

АНДАТПА

Автор: Сарсембаев Магжан Смагулович

Мамандығы: 6D070400 – «Есептеуіш техника және бағдарламалық қамтамасыз ету»

Ғылыми дәрежесі: философия докторы (PhD)

Диссертация тақырыбы: «Жану процестерінің кинетикалық теңдеулерін есептеуге арналған жоғары өнімді GPU алгоритмдерін құру»

Жұмыстың жалпы сипаттамасы. Диссертациялық жұмыс химиялық кинетика есептеулерін жеделдетуге арналған бағдарламалық кешен құруға бағытталған.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі

Жану процестерін дәл модельдеу энергетика, экология, өнеркәсіптік қауіпсіздік және баламалы отын түрлерін зерттеу салалары үшін маңызды ғылыми-техникалық міндеттердің бірі болып табылады. Ішкі жану қозғалтқыштары, газтурбиналық қондырғылар, жылу электр станциялары және өнеркәсіптік жану камералары сияқты жүйелердің тиімділігі мен экологиялық көрсеткіштері жану процесінің қаншалықты дәл сипатталуына тікелей байланысты.

Жану процесі химиялық реакциялар, жылу және масса алмасу, газ динамикасы, көпкомпонентті қоспалардың өзара әрекеттесуі және реакция өнімдерінің түзілуі сияқты күрделі физика-химиялық құбылыстармен сипатталады. Мұндай процестерді толық сипаттау үшін химиялық кинетиканың дифференциалдық теңдеулер жүйесін шешу қажет. Алайда нақты жану механизмдері көптеген химиялық компоненттерден және үлкен реакциялар жиынтығынан тұрады. Осыған байланысты кинетикалық теңдеулерді есептеу үлкен есептеу ресурстарын және жоғары өнімді сандық алгоритмдерді талап етеді.

Дәстүрлі CPU негізіндегі есептеу әдістері күрделі химиялық кинетикалық жүйелер үшін әрқашан жеткілікті тиімді бола бермейді. Реакциялар саны артқан сайын есептеу уақыты айтарлықтай өседі, бұл үлкен механизмдерді қолдана отырып жану процестерін практикалық тұрғыдан қолайлы уақытта модельдеуді қиындатады. Әсіресе көпкомпонентті көмірсутекті отындардың жануын, зиянды шығарындылардың түзілуін, азот оксидтері мен күйе бөлшектерінің пайда болуын модельдеу кезінде есептеу жүктемесі едәуір артады.

Осы мәселелерді шешудің тиімді бағыттарының бірі — химиялық кинетикалық механизмдерді оңтайландыру және есептеу шығынын азайтатын арнайы бағдарламалық құралдарды қолдану. Мұндай тәсілдер күрделі механизмдерді қысқартуға, реакциялар жүйесін тиімді өңдеуге және сандық модельдеуді жылдамдатуға мүмкіндік береді.

Сонымен қатар жоғары өнімді параллель есептеу технологияларын қолдану химиялық кинетика теңдеулерін шешудің маңызды бағыты болып

табылады. GPU архитектурасы бір уақытта көптеген есептеу ағындарын орындауға мүмкіндік береді, ал химиялық кинетика есептерінде реакциялар бойынша орындалатын көптеген операциялар бір-бірінен тәуелсіз болуы мүмкін. Сондықтан мұндай есептерді GPU ағындары арасында параллель үлестіру есептеу уақытын қысқартудың тиімді жолы болып табылады.

Жану процестерін жоғары өнімді есептеу жүйелерінде модельдеу үшін реакциялық ағындарды сипаттайтын заманауи есептеу кешендері мен адаптивті тор әдістері де кеңінен қолданылады. Мұндай тәсілдер күрделі жану құбылыстарын кеңістіктік және уақыттық тұрғыдан неғұрлым дәл сипаттауға мүмкіндік береді.

Осылайша, жану процестерінің кинетикалық теңдеулерін есептеуге арналған жоғары өнімді GPU алгоритмдерін құру қазіргі ғылыми және қолданбалы есептер үшін өзекті бағыт болып табылады.

Кинетикалық теңдеулерді шешу кезінде қосымша күрделілік сандық интегралдаудың әрбір уақыттық қадамында жүйенің оң жақ бөліктерін бірнеше рет есептеу қажеттілігімен байланысты. Егжей-тегжейлі жану механизмдерін қолданған жағдайда әрбір итерация реакция жылдамдықтарының тұрақтыларын есептеуді, стехиометриялық коэффициенттерді өңдеуді, жеке реакциялардың компоненттер концентрациясының өзгерісіне қосатын үлестерін анықтауды және осы үлестерді кейіннен жинақтауды қамтиды. Нәтижесінде салыстырмалы түрде шағын есептің өзі көптеген арифметикалық операцияларды талап етуі мүмкін, ал жүздеген компоненттер мен мыңдаған реакциялардан тұратын механизмдер үшін есептеу жүктемесі бірнеше есе артады.

Мұндай жағдайда есептеулерді параллельдеу ғана емес, графикалық процессор жадысымен жұмысты ұтымды ұйымдастыру да ерекше маңызға ие болады. GPU жады иерархиясын, соның ішінде global memory, shared memory және registers деңгейлерін тиімді пайдалану деректерге қатынау кезіндегі кідірістерді азайтып, есептеу ядросының өнімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Сондықтан химиялық кинетика есептеріне арналған GPU алгоритмдерін әзірлеу кезінде кинетикалық теңдеулердің математикалық құрылымын ғана емес, CUDA құрылғыларының архитектуралық ерекшеліктерін де ескеру қажет. Атап айтқанда, реакцияларды ағындар арасында үлестіру, есептеулерді синхрондау және реакциялардың компоненттер концентрациясының өзгерісіне қосатын үлестерін жинақтау мәселелері маңызды орын алады.

Жұмыстың мақсаты: жану процестерінің кинетикалық теңдеулерін шешуге арналған жоғары өнімді GPU алгоритмдерін әзірлеу, оларды бағдарламалық жүзеге асыру және есептеу тиімділігін арттыру.

Зерттеудің міндеттері.

- Жану процестерінің кинетикалық модельдерін талдау, сандық шешу әдістерін зерттеу

- GPU архитектурасына бейімделген параллель алгоритмдерді құру
- CUDA негізінде бағдарламалық жүзеге асыру, жадыны пайдалану мен есептеу үдерісін оңтайландыру, алгоритмдердің дәлдігі мен өнімділігін бағалау
- CPU және GPU тәсілдерінің салыстырмалы талдауын жүргізу

Зерттеу әдістері

Зерттеу барысында химиялық кинетика теориясының әдістері, математикалық модельдеу, сандық интегралдау әдістері, Рунге–Кутта әдісі, параллель есептеу әдістері, CUDA бағдарламалау технологиясы, GPU жадысын оңтайландыру тәсілдері, CPU және GPU есептеу уақыттарын салыстырмалы талдау, сондай-ақ есептеу тәжірибелерінің нәтижелерін бағалау әдістері қолданылды.

Зерттеу объектісі

Жану процестерін сипаттайтын химиялық кинетикалық механизмдер және олардың негізінде қалыптасатын кинетикалық теңдеулер жүйесі.

Зерттеу пәні

Жану процестерінің кинетикалық теңдеулерін GPU архитектурасында параллель есептеу алгоритмдері, CUDA негізіндегі кинетикалық солверді бағдарламалық іске асыру әдістері және GPU жадысын тиімді ұйымдастыру тәсілдері.

Алынған нәтижелердің ғылыми жаңалығы

Алғаш рет жану процестерін модельдеу есептерінде 162 компоненттен және 1006 реакциядан тұратын химиялық кинетикалық механизмнің теңдеулер жүйесін GPU архитектурасында шешуге арналған жоғары өнімді алгоритм әзірленіп, CUDA негізіндегі алғашқы есептеу кезеңінде CPU әдісімен салыстырғанда 17,5 есе жылдамдату алынды, ал кейін GPU жадысын тиімді ұйымдастыру, shared memory қолдану және есептеу үдерісін оңтайландыру нәтижесінде 493 компоненттен және 2716 реакциядан тұратын күрделі механизм үшін есептеу жылдамдығы CPU әдісімен салыстырғанда 154,89 есеге дейін артты.

Қорғауға шығарылатын тұжырымдар

Ұсынылған GPU алгоритмдері CPU негізіндегі әдістермен салыстырғанда алдымен 17,5 есе жылдамдату көрсетсе, GPU жадысын shared memory арқылы оңтайландыру нәтижесінде есептеу жылдамдығы 154,89 есеге дейін артып, жоғары өнімділікке қол жеткізілді.

Зерттеудің теориялық және практикалық маңыздылығы

Теориялық маңыздылығы: зерттеу нәтижелері химиялық кинетика теңдеулерін жоғары өнімді GPU архитектурасында параллель есептеу әдістерінің дамуына үлес қосады. Жұмыста реакциялар жүйесін CUDA ағындары арасында үлестіру, GPU жады иерархиясын пайдалану және Рунге–Кутта әдісін параллель іске асырудың теориялық және алгоритмдік негіздері қарастырылды.

Практикалық маңыздылығы: әзірленген алгоритмдер мен бағдарламалық шешімдер күрделі жану механизмдерін қысқа уақытта есептеуге мүмкіндік береді. Бұл тәсіл жану процестерін модельдеу, баламалы отындарды зерттеу, энергетикалық қондырғыларды оңтайландыру, зиянды шығарындыларды бағалау және жоғары өнімді ғылыми есептеулер салаларында қолданылуы мүмкін.

Диссертациялық жұмыстың көлемі мен құрылымы. Диссертация кіріспеден, 3 бөлімнен, қорытындыдан, пайдаланылған әдебиеттер тізімі және қосымшадан тұрады. Диссертациялық жұмыстың жалпы көлемі 123 бет, 43 сурет, 3 кесте, 47 формула бар. Әдебиеттер тізімі 74 тақырыптан тұрады.

Жұмыстың апробациясы

Жұмыстың нәтижелері әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің компьютерлік ғылымдар кафедрасы мен ақпараттық технологиялар факультетінің ғылыми семинарларында талқыланып, сонымен қатар келесі конференцияларда баяндалған:

- Сарсембаев М.С., Урмашев Б.А. Разработка кинетического механизма горения метана с образованием оксидов азота и полиароматических молекул // Материалы Международной конференции «Инновационное развитие и востребованность науки в современном Казахстане». – Алматы, 2017.

- Сарсембаев М.С., Макашев Е.П., Урмашев Б.А., Исахов А.А. Влияние сверхзвукового потока температуры на диффузионное горение водорода // Материалы III Международной конференции «Промышленные технологии и инженерия». – Шымкент, 2016.

- Сарсембаев М.С., Урмашев Б.А. Создание кинетического механизма горения метана с образованием оксидов азота // Материалы II Международной научно-практической конференции «Modern Methodology of Science and Education». – Варшава, Польша, 2018.

Жарияланымдар. Диссертация тақырыбы бойынша 4 баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 3 жұмыс ҒЖБССҚК ҚР ұсынған басылымдарда, 1 жұмыс халықаралық дәйексөздер базасына кіретін рецензияланатын журналдарда «Web of Science» және/немесе «SCOPUS», 3 жұмыс халықаралық конференциялар жинақтарында жарияланды. Сонымен қатар, диссертациялық зерттеу нәтижелері негізінде келесі авторлық құқық объектісі тіркелді: «Информационно-вычислительная система для автоматизированной генерации химических моделей описывающих горение реальных топлив» атты авторлық құқық объектісі

Қазақстан Республикасының авторлық құқықпен қорғалатын объектілерге құқықтардың мемлекеттік тізіліміне мәліметтерді енгізу туралы 2020 жылғы 17 қараша берілген № 13255 куәлік тіркелген (Қосымша В).

Зерттеудің ғылыми жобалармен байланысы. Диссертациялық жұмыс келесі ғылыми жобалар аясында орындалды:

– «Нақты отынның жануын сипаттайтын химиялық модельдерді автоматты генерациялауға арналған бұлттық ақпараттық-есептеу жүйесінің теориялық негіздерін және прототипін әзірлеу» (ҒЗЖ №0115PK00770, 2015–2017 жж.);

– «Фармакокинетика мен фармакодинамика үлгілерін автоматты әзірлеу және оңтайландыру үшін бұлттық ақпараттық-есептеу кешенін жасау және енгізу» (IRN жобасы: AP051329, 2018–2020 жж.).