

## ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА АППАРАТУРНОГО ОФОРМЛЕНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

А.Б. Борисенко<sup>1</sup>, Д.В. Кутузов<sup>2</sup>, А.В. Осовский<sup>2</sup>

*Кафедра «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ГОУ ВПО «ТГТУ» (1); кафедра «Управление качеством», ГОУ ВПО «Астраханский государственный университет», г. Астрахань (2); andrey@mail.gaps.tstu.ru*

*Представлена членом редколлегии профессором В.И. Коноваловым*

**Ключевые слова и фразы:** глобальная оптимизация; метод ветвей и границ; многоассортиментные химико-технологические системы; оптимальный расчет технологического оборудования; параллельные вычисления; МРІ.

**Аннотация:** Представлен основанный на схеме ветвей и границ параллельный алгоритм оптимального выбора аппаратурного оформления химико-технологических систем. Приведены значения ускорения и эффективности использования процессоров, полученные при решении представленной задачи на вычислительном кластере Тамбовского государственного технического университета.

---

Выбор аппаратурного оформления (АО) химико-технологических систем (ХТС) – одна из основных задач, возникающих при проектировании многоассортиментных малотоннажных химических производств, таких например, как производство красителей, полупродуктов и фотоматериалов, фармацевтических производств [1]. Решением этой задачи является число аппаратов на каждой технологической стадии обработки, а также рабочий объем или площадь рабочей поверхности каждого аппарата. Рабочие объемы и площади рабочих поверхностей обычно выбираются из множества стандартных дискретных значений. Требуется найти оптимальную комбинацию аппаратов из всего множества возможных вариантов, при этом критерием оптимальности, как правило, служат суммарные капитальные затраты на оборудование.

Рассматриваемая задача относится к классу задач частично-целочисленного нелинейного программирования (Mixed Integer Nonlinear Programming – MINLP) [2, 3]. Применение полного перебора вариантов для получения глобального оптимального решения затруднительно из-за большой размерности задачи. Предложенные в литературе подходы к решению этой задачи, например методы Монте-Карло, генетические алгоритмы, эвристические методы, позволяют получить лишь субоптимальные решения [2–4]. Применение параллельных вычислений в задачах глобальной оптимизации дает возможность получить оптимальный вариант за приемлемое время.

Все множество возможных вариантов АО ХТС может быть представлено в виде дерева. Для перечисления всех возможных вариантов используется обход

дерева в глубину. Сокращение числа перебираемых вариантов осуществляется за счет применения алгоритма, основанного на методе ветвей и границ.

Метод ветвей и границ является одним из наиболее популярных методов, который используется для решения оптимизационных задач в таких областях, как, например, комбинаторная оптимизация, искусственный интеллект и т.д. В том числе он используется и для решения задач целочисленного нелинейного программирования [5]. Декомпозиционный характер метода делает его перспективным с точки зрения применения параллельных и распределенных вычислений [6].

Параллельная реализация этого алгоритма, используемая авторами, базируется на использовании парадигмы мастер-работник (*master-worker*) и метода назначаемых поддеревьев [7, 8].

Выделенный процесс, называемый мастер-процессом, управляет равномерным распределением задач по остальным процессам, называемым рабочими. Мастер-процесс осуществляет последовательный обход дерева в глубину только до некоторого яруса, формируя при этом начальные фрагменты системы, после чего по запросу от свободного процесса-работника передает ему полученный начальный фрагмент. Процесс-работник осуществляет обход назначенных ему поддеревьев до полного решения системы. Если процесс-работник находит решение лучше хранимого у него, то происходит передача этого локального оптимального варианта решения мастер-процессу. Далее процесс-работник освобождается и осуществляет запрос нового начального фрагмента системы. В свою очередь, мастер-процесс, получив полное решение от процесса-работника, сравнивает его с имеющимся у него глобальным наилучшим. Если получен лучший результат, он сохраняется, а затем генерируется следующий начальный фрагмент варианта системы. Если мастер-процесс перебрал все возможные варианты начальных фрагментов, и задания для процессов-работников отсутствуют, то при получении запроса от процесса-работника ему отсылается сообщение на завершение работы.

Математическая модель функционирования ХТС, включающая в том числе выражения для проверки ограничений, вычисления критерия оптимизации и т.д., подробно представлена в [9].

С использованием библиотеки MPI и языка программирования C++ была разработана параллельная программа, реализующая данный алгоритм, и проведены численные эксперименты [10].



В качестве тестового примера использовалась ХТС, состоящая из 16 технологических стадий, для каждой стадии которой доступно 5 вариантов основного оборудования. Эксперименты проводились на кластере Тамбовского государственного технического университета [11], состоящего из 8 компьютеров (nodes) на базе процессоров Intel Pentium 4 3.0 ГГц и 2 Гб ОЗУ, один из которых (headnode), является сервером, на базе процессора Intel Pentium 4 3.2 ГГц и 4 Гб ОЗУ, операционная система Scientific Linux 5.3. Все компьютеры кластера объединены в локальную вычислительную сеть Fast Ethernet. Для компиляции программы использовался GCC-4.1.2. Было проведено исследование ускорения и эффективности использования процессоров. Результаты представлены на рисунке.

Разработанная программа показала ускорение, близкое к линейному, обладающее хорошей масштабируемостью. Известным недостатком применения парадигмы мастер-работник является то, что мастер-процесс становится «узким» местом программы при большом числе обслуживаемых им рабочих процессов. Однако в данном случае этого не происходит из-за небольшого числа узлов на кластере (на графике заметно, что эффективность использования процессоров возрастает). Таким образом, параллельный вариант алгоритма выбора оптимального аппаратурного оформления позволяет значительно сократить время расчета по сравнению с традиционным последовательным вариантом и повысить качество проектных решений за счет получения глобального оптимального решения.

*Работа выполнена в рамках государственного контракта № 14.740.11.0961 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы».*

#### *Список литературы*

1. Кафаров, В.В. Гибкие автоматизированные производственные системы в химической промышленности / В.В. Кафаров, В.В. Макаров. – М. : Химия, 1990. – 320 с.
2. Search for Optimal Design of Multiproduct Batch Plants under Uncertain Demand using Gaussian Process Modeling Solved by Heuristics Methods [Electronic resource] / El Hamzaoui, Youness [and others] // Chemical Product and Process Modeling. – 2010. – Vol. 5, Iss. 1, Article 8. – Access Mode : <http://www.bepress.com/cppm/vol5/iss1/8>. – Title Screen.
3. Mixed-Integer Nonlinear Programming Optimization Strategies for Batch Plant Design Problems / Antonin Ponsich [and others] // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2007. – No. 46(3). – P. 854–863.
4. Борисенко, А.Б. Синтез аппаратурного оформления многоассортиментных химико-технологических систем : автореф. дис. канд. ... техн. наук : 05.17.08 / А.Б. Борисенко. – Тамбов, 2000. –16 с.
5. Applications and Algorithms for Mixed Integer Nonlinear Programming / S. Leyffer [and others] // Journal of Physics : Conference Series. – 2009. – Vol. 180, No. 1. – P. 12–14.
6. Посыпкин, М.А. Исследование алгоритмов параллельных вычислений в задачах дискретной оптимизации ранцевого типа / М.А. Посыпкин, И.Х. Сигал // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 2005. – № 45 (10). – С. 1801–1809.
7. Тимошевская, Н.Е. Разработка и исследование параллельных комбинаторных алгоритмов / Н.Е. Тимошевская // Вычисл. методы в дискрет. математике. – 2009. – № 2. – С. 96–103.
8. Тимошевская, Н.Е. Параллельные методы обхода дерева / Н.Е. Тимошевская // Мат. моделирование. – 2004. – Том 16, №1. – С. 105–114.
9. Малыгин, Е.Н. Математическая модель функционирования многопродуктовых химико-технологических систем / Е.Н. Малыгин, С.В. Карпушкин, А.Б. Борисенко // Теорет. основы хим. технологии. – 2005. – № 39 (4) – С. 455–465.

10. Message Passing Interface Forum. Official MPI (Message Passing Interface) Standards Documents, Errata [Electronic resource]. – Access Mode : <http://www.mpi-forum.org/>. – Title Screen.

11. Web-сайт вычислительного кластера Тамбовского государственного технического университета [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <http://cluster.tstu.ru>. – Загл. с экрана.

---

## **Application of Parallel Computing for the Calculation of Hardware Design of Chemical-Technological Systems**

**A.B. Borisenko<sup>1</sup>, D.V. Kutuzov<sup>2</sup>, A.V. Osovskiy<sup>2</sup>**

*Department “Computer-Aided Design of Technological Equipment”, TSTU (1);*

*Department “Quality Control”, Astrakhan State University (2), Astrakhan;*

*andrey@mail.gaps.tstu.ru*

**Key words and phrases:** branch and bound method; global optimization; multi-assortment chemical-technological systems; MPI; optimal calculation of process equipment; parallel computing.

**Abstract:** The paper presents the scheme based on branch and bound parallel algorithm for optimal selection of hardware design of chemical-technological systems. The values of speed and efficiency of the processor obtained by solving the given problem on the computing cluster of Tambov State Technical University.

---

## **Anwendung der Parallelberechnungen für das Rechnen der Apparaturausstattung der chemie-technologischen Systeme**

**Zusammenfassung:** Es ist den auf das Schema der Zweigen und der Grenzen begründete Parallelalgorithmus der optimalen Auswahl der Apparaturausstattung der chemie-technologischen Systeme dargelegt. Es werden die Werte der Beschleunigung und der Effektivität der Benutzung der Prozessoren angeführt. Sie wurden bei der Lösung der angegebenen Aufgabe am Rechenklasten der staatlichen technischen Universität Tambow erhalten.

---

## **Application des supputations parallèles pour le calcul de l'établissement hardware des systèmes technologiques**

**Résumé:** Est présenté l'algorithme parallèle fondé sur le schéma des branches et des limites du choix optimal de l'établissement hardware des systèmes technologiques. Sont citées les valeurs de l'accélération et de l'efficacité de l'emploi des processeurs obtenues lors de la solution du problème présenté sur un claster de calcul de l'Université technique d'état de Tambov.

---

**Авторы:** *Борисенко Андрей Борисович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ГОУ ВПО «ТГТУ»; *Кутузов Денис Валерьевич* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Управление качеством»; *Осовский Алексей Викторович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Управление качеством», ГОУ ВПО «АГУ», г. Астрахань.

**Рецензент:** *Дзюба Сергей Михайлович* – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Прикладная математика и информатика», ГОУ ВПО «ТГТУ».

---