На начальном шаге работы программы первые $N_p=8$ особей загружаются в вычислительные ядра, а остальные формируют очередь. По мере высвобождения узлов системы в них немедленно передается следующая особь из общей очереди. В отличие от традиционной схемы, на этапе синхронизации предлагаемого ГА необходи-

мо дождаться расчета всего N_p особей. Благодаря такому решению процессоры нагружаются более равномерно, что приводит к увеличению эффективности работы процедуры генетического поиска на ПВС. Так как механизм балансировки не делает различий в причинах задержки при вычислении функции пригодности, разрабатываемый ПК может применяться и на распределенных системах, которые представляют собой совокупность рабочих станций с разной производительностью.

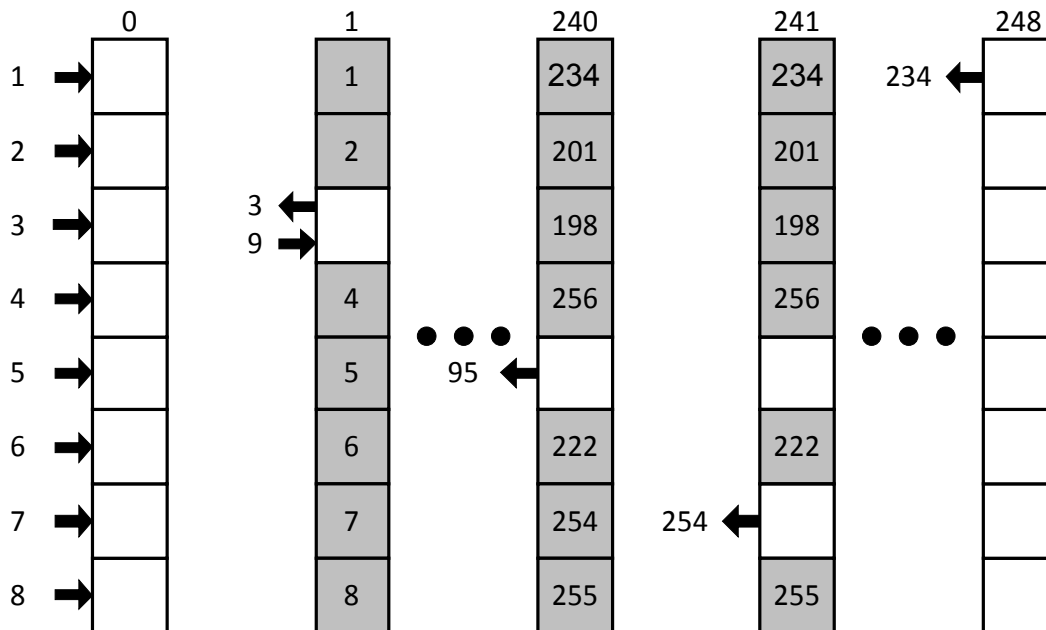


Рисунок 3 — Диаграмма занятости второстепенных узлов ПВС в предложенном алгоритме распределения

С целью анализа влияния, которое оказывает наблюдаемый разброс во времени оценки приспособленности особей на работу параллельного ГА, было проведено моделирование процесса распределения вычислений с помощью оригинального эмулятора ПВС. Используя данный инструмент, выполнен расчет показателя ускорения S_p для традиционного и модифицированного ГА. Вычисления производились при количестве особей в популяции $N_i = 256$, количестве поколений $N_g = 10$ и варьировании размера ПВС $N_p = \{2, 4, 8, 16, 32\}$. График зависимости показателя S_p от количества узлов ПВС представлен на рисунке 4.

Можно заметить, что значения показателя ускорения S_p для предлагаемой схемы распараллеливания ГА превосходят соответствующие значения при использовании традиционного варианта. Кроме того, применение адаптивной балансировки нагрузки узлов при решении задачи со схожими особенностями показывает $S_p(8) = 4.8$ для ПВС с восемью узлами, тогда как в предлагаемом под-

ходе степень ускорения $S_p(8) = 7,5$. Следует так же принять во внимание то, что используемый эмулятор не учитывает время, которое расходуется на коммуникацию между процессорами, а также время, необходимое для выполнения последовательной части ГА.

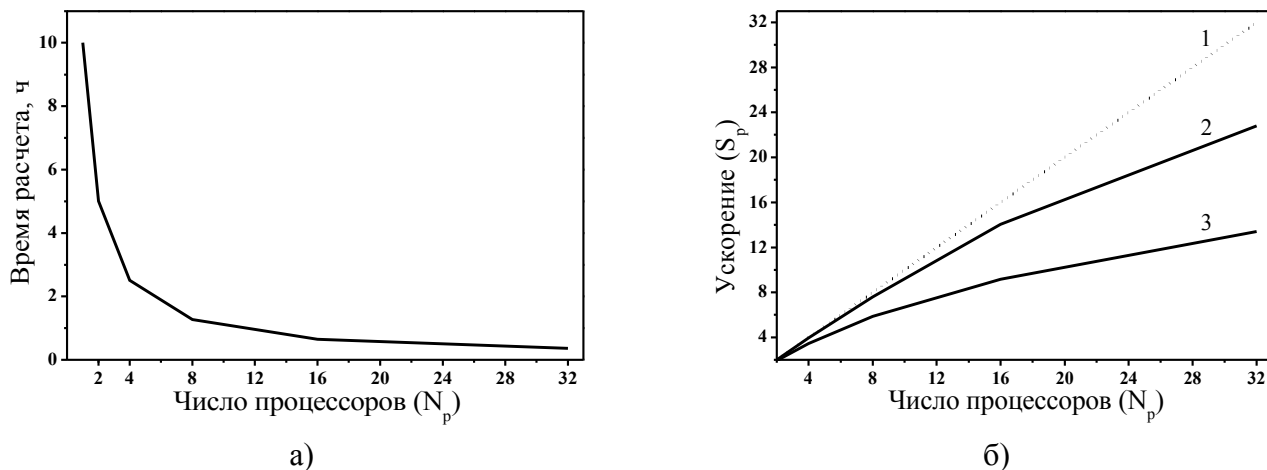


Рисунок 4 – а) время выполнения процедуры генетического поиска.
 б) ускорение работы ГА в зависимости от числа процессоров ПВС. 1 – идеальный случай; 2 – модифицированный параллельный ГА; 3 – традиционный параллельный ГА.

На следующем этапе оптимизации алгоритма распределения вычислений для ГА была разработана процедура предварительной сортировки особей в рамках одного поколения.

Такое упорядочивание возможно только после определения вклада, который вносят параметры модели ТЛ в задержку при расчете функции приспособленности. В результате дробного факторного эксперимента были получены значения коэффициентов функции отклика, которые могут использоваться для ранжирования особей. Выяв-

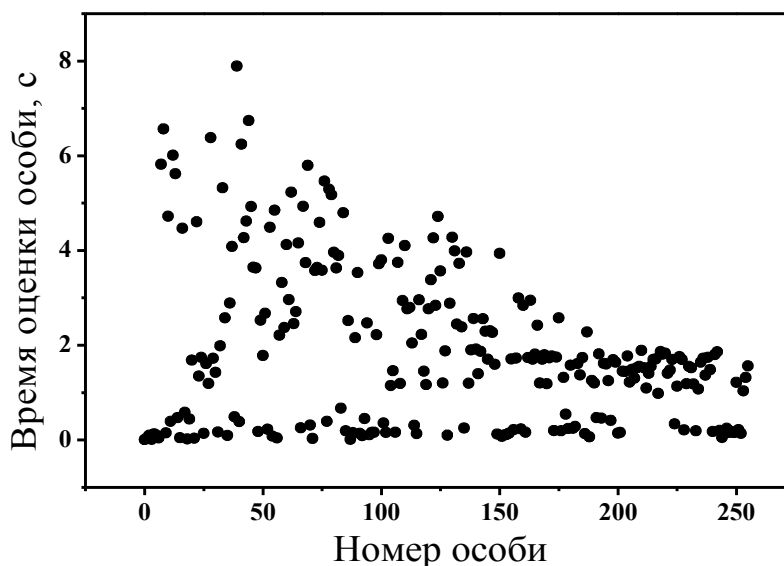


Рисунок 5 – Диаграмма распределения времени оценки для упорядоченной очереди особей

лены параметры, оказывающие наибольшее влияние на скорость генерации кривых ТЛ. На рисунке 5 представлена диаграмма распределения особей одного поколения в упорядоченной очереди. Применение сортировки на основе из-

вестной функции отклика вносит заметный порядок в последовательность особей, благодаря чему наиболее медленные особи распределяются между узлами ПВС первыми. В результате работы улучшенного ГА на эмуляторе ПВС с $N_p=8$ были получены значения показателя ускорения S_p на 6% выше, чем для случая, в котором сортировка не использовалась.

Предложенный алгоритм распределения вычислений ГА используется при выполнении сценариев вычислительного эксперимента, составленных с помощью высокоуровневого скриптового языка. При этом распараллеливанию могут быть подвергнуты только операторы цикла, в теле которых обозначен вызов процедуры генерации кривых ТЛ. На этапе трансляции сценария формируется множество наборов параметров модели ТЛ, которые затем распределяются между узлами ПВС. Данный процесс осуществляется таким же образом, как и в случае расчета приспособленности особей в рамках одного поколения при генетическом поиске. С помощью эмулятора ПВС выполнен сценарий, представленный ниже:

```
report I,t  
Ah[1] = 1E-9  
for Ea[1] in (0.8,1.3,0.1)  
  for An[1] in 1E-7,1E-9,1E-12  
    ra = An[1]/Ah[1]  
  run
```

Результатом работы скрипта является набор кривых 1-ловушечной модели OTOР для различных значений соотношения скоростей захвата и рекомбинации A_n/A_h и различных значений энергии активации E_a . Прогнозируемый показатель ускорения при параллельном выполнении данной программы достигает значения $S_p = 3,9$ при работе на ПВС с 4 узлами.

В третьей главе *представлены основные этапы моделирования ПК, включая определение требований к системе и ее анализ. В ней также рассматриваются проектирование и реализация комплекса.*

В результате анализа структуры прототипа «GenTL» были выделены подсистемы, ответственные за генерацию кривых ТЛ и работу процедуры генетического поиска. На основе полученных сведений была синтезирована структура параллельного приложения (рисунок 6). Центральным элементом структуры является блок управления, который обеспечивает взаимодействие между функциональными элементами программы. Генетический конструктор осуществляет параметрическую и структурную идентификацию моделей ТЛ, реализованных в виде отдельных модулей в общем контейнере моделей. Блок анализа ре-

зультатов производит интерпретацию данных, полученных в результате моделирования.

Для устранения недостатков прототипа в структуру были добавлены два новых элемента. Подсистема скриптового языка производит трансляцию и выполнение сценариев, в которых могут использоваться операторы цикла условного перехода и присваивания. Блок распределения вычислений обеспечивает параллельное выполнение процедуры генетического поиска и сценариев вычислительных экспериментов.

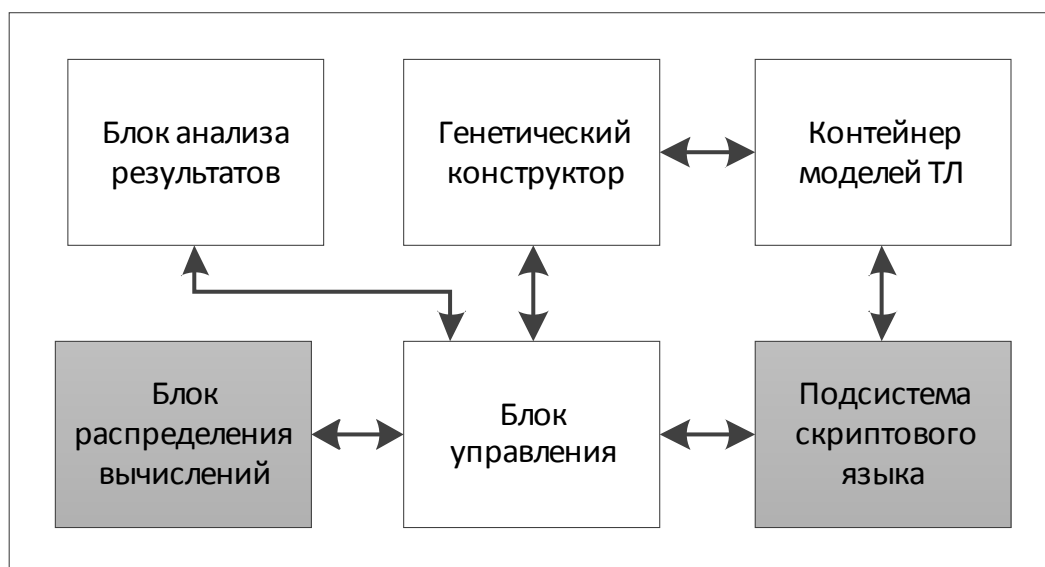


Рисунок 6 – Структурная модель параллельного приложения. Серым цветом обозначены новые блоки.

На следующем этапе была синтезирована веб-сервисная архитектура ПК, одним из элементов которой является параллельное приложение. На рисунке 7 представлен вариант использования ПК без интеграции с внешней информационной системой. В качестве аппаратного сервера в предлагаемом решении выступает головной узел ПВС. На нем размещается платформа Zore, обеспечивающая взаимодействие между параллельным приложением, операционной системой и веб-сервером. Хранение параметров модели ТЛ, результатов работы процедуры параметрической идентификации, а также настроек параллельного приложения осуществляется в объектной базе данных Zore.

Для обмена с внешними потребителями сервиса применяются распространенные протоколы HTTP и SOAP. Такой подход позволяет физически разделить ПК на информационную систему для обслуживания запросов пользователей и средство параллельного моделирования ТЛ на кластерной ПВС. Также

разработана спецификация сервиса на языке WSDL, что упрощает интеграцию ПК со сторонними клиентскими приложениями.

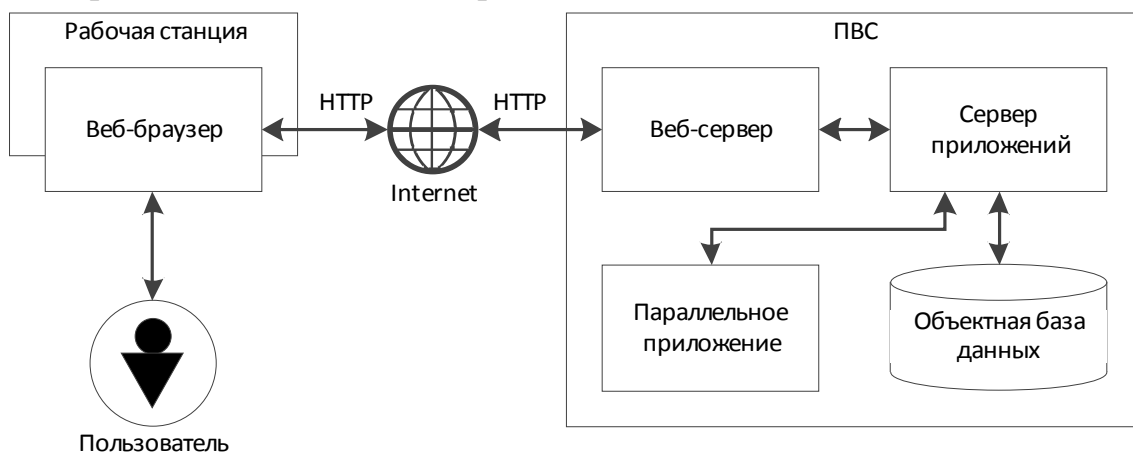


Рисунок 7 – Архитектура разрабатываемого ПК

Основываясь на схеме синхронного глобального ГА и принципах работы подсистемы скриптового языка, были синтезированы алгоритмы, которые отвечают за функционирование параллельного приложения (рисунок 8).

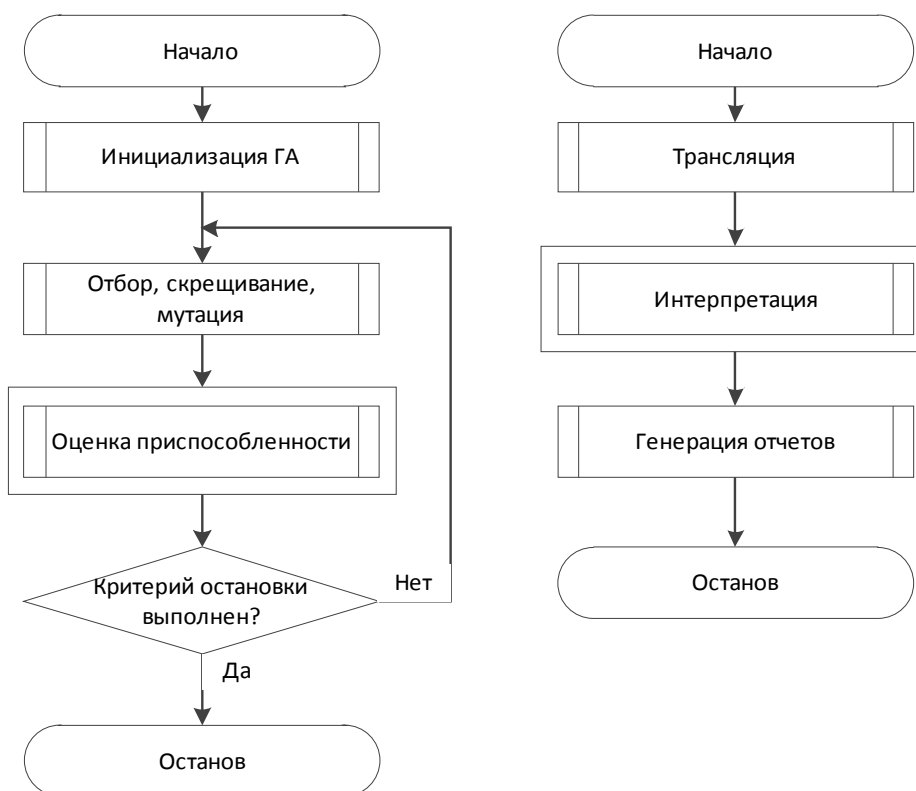


Рисунок 8 – Модифицированный алгоритм прототипа ПК

Процедуры оценки приспособленности в параллельном ГА и интерпретации в алгоритме обработки скриптов подвергаются распараллеливанию с помо-

щью соответствующего блока в представленной ранее структуре приложения. Остальные шаги работы алгоритмов выполняются в последовательном режиме на административном узле ПВС.

Функциональная и информационная модели проектируемой системы были описаны в нотации IDEF. Разработано техническое задание и осуществлено проектирование ПК.

На этапе реализации ПК выполнено программирование параллельного приложения и дополнительных модулей платформы Zore. Для обеспечения механизма распределения вычислений ГА был использован низкоуровневый интерфейс передачи сообщений MPI и распространенные библиотеки на его основе: “WMP11.3” для операционной системы MS Windows и “MPICH2” для Linux. Кодирование приложения производилось на языке c++. Для описания пользовательского интерфейса АРМ использовались веб-ориентированные средства сервера приложения Zore, включая язык разметки DTML и язык Python.

Четвертая глава посвящена тестированию разработанного ПК при помощи процедуры генетического поиска моделей ТЛ с заранее известными параметрами и структурой. В данной главе рассмотрена кинетическая модель ТЛ, позволяющая учитывать неоднородность системы дефектов. В рамках тестирования проведен расчет показателей эффективности распараллеливания ГА на кластерной ПВС и на многоядерной рабочей станции для традиционной и модифицированной моделей ТЛ.

Генетический конструктор «GenTL», применяемый в данной работе, позволяет одновременно проводить оптимизацию структуры модели и значений её параметров. Для этого используется обобщенная кинетическая модель ТЛ, на основе которой при помощи битовых «выключателей» могут быть построены базовые зонные схемы: «Одна ловушка – один рекомбинационный центр», системы взаимодействующих и не взаимодействующих ловушек, а также различные их комбинации. Общее количество параметров, задающих кинетическую модель, может достигать 60 и увеличивается при расширении системы дифференциальных уравнений за счет новых компонентов. Так учет дополнительной активной ловушки приводит к увеличению числа параметров на 6.

Для оценки влияния, которое оказывает размер факторного пространства модели ТЛ на общее время работы ГА, были выполнены тестовые запуски разработанного ПК на кластерной ПВС типа «Beowulf» и на многоядерной рабочей станции. При этом в качестве экспериментальных пиков для процедуры аппроксимации использовались кривые, сгенерированные с заранее известными параметрами.

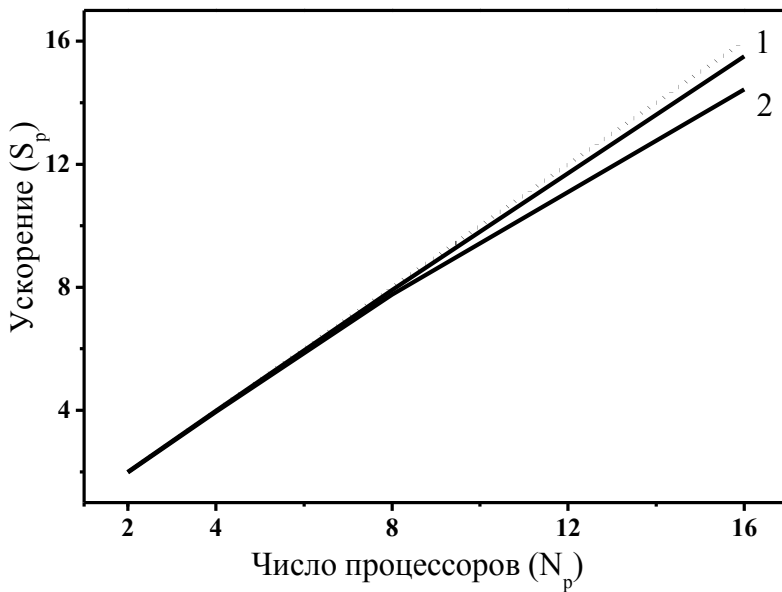


Рисунок 9 – Степень ускорения ГА в зависимости от размера ПВС, на основе реальных замеров; пунктир – идеальное ускорение; 1,2 – расчетное и реальное ускорение соответственно

Из рисунка видно, что реальные значения показателя ускорения S_p отличаются от расчетных. В первую очередь это связано с неучтенными в эмуляторе ПВС задержками на коммуникацию между отдельными элементами вычислительного кластера. Кроме того, снижение эффективности распараллеливания вызвано работой последовательной части программы, что также не учитывалось во время предварительного расчета степени ускорения. Аналогичные тесты были проведены с помощью 4-ядерной рабочей станции. Полученные значения степени ускорения оказались практически идентичны расчетным, что можно объяснить отсутствием в многоядерной системе проблем с коммуникационными задержками.

График зависимости времени выполнения генетического поиска от числа используемых вычислительных ядер для модели OTOR с одной ловушкой пред-

На рисунке 9 представлен график зависимости степени ускорения от числа процессоров, построенный на основе замеров времени работы процедуры структурной и параметрической идентификации для 2-ловушечной модели OTOR без тушения. Были использованы следующие настройки ГА: число особей в популяции $N_i=250$; число поколений $N_g=200$; число варьируемых параметров $R=26$.

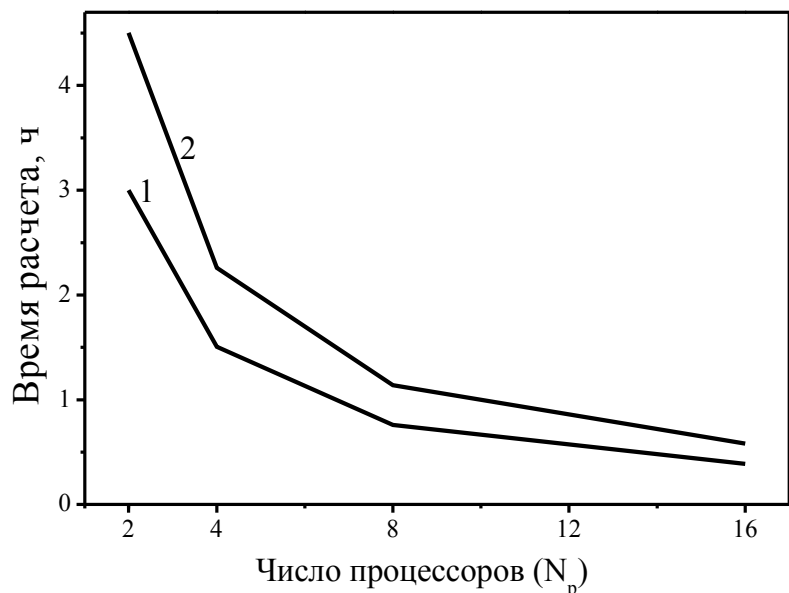


Рисунок 10 – Время работы ГА в зависимости от размера ПВС, на основе реальных замеров. 1,2 – 22 и 34 варьируемых параметров соответственно

ставлен на рисунке 10. Расчет проводился при разных настройках ГА: с варьированием 22 параметров в одном случае и 34 – в другом. Можно заметить, что с увеличением числа используемых процессоров разница во времени расчета при изменении числа оптимизируемых параметров становится менее заметной и составляет всего несколько минут при $N_p=16$.

Для тестирования механизма распределения вычислений при обработке программ вычислительного эксперимента сценарий, указанный в главе 3, был выполнен на рабочей станции с 4-ядерным процессором. Полученное значение показателя ускорения $S_p=3.9$ практически совпадает с расчетным. Для кластера с таким же числом используемых ядер – $S_p = 3.9$.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Разработан программный комплекс, который позволяет проводить идентификацию моделей ТЛ на основе генетического поиска оптимальных параметров моделей с применением методов параллельных вычислений.

2. Проведен анализ существующих программных средств, используемых при решении задач параметрической и структурной идентификации моделей ТЛ-процессов в кристаллах. Выбран прототип разрабатываемого решения – ПК «GenTL». Выявлены его недостатки. Проведен обзор различных подходов к распараллеливанию процедуры генетического поиска. Для использования в разрабатываемом ПК выбран синхронный глобальный ГА. Определен основной недостаток данной схемы, способный снизить эффективность распараллеливания – простой процессоров в момент синхронизации ГА.

3. Для повышения эффективности распараллеливания генетического поиска предложена и реализована процедура балансировки задач на основе очереди для более равномерной загрузки узлов ПВС. Проведены расчеты скорости работы ПК в параллельном режиме с использованием эмулятора загрузки узлов вычислительной системы. Выполнен анализ влияния порядка задач в очереди на степень ускорения и предложены методы, позволяющие повысить эффективность распараллеливания при помощи сортировки очереди. На основе предложенных подходов выполнено алгоритмическое и функциональное описание ПК.

4. Разработана подсистема скриптового языка, которая позволяет составлять и выполнять сценарии вычислительных экспериментов в рамках рассмат-

риваемой проблемы. Выполнение программ, описанных с помощью сценариев, может осуществляться в параллельном режиме с использованием тех же подходов к распараллеливанию, что и в случае работы ГА.

5. Рассчитан показатель ускорения при распараллеливании процедуры генетического поиска на реальных ПВС. При запуске генетического алгоритма на кластере с 16 узлами может достигаться 14-кратное ускорение. На 4-ядерной рабочей станции значение $S_p=3.9$. Схожие результаты получены и при выполнении сценариев вычислительного эксперимента.

6. Практическим результатом исследования является разработка программного комплекса, позволяющего:

- значительно повысить скорость выполнения параметрической и структурной идентификации моделей термолюминесценции по сравнению с основным аналогом GenTL за счет использования параллельных вычислительных систем;
- составлять сценарии вычислительных экспериментов при помощи встроенного скриптового языка и выполнять их на ПВС;
- работать с исследуемыми моделями удаленно, используя для этого веб-ориентированный интерфейс пользователя.

Основные положения диссертации опубликованы в следующих работах:

Статьи в журналах, сборниках и материалах конференций

1. Вайнштейн, И.А. Влияние спектральной размерности на параметры пиков термолюминесценции фрактальных структур [Текст] / И.А. Вайнштейн, О.А. Евсегнеев // Снежинск и наука – 2006. Трансфер технологий, инновации, современные проблемы атомной отрасли: Сборник научных трудов Международной научно-практической конференции. – Снежинск Челябинской области; Издательство СГФТА, 2006. – с. 142 – 144.
2. Weinstein, I.A. The effect of fractal kinetics parameters on the shape of thermoluminescence peaks [Текст] / I.A. Weinstein, O.A.Evsegneevev // Chaos and structures in nonlinear systems. Theory and experiment: Proceedings of the 5-th international scientific conference. – Astana: ENU, 2006. Part 1, pp. 219 – 222.
3. Евсегнеев, О.А. Параллельный генетический алгоритм для моделирования термостимулированных процессов [Текст] / О.А. Евсегнеев, В.И. Рогович, И.А. Вайнштейн // Известия ОрелГТУ "Информационные системы и технологии": №2/52(563), март-апрель 2009, с. 81 – 85.

4. Евсегнеев, О.А. Инструментарий для Open Source-приложения [Текст] // Открытые системы. – 2009. – №4. – с. 34 – 36.
5. Вайнштейн, И.А. Форма термолюминесцентных пиков в наноматериалах при варьировании параметров фрактальной кинетики [Текст] / И.А. Вайнштейн, О.А. Евсегнеев, Д.В. Харитонов. // Информационные системы и технологии: №5/61, сентябрь-октябрь 2010, с. 51 – 57.
6. Евсегнеев, О.А. Использование параллельных вычислений для задач термолюминесцентного анализа [Текст] / О.А.Евсегнеев, И.А.Вайнштейн, В.И.Рогович // Проблемы спектроскопии и спектрометрии: вузовско-академический сборник трудов. Екатеринбург: УрФУ, 2011. Вып. 29. с. 57–62.

Свидетельства о регистрации программ

7. Евсегнеев, О.А. Программный пакет для численного анализа фрактальной кинетики люминесценции в неупорядоченных системах («FracTL») / О.А. Евсегнеев, И.А. Вайнштейн // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2008610206. – Москва, 09.01.2008.
8. Евсегнеев, О.А. Параллельный программный комплекс для моделирования термоактивационных механизмов люминесценции в твердых телах («ParaLum») / О.А. Евсегнеев, В.И. Рогович, И.А. Вайнштейн // Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2009612963. – Москва, 13.08.2009.

Тезисы докладов

9. Вайнштейн, И.А. Применение фрактальной кинетики для моделирования процессов термолюминесценции в наноструктурах [Текст] / И.А. Вайнштейн, О.А. Евсегнеев // Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы: Труды VIII международной конференции. – Ульяновск: УлГУ, 2006. – с. 12.
10. Евсегнеев, О.А. Программный модуль для численного анализа механизмов люминесценции с фрактальной кинетикой в неупорядоченных системах [Текст] / Евсегнеев О.А., Рогович В.И. // Научные труды XIII отчетной конференции молодых ученых ГОУ ВПО УГТУ-УПИ: сборник статей. В 3-х частях. Ч. 3. – Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ-УПИ, 2007. – с. 124 – 125.
11. Евсегнеев, О.А. Адаптивный алгоритм распределения вычислений для решения систем кинетических уравнений [Текст] / О.А. Евсегнеев [и

др.] // Инновационные технологии в атомной энергетике и смежных областях: тезисы юбилейной научно-практической конференции ФТФ – 60 (16-17 апреля, 2009) / отв. за вып. Б.В. Шульгин Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. 180с.

12. Вайнштейн, И.А. «Моделирование механизмов термолюминесценции для многоголовушечных систем в нанокристаллах» [Текст] / И.А. Вайнштейн, О.А. Евсегнеев // Сборник тезисов докладов участников Второго Международного форума по нанотехнологиям (RusNanoTech 09), 6 – 8 октября 2009, Москва, Россия, с. 51 – 53.