

СРАВНЕНИЕ СПОСОБОВ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ В ПРОЦЕССЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ СЫПУЧИХ ВЕЩЕСТВ

Янушкевич В.А., Святный В.А.
Донецкий национальный технический университет
Кафедра компьютерной инженерии
vadik.ya@gmail.com

Рассматриваются вопросы необходимости проводить моделирование технологических процессов с сыпучими веществами и целесообразность применения параллельных вычислительных систем для такого моделирования. Анализируются различные алгоритмы хранения больших объемов данных и подходы к моделированию сыпучих веществ.

Введение

В производстве различных сыпучих веществ, даже таких привычных всем как стиральный порошок или кофе, прежде чем выпустить на рынок готовый продукт, всегда нужно провести множество экспериментов. Традиционным подходом является следующий: производится пробный продукт, анализируются его свойства, выделяются желаемые улучшения и производство повторяется с незначительно измененными параметрами[1]. Достоинство описанного подхода заключается в том, что он позволяет в условиях, максимально приближенном к промышленному производству получать продукцию и влиять на её качество. Однако, имеются и недостатки, и прежде всего – это время. Для проведения 1 эксперимента необходимо осуществить полный цикл производства от сырья до конечного продукта. Иногда это занимает неприемлемо много времени.

В таких условиях появление компьютера и возможность производить на нем любые вычисления рассматривалась как возможность ускорить процесс подбора оптимальных параметров производства и уменьшить издержки путем моделирования на компьютере необходимых процессов. Такой подход значительно повышает производительность труда, а значит его применение оправдано.

1 Метод дискретного элемента

Метод дискретного элемента (DEM), является наиболее мощным инструментом для расчета динамики большого количества частиц размера микрон и более.[2] DEM основан на том, что каждая твердая частица рассматривается как отдельный объект и её движение рассчитывается уравнениями Ньютона и Эйлера (уравнения 1-2).

$$\frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^N \vec{F}_j \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \vec{\varphi}_i}{\partial t^2} = \frac{1}{J_i} \sum_{j=1}^N \vec{M}_j \quad (2)$$

Сила F и момент M действующие на частицу i массы m_i которая имеет позицию с радиус вектором r_i а также угол поворота в пространстве φ_i . Момент инерции J_i представлен уравнением 3.

$$J_i = c m_i L^2 \quad (3)$$

Где L — это длина измерения взятая от центра массы (радиус сферической частицы), c — константа инерции ($c = 2/5$, если объект является сферой и $c = 1/2$, если объект является цилиндром или диском вращающимся вокруг его центра).

Для решения уравнений время применяются различные численные методы.

2 Хранение данных в процессе моделирования

Эффективное хранение текущих параметров всех частиц в моделируемой системе является основным фактором быстродействия, на которое может повлиять программист. Такие факторы, как быстродействие процессора и сети не зависят от алгоритмов моделирования и могут быть заменены на более совершенные со временем без изменения программы. Наиболее распространёнными схемами хранения данных являются:

- список частиц
- список ячеек
- Verlet-списки

Рассмотрим эти методы более подробно.

Список частиц представляет из себя линейную структуру данных, в которой все частицы хранятся не упорядоченно. Для того, чтобы найти возможные пересечения частиц, необходимо просмотреть каждую пару, таким образом при моделировании процесса с N частиц, нужно выполнить N^2 сравнений. Очевидно, что путем различных оптимизаций, можно добиться меньшего числа сравнений, именно на это и направлены другие структуры данных.

Список ячеек является идеей для ускорения процесса поиска контактирующих пар частиц. Всё пространство покрывается сеткой, для каждой ячейки сетки создается отдельный список частиц, находящихся в этой ячейке. При поиске контактирующих частиц, рассматриваются только частицы, находящиеся в пределах одной ячейки, и в соседних ячейках. Такой подход существенно снижает время, затрачиваемое на сравнение.

Существенным ограничением на размер ячейки является следующее требование: ни одна частица в процессе движения не должна преодолеть расстояние, большее, чем длина ребра ячейки сетки за 1 шаг по времени моделирования. Требование отражается в формуле 1, в которой V_{\max} – скорость частицы, L – длина ребра ячейки, Δt – шаг моделирования по времени.

$$V_{\max} = \frac{L}{\Delta t}, \quad (1)$$

При нарушении этого условия, частица может выйти за пределы того пространства, в котором первоначально предполагалось её обнаружить.

Преимуществами этого метода перед списком частиц является более высокая скорость поиска пересечений. Время выполнения так же как и в списке частиц квадратично растёт с ростом числа частиц в системе, но этот рост не такой быстрый, так как алгоритм учитывает взаиморасположение частиц в системе.

Verlet-списки разработаны специально для хранения данных в системах моделирования молекулярной динамики. Verlet список составляется для каждой

частицы и содержит индексы частиц, удаленных от текущей не более чем на расстояние R , которое изначально задается перед моделированием и может быть изменено в дальнейшем в ходе вычислений. Двойное включение в список Verlet исключается, используя ограничение, что частица с индексом i имеет только соседей с индексом $j < i$. Список необходимо составлять заново в случае, если частица переместилась на расстояние, которое равно половине Verlet дистанции. Использование Verlet списков позволяет добиться скорости работы алгоритма порядка $O(N^{5/3})$ [3]

4 сравнение методов хранения данных

Основными характеристиками алгоритмов хранения данных в моделировании является скорость выполнения специфических для моделирования операций, а именно поиск пар контактирующих частиц для метода дискретных элементов, а так же затраты памяти на хранение данных. Эти данные приведены в таблице 1 в терминах функции O [4]. В формулах N – количество частиц в моделируемой системе, K – количество ячеек, на которое разбито пространство в списке ячеек и Verlet списках.

Таблица 1. Основные характеристики структур хранения данных

Структура данных	Затраты времени	Затраты памяти
Список частиц	$O(N^2)$,	$O(N)$
Список ячеек	$O(\frac{N^2}{K})$,	$O(N + K)$
Verlet-список	$O(N^{5/3})$	$O(N + K)$

Сравнивая полученные значения можно сделать вывод, что при большом количестве частиц в системе, Verlet списки наиболее оптимальны, так как время моделирования при их использовании в меньшей степени зависит от количества частиц в системе.

Выводы

Проведенный анализ методов хранения данных позволит выбрать наиболее подходящий метод при реализации конкретной задачи, что уменьшит затраты времени разработчиков на проведение исследований и сравнительный анализ.

Литература

- [1] Большая Советская энциклопедия. Серийное производство. Электронный ресурс. Режим доступа: <http://academic.ru/dic.nsf/bse/131789/>
- [2] S. Antonyuk, M. Khanal, J. Tomas, S. Heinrich and L. Moerl. Impact breakage of spherical granules: experimental study and DEM simulation, Chemical Engineering and Processing 45, 2006, 838-856.
- [3] Verlet, L. (1967). "Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules". Phys. Rev. 159: 98–103.
- [4] [Кормен, Т.](#), [Лейзерсон, Ч.](#), [Ривест, Р.](#), [Штайн, К.](#) Глава 3. Рост функций // Алгоритмы: построение и анализ. М.: Вильямс, 2005. — С. 87—108.