

# АВТОМАТИЗОВАНЕ РОЗПАРАЛЕЛЮВАННЯ ПРОГРАМИ МОДЕЛЮВАННЯ ВНУТРІШНЬОЧАСТИНКОВОЇ ДИФУЗІЇ ТА АБСОРБЦІЇ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

*Анатолій Дорошенко, Михайло Петрик, Дмитро Михалик,  
Павло Іваненко, Олена Яценко*

Виконане проектування й розпаралелювання програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона, призначеної для отримання чисельного розв'язання моделі розподіленої системи масопереносу. Проектування здійснюється із використанням алгебро-алгоритмічних специфікацій, поданих у природно-лінгвістичній формі. Застосовані інструментальні засоби автоматизованого проектування, синтезу та автотюнінгу програм, що забезпечують переклад алгебро-алгоритмічних схем у вихідний код мовою програмування та його налаштування на середовище виконання для підвищення швидкодії програми. Отримані чисельні розподіли значень коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового переносу вздовж координати товщини середовища для різних часових зрізів. За результатами ідентифікації виконана перевірка моделей на адекватність, виконані чисельне моделювання та аналіз концентраційних і градієнтних полів масопереносу. Результати експерименту з автоматизованого налаштування паралельної програми реалізації методу Кранка-Ніколсона продемонстрували високе мультипроцесорне прискорення на тестових вхідних даних.

Ключові слова: математична модель, масопереніс, неоднорідні й нанопористі середовища, автоматизоване проектування програм, автотюнінг програм, паралельні обчислення.

Heterogeneous media consisting of thin layers of particles of forked porous structure with different physical-chemical properties are widely used in science-intensive technologies and priority sectors of industry, medicine, ecology, etc. Such layers are distributed systems of pores consisting of two main spaces: micro- and nanopores of particles and macropores and cavities between particles. Mass transfer in the system of heterogeneous media causes two types of mass transfer: diffusion in macropores, owing to interparticle space, and diffusion in the system of micro- and nanopores inside particles of the heterogeneous medium. Intraparticle space has a higher level of adsorptive capacity, and at the same time, has a lower velocity of diffusion intrusion in comparison with interparticle space. In modeling concentration and gradient fields for various diffusible components, an important scientific problem is the identification of kinetic parameters of a transfer, predetermining mass transfer velocity on macro- and micro levels, and also equilibrium conditions. The results of designing and parallelization of a program implementing a Crank-Nicolson scheme using algebra-algorithmic specifications represented in a natural-linguistic form are given. The tools for automated design, synthesis and auto-tuning of programs were applied that provided the translation of algebra-algorithmic schemes into source code in a target programming language and its tuning for execution environment to increase the program performance. Numerical distributions of values of diffusion coefficients for intraparticle transfer along coordinate of medium thickness for various time snapshots were obtained. Based on the results of the identification, the models were checked for adequacy and numerical modeling and analysis of concentration and gradient fields of mass transfer were carried out. The experiment results of auto-tuning the software implementation demonstrated high multiprocessor speedup on test data input.

Keywords: mathematic model, mass transfer, heterogeneous and nanoporous media, automated program design, software auto-tuning, parallel computing.

## Вступ

Управління науковим експериментом і аналізом стану складних багатокомпонентних систем масопереносу в неоднорідних нанопористих середовищах сьогодні тісно пов'язане з новими розробками у сфері системного аналізу й математичного моделювання систем. Неоднорідні нанопористі середовища, що складаються з тонких шарів частинок розгалуженої пористої структури з різними фізико-хімічними властивостями мають широке застосування в наукоємних технологіях і пріоритетних галузях індустрії, медицини, екології та ін. Такі шари є розподіленими багаторівневими системами пор, що складаються з двох головних просторів: мікро- і нанопор частинок та макропор і порожнин між частинками. Внутрішньочастинковий простір (intraparticle space) має вищий ступінь адсорбційного поглинання і водночас нижчу швидкість дифузійного проникнення у порівнянні з міжчастинковим простором (interparticle space) [1–3]. При моделюванні концентраційних і градієнтних полів для різних дифундованих компонентів важливою науковою проблемою є ідентифікація кінетичних параметрів переносу, що визначають швидкість масопереносу на макро- й мікро-рівнях, а також рівноважні умови.

В [4] розглянута схема Кранка-Ніколсона для отримання чисельного розв'язання моделі розподіленої системи масопереносу та ідентифікації в прямій та спряженій постановці для ідентифікації розподілення коефіцієнтів дифузії на основі теорії оптимального управління станом багатокомпонентних систем. Реалізована градієнт-процедура ідентифікації параметрів внутрішньої кінетики переносу й отримані розподілення значень коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового й міжчастинкового переносу. В даній статті для розробки паралельної програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона для

виконання на багатоядерному процесорі використовуються системи алгоритмічних алгебр Глушкова (САА) [5] та інструментальні засоби проєктування, синтезу й автоматичного самоналаштування (автотюнінгу) програм [6–8]. САА призначені для формалізованого проєктування програм, що представлені у вигляді високорівневих схем. Автотюнінг забезпечує оптимізацію програм, — їх налаштування на конкретне обчислювальне середовище шляхом автоматизованого пошуку оптимальної програми з множини можливих варіантів, кожен з яких виконується на заданій паралельній архітектурі з вимірюванням продуктивності (часу виконання). Засоби автотюнінгу використовують переписувальні правила [9] для трансформації програм.

## 2. Постановка задачі дворівневого переносу в неоднорідній системі нанопористих частинок

Масопереніс у системі неоднорідних середовищ, що складаються з дрібних частинок нанопористої структури, викликає два види масопереносу: дифузію в макропорах завдяки простору між частинками, й дифузію в системі мікро- й нанопор всередині частинок неоднорідного середовища. Для визначення внеску кожного з видів дифузії в систему загального масопереносу необхідно брати до уваги значення параметрів, що визначають адсорбційні рівноваги та ін. В даній роботі розглядається неоднорідне нанопористе середовище, яке складається з великої кількості  $(n + 1)$  тонких шарів, нанопористих сферичних частинок, що розташовані перпендикулярно до напрямку вхідного потоку й пов'язаних між собою системою умов  $n$ -інтерфейсних взаємодій. Це є визначаючим для неоднорідних тонких нанопористих зразків, особливо у випадку дифузії газу перед станом адсорбційної рівноваги із врахуванням системи багатоінтерфейсних взаємодій. Масопереніс відбувається через проникну поверхню ложа в двох напрямках: в осьовому — в просторі макропор ( $z$  — напрямок вздовж висоти ложа, перпендикулярне до поверхні шарів) і радіальному — у просторі мікро- й нанопор. Еволюція системи у напрямку до рівноваги здійснюється градієнтами концентрацій в макропорах і в мікро- й нанопорах частинок (від поверхні до центру).

Математична модель такого переносу із врахуванням вищевказаних фізичних факторів описується у вигляді змішаної крайової задачі [1]: побудувати обмежене в області

$$D_n = \left\{ t > 0, r \in (0, R), z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 = 0; l_{n+1} \equiv l < \infty \right\}$$

розв'язання системи рівнянь в часткових похідних, що записана в матричному вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n+1} \end{bmatrix} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \begin{bmatrix} D_{\text{inter}_1} & \dots & 0 \\ & D_{\text{inter}_2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & D_{\text{inter}_{n+1}} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_{n+1} \end{bmatrix} \right) - \left( \begin{bmatrix} v_1 D_{\text{intra}_1} & \dots & 0 \\ & v_2 D_{\text{intra}_2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & v_{n+1} D_{\text{intra}_{n+1}} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \dots \\ q_{n+1} \end{bmatrix} \right)_{r=R}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \dots \\ q_{n+1} \end{bmatrix} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial t} \left( \begin{bmatrix} D_{\text{intra}_1} & \dots & 0 \\ & D_{\text{intra}_2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & D_{\text{intra}_{n+1}} \end{bmatrix} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \dots \\ q_{n+1} \end{bmatrix} \right) \quad (2)$$

з початковими умовами:

$$c_k(t, z)_{t=0} = 0, \quad q_k(t, z)_{t=0} = 0, \quad (3)$$

граничними умовами:

$$c_{n+1}(t, z=l) = c_{\infty n+1}, \quad \frac{\partial c_1}{\partial z}(t, z=0) = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} q_k(t, r, z)_{r=0} = 0, \quad q_k(t, r, z)_{r=R} = K_k c_k(t, z). \quad (5)$$

і системою умов  $n$ -інтерфейсних взаємодій за координатою  $z$ :

$$[c_k(t, z) - c_{k+1}(t, z)]_{z=l_k} = 0, \left[ \frac{\partial}{\partial z} c_k(t, z) - v_k \frac{\partial}{\partial z} c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0, \quad (6)$$

де  $K_k = \frac{q_{\infty k}}{c_{\infty k}}$ ,  $\bar{q}_k(t, z) = \frac{1}{R^2} \int_0^R q_k(t, x, z) r dr$ ,  $v_k = \frac{3(1 - \varepsilon_{inter_k})}{R \cdot \varepsilon_{inter_k}}$ ,  $k = \overline{1, n+1}$ .

Система диференціальних рівнянь (1) описує переніс у міжчастинковому просторі, обмежений правими частинами системи, що враховують вплив мікропереносу на зовнішніх поверхнях частинок або кристалітів ( $r = R$ ) для кожного  $k$ -го шару ложа. Система рівнянь (2) описує перенос в мікро- й нанопорах внутрішньочастинкового простору. Зв'язок між концентраціями  $c_k$  в міжчастинковому просторі і концентраціями  $q_k$  у внутрішньочастинковому просторі визначається системою правих крайових умов (5), що також визначає умови адсорбційної рівноваги на поверхнях сферичних частинок,  $\Delta l_k = l_{k+1} - l_k$  — товщина  $k$ -го шару,  $R$  — радіус частинки. Розв'язок задачі будується із використанням різницевої схеми Кранка-Ніколсона [4].

### 3. Алгоритм реалізації градієнтного методу ідентифікації коефіцієнтів внутрішньочастинкової дифузії системи конкуритивного переносу

Процедура реалізації градієнтного методу ідентифікації коефіцієнтів внутрішньочастинкового масопереносу ( $D_{intra_m}$ ,  $m = \overline{1, n+1}$ ) ґрунтується на використанні матриці стану системи  $M_m(t_k, z_i, D_{intra_m}^0)$ , яка відповідає сумарній накопиченій масі дифундованого компонента в порах частинок в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторі [10]. Матриця визначається за формулою

$$M_m(t, z) = \left[ U_m(t, z, D_{intra_m}) + \frac{1}{R} \int_0^R q_m(t, r, z, D_{intra_m}) r dr \right]_{L^2(\gamma_m), m = \overline{1, n+1}},$$

де  $M_{exp} = [M_{exp_{km}}]_{m = \overline{1, n+1}, k = \overline{1, N}}$  — матриця даних експериментальних досліджень для  $i$ -го поверхневого та  $k$ -го часового шарів (Рис. 1) [11].

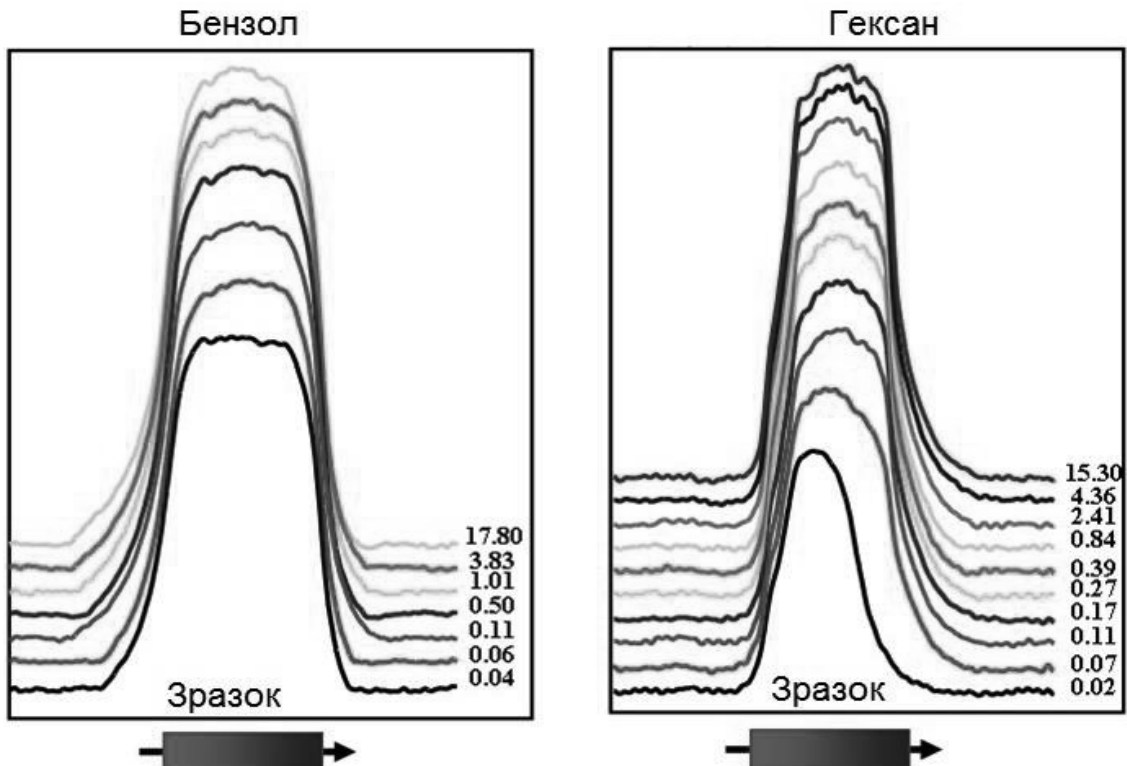


Рис. 1. Експериментальні дані досліджень конкуритивного масопереносу в неоднорідному нанопористому каталітичному середовищі [11]

У матриці  $M_m(t_k, z_i, D_{intra_m}^0)$  часові та просторові змінні  $t$  і  $z$  визначають конкретні стани системи конкуритивного переносу для неоднорідного (за напрямком  $z$ ) каталітичного середовища нанопористих частинок, для якого здійснюється ідентифікація кінетичних параметрів-коефіцієнтів внутрішньочастинкової дифузії  $D_{intra_m}$ ,  $m = \overline{1, n+1}$  для кожного з  $n+1$  шарів.

Для ідентифікації цього розподілу (вектора)  $D_{intra_m}$  використовується один із градієнтних методів, математичне обґрунтування застосування яких до задач параметричної ідентифікації мультикомпонентних

розподілених систем представлено в [12, 13]. Виходячи зі специфіки задачі, найбільш придатним є метод мінімальних похибок, відповідно до якого, для визначення  $(\theta + 1)$ -го наближення коефіцієнта дифузії у внутрішньочастинковому просторі  $D_{intra_m}^\theta$ , застосуємо таку градієнт-процедуру ідентифікації, визначену у матричному вигляді:

$$D_{intra_m}^{\theta+1} = D_{intra_m}^\theta - \eta^\theta \cdot \nabla J \left( D_{intra_1}^\theta, \dots, D_{intra_{n+1}}^\theta \right), m = \overline{1, n+1},$$

де  $\eta^\theta$  — значення коефіцієнта для кожного  $\theta$ -го кроку ітерації.

Загальна схема алгоритму ідентифікації коефіцієнтів внутрішньочастинкової дифузії  $D_{intra_m}^\theta$ ,  $m = \overline{1, n+1}$ , показана на Рис. 2. Чисельне моделювання та ідентифікація кінетичних параметрів системи розглянуті в розділі 4.

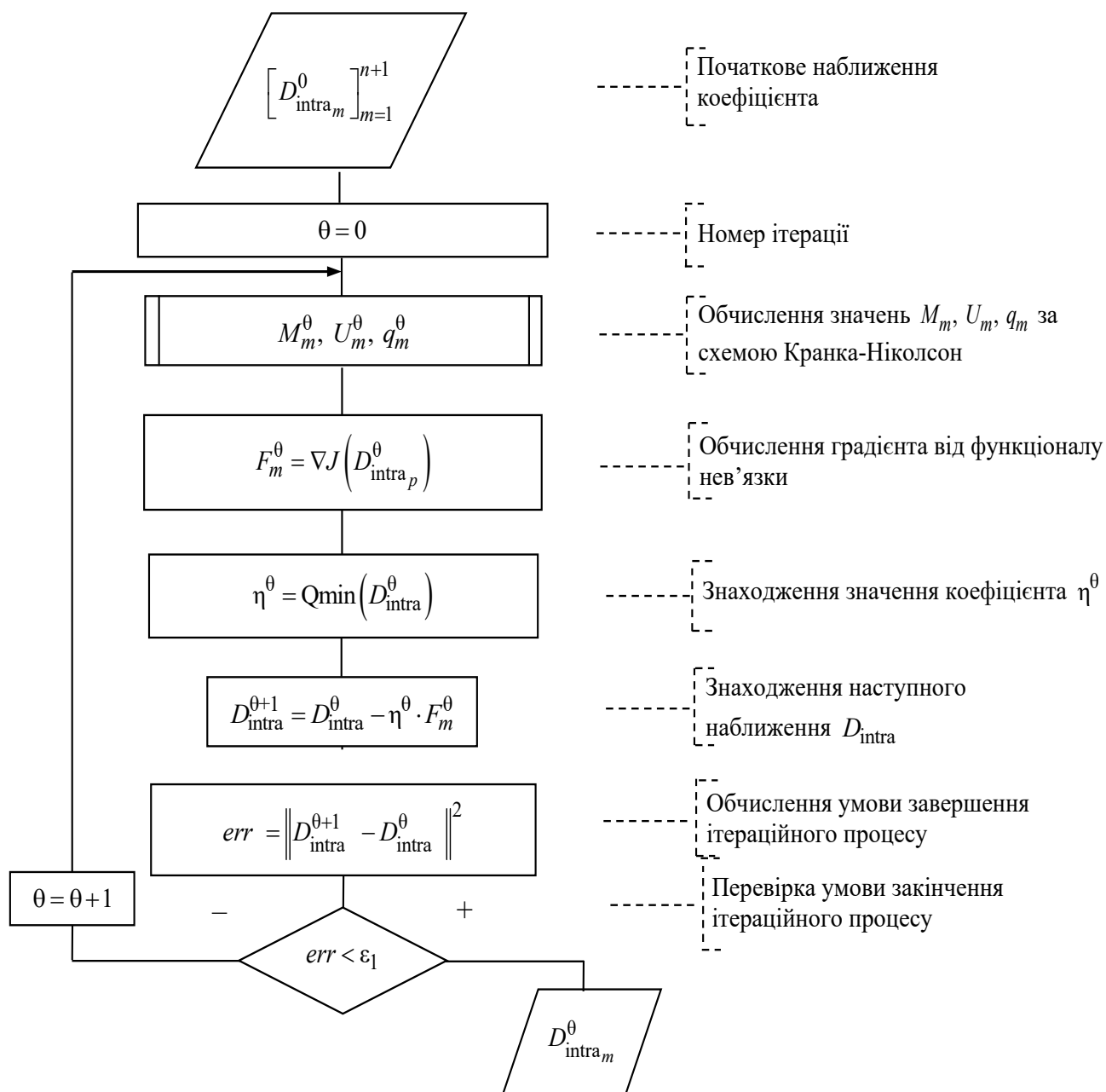


Рис. 2. Блок схема алгоритму ідентифікації коефіцієнтів внутрішньочастинкової дифузії

#### 4. Автоматизоване проектування та налаштування паралельної програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона

Для проектування програми реалізації методу Кранка-Ніколсона застосовано системи алгоритмічних алгебр [5], що призначені для високорівневого конструювання алгоритмів, поданих у вигляді схем. САА є двоосновною алгеброю  $GA = \langle \{Pr, Op\}; \Omega_{GA} \rangle$ , де  $Pr$  і  $Op$  — множини предикатів і операторів, визначених на інформаційній множині;  $\Omega_{GA}$  — сигнатура операцій, що складається з логічних (диз'юнкції, кон'юнкції, заперечення) та операторних конструкцій, що будуть розглянуті далі. В даній роботі використовується при-

родно-лінгвістична форма запису операцій. САА покладено в основу мови САА/1 [5], яка використовує подання алгоритмів, близьке до природної мови й може бути перекладена в цільову мову програмування. Алгоритми, подані в САА/1, називаються САА-схемами. Ідентифікатори предикатів записуються в одинарних лапках, операторів — у подвійних. Предикати та оператори в САА/1 можуть бути базисними або складеними. Базисні елементи є елементарними атомарними абстракціями в САА-схемах. Складені оператори будуються з базисних на основі таких операцій:

послідовне виконання операторів: “*operator 1*”; “*operator 2*”;  
розгалуження: IF ‘*condition*’ THEN “*operator 1*” ELSE “*operator 2*” END IF;  
цикл for: FOR (*counter* FROM *start* TO *fin*) “*operator*” END OF LOOP;  
асинхронне виконання *p* операторів (потоків): PARALLEL(*j = 1, ..., p*)( “*operator j*” );

контрольна точка: CP ‘*condition*’, що пов’язана з умовою синхронізації, яка має значення “хибність” до тих пір, поки обчислювальний процес не досягнув цієї точки в схемі, і значення “істина” з моменту досягнення точки;

синхронізатор: WAIT ‘*condition*’, який затримує обчислення доти, поки значення умови синхронізації не стане істинним.

Розроблений інтегрований інструментарій проєктування та синтезу програм [5, 8] забезпечує автоматизоване конструювання схем алгоритмів та генерацію відповідного коду у цільових мовах програмування (C, C++, Java). Алгоритми проєктуються із використанням списку САА конструкцій та дерева. Користувач обирає конструкції зі списку та додає їх у дерево конструювання алгоритму. На кожному кроці процесу проєктування, система дозволяє користувачу обирати лише ті конструкції, внесення яких до схеми не порушує її синтаксичну правильність. Дерево алгоритму далі використовується для автоматичної генерації тексту САА схеми та коду мовою програмування. Відображення кожної САА конструкції в текст мовою програмування вказано як шаблон в базі даних інтегрованого інструментарію.

Розглянемо процес розпаралелювання однієї з підпрограм реалізації схеми Кранка-Ніколсона. Послідовну САА-схему цієї підпрограми, спроектовану із використанням інтегрованого інструментарію, наведено нижче. Схема є циклом за змінною  $k \in [1, \dots, N]$ , у якому функції  $iterate\_c(k)$  та  $iterate\_q(k)$  обчислюють  $k$ -й шар для величин концентрації  $c_k$  та  $q_k$  в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторі відповідно.

SCHEME CRANK-NICOLSON SEQUENTIAL =====

```
“iterations”
===== FOR (k FROM 1 TO N)
    “iterate_c(k)”
    “iterate_q(k)”
    END OF LOOP
```

END OF SCHEME

Розпаралелювання схеми полягає в розбитті сегменту  $[1 \dots N]$  на *NumThreads* секцій, що обробляються одночасно. САА-схема розпаралеленого алгоритму є такою:

SCHEME CRANK-NICOLSON PARALLEL =====

```
“iterations”
===== PARALLEL(j = 1, ..., NumThreads)
    (
        “IterateThread(j)”
    );
    WAIT ‘Processing in all (NumThreads) threads is finished’;
```

```
“IterateThread(j)”
===== “chunk := N / NumThreads”;
    “start := (j - 1) * chunk + 1”;
    “end := (j - 1) * chunk + chunk”;
    IF (j = NumThreads) THEN
        “end := N”
    END IF;
    FOR (k FROM start TO end)
        “iterate_c(k)”
        “iterate_q(k)”
    END OF LOOP;
    CP ‘Processing in thread (j) is finished’;
```

END OF SCHEME

На основі сконструйованої схеми інтегрованої інструментарії виконав автоматизовану генерацію коду мовою Java.

Застосування формальних методів в інтегрованому інструментарії та переписувальних правил системи TermWare [8, 9] дає можливість автоматизації ручної праці програмістів та виконання більш складного розпаралелювання алгоритмів. TermWare надає мову для опису переписувальних правил, що оперують спеціальними структурами даних — термами, а також засоби обробки й інтерпретації правил для трансформації термів. Продуктивність програм, шпруктуються, може бути поліпшена за рахунок використання розробленої системи автоматичного налаштування програм TuningGenie [6, 7]. TuningGenie призначена для автоматизованої генерації застосунків-автотюнерів з вихідного коду. Ідея автотюнера полягає в емпіричному оцінюванні кількох версій вхідної програми та вибору найкращої — з меншим часом виконання й вищою точністю результатів. Система працює з текстом програми, використовуючи експертні знання розробника, який додає певні метадані (імена параметрів та діапазони значень) у вихідний код у вигляді спеціальних коментарів-прагм. Використовуючи такі експертні знання, кількість варіантів програми для оцінювання зменшується, що підвищує швидкодію автотюнера.

Нижче наведено приклад однієї з прагм TuningGenie, що називається *tunableParam*. Ця прагма встановлює можливі значення для змінної *NumThreads*, у якій зберігається кількість паралельних гілок, у діапазоні [1...8] з кроком 1:

```
// tunableParam name=NumThreads start=1 stop=8 step=1
int NumThreads = 1;
```

Прагма *tunableParam* застосовується для алгоритмів, що використовують розпаралелювання за даними: вона дозволяє знайти оптимальну декомпозицію обчислень, оцінюючи розмір блоку, який виконується на одному процесорі. Вона також може застосовуватися, коли необхідно оцінити оптимальну кількість обмежених ресурсів, наприклад, розмір кешу.

## 5. Результати експериментів

У даному розділі розглядаються результати чисельного моделювання системи й ідентифікації кінетичних параметрів неоднорідної нанопористої системи масопереносу, а також автоматичного налаштування паралельної програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона на цільове середовище виконання.

**4.1. Чисельне моделювання та ідентифікація кінетичних параметрів системи.** Процедура параметричної ідентифікації кінетичних параметрів систем полягає у визначенні значень коефіцієнтів дифузії у внутрішньочастинковому просторі, для чого застосовується градієнтний метод. Використовуючи як експериментальні дані результати дослідження монодифузії газів (бензол и гексан) (Рис. 1), проведена процедура ідентифікації значень коефіцієнтів  $D_{\text{intra}_m}$ , що визначають хід процесу дифузії в частинці. В даному випадку

елементами матриці експериментальних даних  $\left[ M_{\text{exp}_{k_i}} \right]_{k=1, \overline{N}}^{i=1, \overline{M}}$  є значення розподілу сумарної поглинутої маси вздовж координати  $z$  для різних моментів часу протікання процесу дифузії.

Результати ідентифікації, проведеної відповідно до розглянутої методики й з використанням зазначених експериментальних даних, подані на Рис. 3, 4. Як і результати експериментальних досліджень (Рис. 1), вони отримані для різних часових зрізів для випадків процесу незалежної дифузії бензолу й гексану. На Рис. 3, а і Рис. 4, а наведені графічні розподіли значень ідентифікованих коефіцієнтів дифузії вздовж координати  $z$  при дифузії бензолу для моментів часу  $\tau = 0.02$  год і  $\tau = 0.39$  год.

Із наведених графічних результатів процесу ідентифікації коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}_m}$ ,  $m = \overline{1, n+1}$  для внутрішньочастинкового простору, можна виділити загальні характерні закономірності, що полягають в деякому псевдо-експоненціальному спаданні значень коефіцієнтів дифузії в діапазоні  $3 \cdot 10^{-12} \div 4 \cdot 10^{-14}$  м/сек<sup>2</sup> (з врахуванням похибок обчислення). Подібна картина спостерігається і для процесу дифузії гексану, для якого проведена процедура ідентифікації коефіцієнтів дифузії у внутрішньочастинковому просторі  $D_{\text{intra}_m}$  для часових зрізів  $\tau = 0.04$  год,  $\tau = 0.50$  год і для  $\tau = 3.83$  год. Результати проведеної ідентифікації подані на Рис. 4, а.

Отримані результати ідентифікованих розподілів коефіцієнтів дифузії у внутрішньочастинковому просторі вздовж координати  $z$  (основний напрямок неоднорідності системи), дозволяють достатньо точно моделювати концентраційні поля й інтегральні розподіли маси в неоднорідному каталітичному нанопористому шарі. На Рис. 3, б і Рис. 4, б подані концентраційні профілі, що демонструють порівняльний аналіз модельних кривих (2), побудованих в результаті чисельного розв'язку задачі (1)–(6) з використанням схеми Кранка-Ніколсона і результатів ідентифікованих коефіцієнтів всередині дифузії частинок з апроксимаціями експериментальних кривих розподілів поглинутої маси в нанопористому шарі, використаними для процедури ідентифікації.

Як видно з поданих концентраційних розподілів (Рис. 3, б і Рис. 4, б), значення модельних і експериментальних профілів для всіх отриманих графіків інтегральної маси  $M(t, z)$  достатньо мірою узгоджуються між собою завдяки отриманим якісним розв'язкам оберненої задачі, тобто розподілам коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}_m}$ . Приблизно за 80 % довжини модельні криві забезпечують повний збіг із експериментальними значеннями. Такий підхід забезпечує достатньо високий ступінь адекватності математичних моделей і методик ідентифікації параметрів досліджуваних неоднорідних розподілених систем багатокomпонентного переносу.

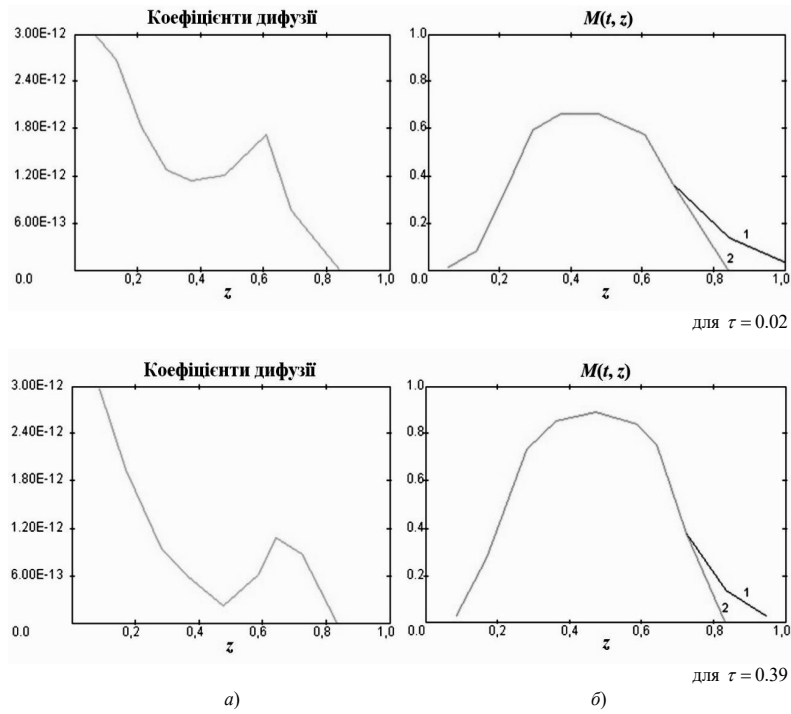


Рис. 3. Результати ідентифікації коефіцієнтів дифузії для моментів часу  $\tau = 0.02$  і  $\tau = 0.39$  для дифузії бензолу: а) розподіл коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}_m}$  у внутрішньочастинковому просторі; б) порівняння модельної (2) та експериментальної (1) кривих

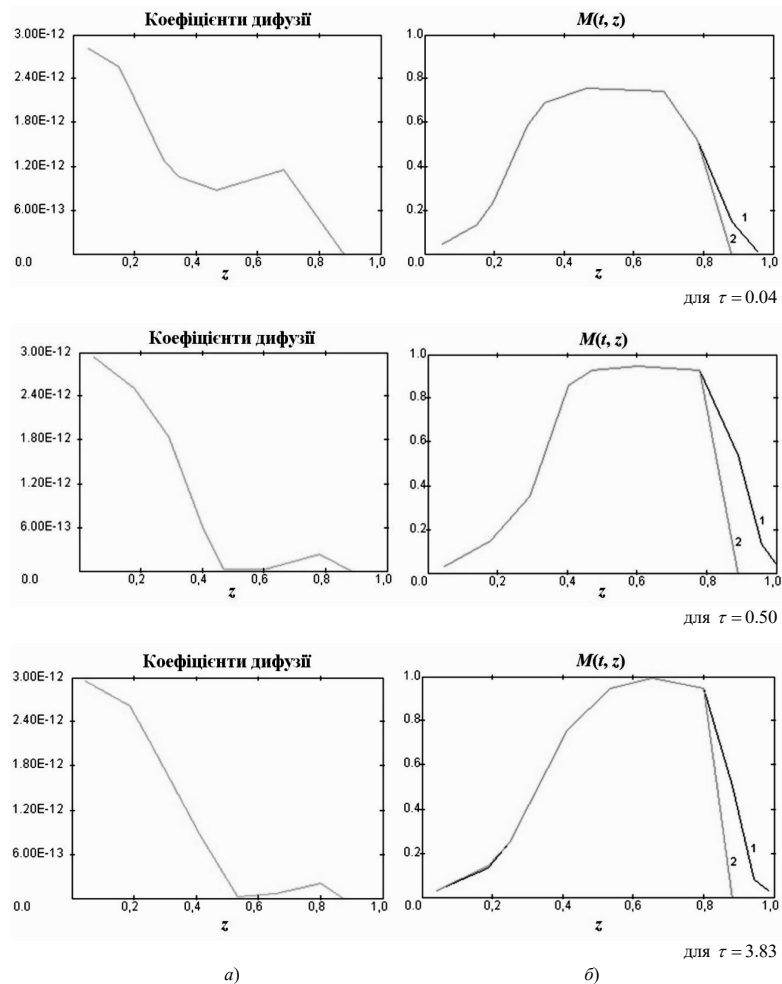


Рис. 4. Результати ідентифікації коефіцієнтів дифузії для моментів часу  $\tau = 0.04$ ,  $\tau = 0.50$  і  $\tau = 3.83$  для дифузії гексану: а) розподіл коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}_m}$  у внутрішньочастинковому просторі; б) порівняння модельної (2) та експериментальної (1) кривих

**4.2. Автоматичне налаштування паралельної програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона.** Система TuningGenie була застосована для випробування різних комбінацій опцій компілятора JVM, пов'язаних зі швидкодією (-XX:-UseBiasedLocking/-XX:BiasedLockingStartupDelay), при різних значеннях кількості потоків для знаходження оптимальної конфігурації для програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона при виконанні на багатоядерному процесорі. Зміна опцій компілятора не показала суттєвого впливу на продуктивність обчислень, тому наведені далі результати належать в основному до змін параметра *NumThreads*.

Характеристики тестового середовища виконання були такими:

- чотирихядерний процесор Intel Core i7-6820HQ з частотою 2,7 ГГц; кеш L1: 32k/32k x4, кеш L2/L3: 256k x4, 8 МБ;
- оперативна пам'ять 16 ГБ, 2133 МГц LPDDR3;
- OpenJDK build 11.0.2+9;
- MacOS v11.6.

Інтуїція підказує, що оптимальна кількість потоків має бути 8, оскільки процесор — чотирихядерний з підтримкою технології hyper-threading. Ця конфігурація позначена трикутником на діаграмі (Рис. 5), і продемонструвала прийнятне мультипроцесорне прискорення 5.16 на тестових вхідних даних.

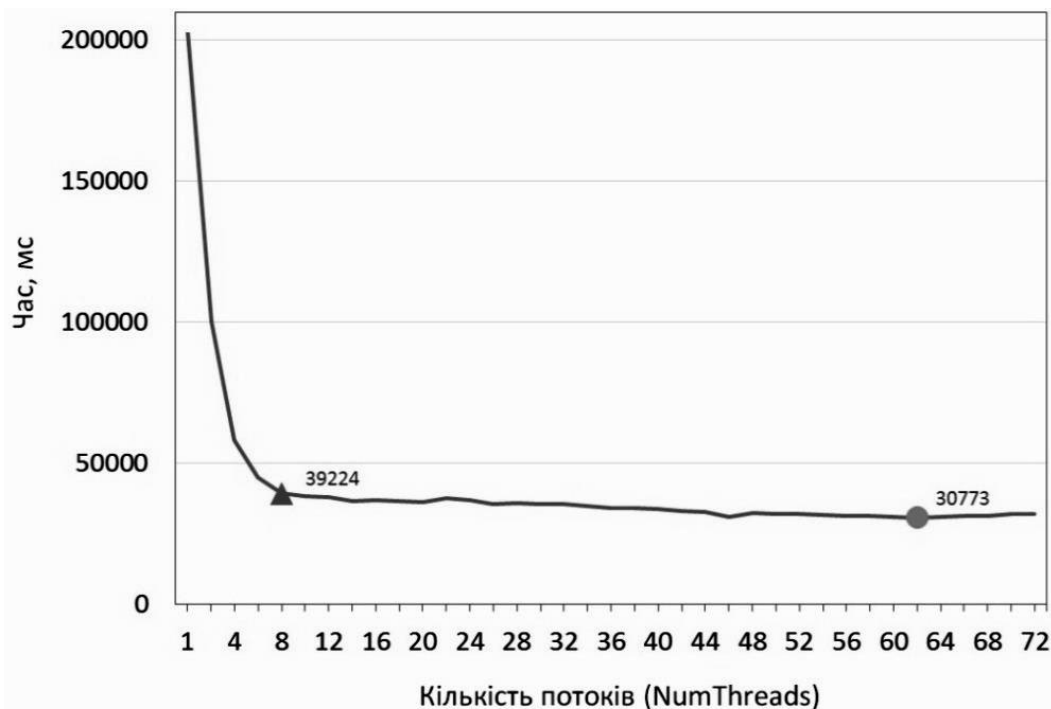


Рис. 5. Залежність часу виконання від кількості потоків для програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона

Однак подальше підвищення кількості потоків дозволило отримати додаткове покращення швидкодії приблизно на 140 %. Найшвидша конфігурація програми з 62 потоками (позначена точкою на діаграмі) досягнула досить хорошого мультипроцесорного прискорення 6.5. Це пояснюється підвищеною ефективністю використання кешів процесора. Дрібнозерниста декомпозиція з більшою імовірністю розміщується в кеші L1–L3 і зберігає час на звертання до “повільної” оперативної пам’яті. Цей ефект збалансований додатковими часовими витратами на конкуренцію потоків. Однак, загальний ефект виявився позитивним.

## Висновки

Виконане автоматизоване проектування й розпаралелювання програми реалізації схеми Кранка-Ніколсона із використанням алгебро-алгоритмічних специфікацій, поданих у природно-лінгвістичній формі. Застосовано раніше розроблені інструментальні засоби автоматизованого проектування, синтезу та автотюнінгу програм, що забезпечують трансформацію алгебро-алгоритмічних схем у вихідний код мовою програмування та його автоматизоване налаштування на середовище виконання для підвищення швидкодії програми. Отримані чисельні розподіли значень коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового переносу вздовж координати товщини середовища для різних часових зрізів. За результатами ідентифікації виконана перевірка моделей на адекватність, виконані чисельне моделювання та аналіз концентраційних і градієнтних полів масопереносу. Результати експерименту з автоматизованого налаштування паралельної програми реалізації методу Кранка-Ніколсона продемонстрували високе мультипроцесорне прискорення на тестових вхідних даних.



## Література

1. Kärger J., Ruthven D.M. Diffusion and adsorption in porous solids. Handbook of porous solids / ed. by: F. Schüth, K.S.W. Sing, J. Weitkamp. Weinheim: Wiley-VCH, 2002. P. 2089–2173.
2. Chen N.Y., Degnan T.F., Smith M.C. Molecular transport and reaction in zeolites: design and application of shape selective catalysis. New York: Wiley, 1994. 188 p.
3. Ruthven D. Principles of adsorption and adsorption processes. New York: Wiley, 1984. 464 p.
4. Петрик М.Р., Михайлик Д.М., Гоянюк І.В. Високопродуктивні методи ідентифікації кінетичних параметрів нанопористих кіберсистем адсорбції зі зворотними зв'язками. Вісник Національного університету водного господарства та природокористування. Вип. 4(92). 2020. С. 91–104. URL: <http://ep3.nuwm.edu.ua/22117> (дата звернення: 12.08.2022).
5. Algebra-algorithmic models and methods of parallel programming / Andon P.I. et al. Kyiv: Akadempriodyka, 2018. 192 p.
6. A mixed method of parallel software auto-tuning using statistical modeling and machine learning / Doroshenko A. et al. Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications. 2019. Vol. 1007. P. 102–123.
7. Ivanenko P., Doroshenko A., Zhereb K. TuningGenie: auto-tuning framework based on rewriting rules. Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications. 2014. Vol. 469. P. 139–158.
8. Doroshenko A., Zhereb K., Yatsenko O. Developing and optimizing parallel programs with algebra-algorithmic and term rewriting tools. Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications. 2013. Vol. 412. P. 70–92.
9. Doroshenko A., Shevchenko R. A rewriting framework for rule-based programming dynamic applications. Fundamenta Informaticae. 2006. Vol. 72, No. 1–3. P. 95–108. URL: <https://www.researchgate.net/publication/250731334> (дата звернення: 12.08.2022).
10. Kärger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals. Leipzig: Leipzig: Leipziger Universitätsverlag, 2005. 615 p.
11. Petryk M.R., Fraissard J. Mathematical modeling of nonlinear competitive two-component diffusion in medium of nanoporous particles. Journal of Automation and Information Sciences. 2009. Vol. 41, No. 3. P. 37–55.
12. Сергиенко І.В., Дейнека В.С. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. Киев: Наукова думка, 2009. 638 с.
13. Petryk M.R., Fraissard J., Mykhalyk D.M. Modeling and analysis of concentration fields of nonlinear competitive two-component diffusion in medium of nanoporous particles. Journal of Automation and Information Sciences. 2009. Vol. 41, No. 8. P. 13–23.

## References

1. KÄRGER, J. & RUTHVEN, D. M. (2002) Diffusion and adsorption in porous solids. In: Schüth, F., Sing, K. S. W. & Weitkamp, J. (eds). *Handbook of Porous Solids*. Weinheim: Wiley-VCH. p. 2089-2173.
2. CHEN, N. Y., DEGNAN, T. F. & SMITH, M. C. (1994) *Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis*. New York: Wiley.
3. RUTHVEN, D. (1984) *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. New York: Wiley.
4. PETRYK, M. R., MYKHALYK, D. M. & HOIANIUK, I. V. (2020) High-performance methods of identification of kinetic parameter for monodiffusion adsorption mass transfer. *Bulletin of National University of Water and Environmental Engineering*. [Online] 4 (92). p. 91-104. (in Ukrainian). Available from: <http://ep3.nuwm.edu.ua/22117> [Accessed 12/08/2022]
5. ANDON, P. I. et al. (2018) Algebra-Algorithmic Models and Methods of Parallel Programming. Kyiv: Akadempriodyka.
6. DOROSHENKO, A. et al. (2019) A mixed method of parallel software auto-tuning using statistical modeling and machine learning. *Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications*. 1007. p. 102-123.
7. IVANENKO, P., DOROSHENKO, A. & ZHEREB, K. (2014) TuningGenie: auto-tuning framework based on rewriting rules. *Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications*. 469. p. 139-158.
8. DOROSHENKO, A., ZHEREB, K. & YATSENKO O. (2013) Developing and optimizing parallel programs with algebra-algorithmic and term rewriting tools. *Communications in Computer and Information Science. Information and Communication Technologies in Education, Research, and Industrial Applications*. 412. p. 70-92.
9. DOROSHENKO, A. & SHEVCHENKO, R. (2006) A rewriting framework for rule-based programming dynamic applications. *Fundamenta Informaticae*. [Online] 72 (1-3). p. 95-108. Available from: <https://www.researchgate.net/publication/250731334> [Accessed 12/08/2022]
10. KÄRGER, J., GRINBERG, F. & HEITJANS, P. (2005) *Diffusion Fundamentals*. Leipzig: Leipziger Universitätsverlag.
11. PETRYK, M. R. & FRAISSARD, J. (2009) Mathematical modeling of nonlinear competitive two-component diffusion in medium of nanoporous particles. *Journal of Automation and Information Sciences*. 41 (3). p. 37-55.
12. SERGIENKO, I. V. & DEINEKA, V. S. (2009) System analysis of multicomponent distributed systems. Kyiv: Naukova dumka. (in Russian).
13. PETRYK, M. R., FRAISSARD, J. & MYKHALYK D. M. (2009) Modeling and analysis of concentration fields of nonlinear competitive two-component diffusion in medium of nanoporous particles. *Journal of Automation and Information Sciences*. 41 (8). p. 13-23.

Одержано 02.08.2022

## Про авторів:

Дорошенко Анатолій Юхимович,

доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу.

Кількість публікацій в українських виданнях – понад 180.

Кількість зарубіжних публікацій – понад 60.

Індекс Хірша – 6.

<http://orcid.org/0000-0002-8435-1451>,

*Петрик Михайло Романович,*

доктор фізико-математичних наук, професор.

Кількість публікацій в українських виданнях – понад 100.

Кількість зарубіжних публікацій – понад 50.

Індекс Хірша – 6.

<https://orcid.org/0000-0001-6612-7213>,

*Михалик Дмитро Михайлович,*

кандидат технічних наук, доцент.

Кількість публікацій в українських виданнях – понад 50.

Кількість зарубіжних публікацій – понад 20.

<https://orcid.org/0000-0001-9032-695X>,

*Іваненко Павло Андрійович,*

кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник.

Кількість публікацій в українських виданнях – 29.

Кількість зарубіжних публікацій – 3.

<https://orcid.org/0000-0001-5437-9763>,

*Яценко Олена Анатоліївна,*

кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник.

Кількість публікацій в українських виданнях – 49.

Кількість наукових публікацій в іноземних виданнях – 19.

<http://orcid.org/0000-0002-4700-6704>.

#### **Місце роботи авторів:**

Інститут програмних систем НАН України, 03187, м. Київ,  
проспект Академіка Глушкова, 40.

Тел.: (38)(044) 526-35-59.

E-mail: [doroshenkoanatoliy2@gmail.com](mailto:doroshenkoanatoliy2@gmail.com),

[paiv@ukr.net](mailto:paiv@ukr.net),

[oayat@ukr.net](mailto:oayat@ukr.net).

Тернопільський національний технічний університет ім. І. Пулюя,  
кафедра програмної інженерії, 46001, м. Тернопіль,

вул. Руська, 56, корпус № 1.

Тел.: (0352) 51-97-14.

E-mail: [mykhaylo\\_petryk@tntu.edu.ua](mailto:mykhaylo_petryk@tntu.edu.ua),

[d.mykhalyk@gmail.com](mailto:d.mykhalyk@gmail.com).

#### **Прізвища та ім'я авторів і назва доповіді українською мовою:**

Дорошенко А. Ю., Петрик М. Р., Михалик Д. М., Іваненко П. А., Яценко О. А.

Автоматизоване розпаралелювання програми моделювання внутрішньочастинкової дифузії  
й абсорбції в неоднорідних нанопористих середовищах

#### **Прізвища та ім'я авторів і назва доповіді англійською мовою:**

Doroshenko A. Yu., Petryk M. R., Mykhalyk D. M., Ivanenko P. A.h, Yatsenko O.A.

Automated parallelization of a program for modeling intraparticle diffusion and adsorption  
in heterogeneous nanoporous media

**Контакт для редактора:** Яценко Олена Анатоліївна, старший науковий співробітник  
Інституту програмних систем НАН України, e-mail: [oayat@ukr.net](mailto:oayat@ukr.net), тел.: +38 (066) 803-07-31