

АННОТАЦИЯ

на диссертационную работу на соискание ученой степени доктора философии (PhD) по специальности 6D070400 «Вычислительная техника и программное обеспечение.»

Сарсембаева Магжана Смағұловича

на тему: «Разработка высокопроизводительных GPU-алгоритмов для расчёта кинетических уравнений процессов горения»

Общая характеристика работы

Диссертационная работа направлена на создание программного комплекса для ускорения вычислений в задачах химической кинетики.

Актуальность темы исследования

Точное моделирование процессов горения является важной научно-технической задачей для энергетики, экологии, промышленной безопасности и исследования альтернативных видов топлива. Эффективность и экологические показатели таких систем, как двигатели внутреннего сгорания, газотурбинные установки, тепловые электростанции и промышленные камеры сгорания, напрямую зависят от точности описания процесса горения.

Процесс горения характеризуется сложными физико-химическими явлениями, такими как химические реакции, тепло- и массообмен, газовая динамика, взаимодействие многокомпонентных смесей и образование продуктов реакции. Для полного описания таких процессов необходимо решать систему дифференциальных уравнений химической кинетики. Однако реальные механизмы горения состоят из большого числа химических компонентов и реакций. В связи с этим расчёт кинетических уравнений требует значительных вычислительных ресурсов и высокопроизводительных численных алгоритмов.

Традиционные методы вычислений на CPU не всегда являются достаточно эффективными для сложных химико-кинетических систем. С увеличением числа реакций время вычислений значительно возрастает, что затрудняет моделирование процессов горения с использованием больших механизмов за практически приемлемое время. Особенно высокая вычислительная нагрузка возникает при моделировании горения многокомпонентных углеводородных топлив, образования вредных выбросов, оксидов азота и частиц сажи.

Одним из эффективных направлений решения этих задач является оптимизация химико-кинетических механизмов и применение специализированных программных средств, снижающих вычислительные затраты. Такие подходы позволяют сокращать сложные механизмы, эффективно обрабатывать системы реакций и ускорять численное моделирование.

Кроме того, применение высокопроизводительных параллельных вычислительных технологий является важным направлением решения уравнений химической кинетики. Архитектура GPU позволяет одновременно выполнять большое количество вычислительных потоков, а в задачах химической кинетики многие операции по реакциям могут выполняться

независимо друг от друга. Поэтому распределение таких вычислений между потоками GPU является эффективным способом сокращения времени расчёта.

Для моделирования процессов горения в высокопроизводительных вычислительных системах также широко применяются современные вычислительные комплексы и методы адаптивных сеток, описывающие реагирующие потоки. Такие подходы позволяют более точно описывать сложные явления горения в пространственном и временном аспектах.

Таким образом, разработка высокопроизводительных GPU-алгоритмов для расчёта кинетических уравнений процессов горения является актуальным направлением для современных научных и прикладных задач.

Дополнительную сложность при решении кинетических уравнений создаёт необходимость многократного вычисления правых частей системы на каждом временном шаге численного интегрирования. При использовании детальных механизмов горения каждая итерация включает расчёт констант скоростей реакций, обработку стехиометрических коэффициентов, вычисление вкладов отдельных реакций в изменение концентраций компонентов и последующее суммирование этих вкладов. В результате даже сравнительно небольшой расчёт может требовать большого числа арифметических операций, а для механизмов с сотнями компонентов и тысячами реакций вычислительная нагрузка возрастает многократно.

В этих условиях особое значение приобретает не только само распараллеливание вычислений, но и рациональная организация работы с памятью графического процессора. Эффективное использование иерархии памяти GPU, включая global memory, shared memory и registers, позволяет сократить задержки при обращении к данным и повысить производительность вычислительного ядра. Поэтому разработка GPU-алгоритмов для задач химической кинетики должна учитывать как математическую структуру кинетических уравнений, так и архитектурные особенности CUDA-устройств, включая распределение реакций между потоками, синхронизацию вычислений и накопление вкладов реакций в изменение концентраций компонентов.

Цель работы

Цель работы — разработка высокопроизводительных GPU-алгоритмов для решения кинетических уравнений процессов горения, их программная реализация и повышение вычислительной эффективности.

Задачи исследования

- анализ кинетических моделей процессов горения и исследование численных методов их решения;
- разработка параллельных алгоритмов, адаптированных к архитектуре GPU;
- программная реализация алгоритмов на основе CUDA, оптимизация использования памяти и вычислительного процесса, оценка точности и производительности алгоритмов;
- проведение сравнительного анализа CPU- и GPU-подходов.

Методы исследования

В ходе исследования использовались методы теории химической кинетики, математическое моделирование, численные методы интегрирования, метод Рунге–Кутты, методы параллельных вычислений, технология программирования CUDA, методы оптимизации памяти GPU, сравнительный анализ времени вычислений на CPU и GPU, а также методы оценки результатов вычислительных экспериментов.

Объект исследования

Объектом исследования являются химико-кинетические механизмы, описывающие процессы горения, и формируемая на их основе система кинетических уравнений.

Предмет исследования

Предметом исследования являются алгоритмы параллельного расчёта кинетических уравнений процессов горения на архитектуре GPU, методы программной реализации кинетического солвера на основе CUDA и способы эффективной организации памяти GPU.

Научная новизна полученных результатов

Впервые в задачах моделирования процессов горения разработан высокопроизводительный алгоритм для решения системы уравнений химико-кинетического механизма, содержащего 162 компонента и 1006 реакций, на архитектуре GPU. На первом этапе вычислений на основе CUDA было получено ускорение в 17,5 раза по сравнению с CPU-методом. В дальнейшем за счёт эффективной организации памяти GPU, применения shared memory и оптимизации вычислительного процесса скорость расчёта для сложного механизма, содержащего 493 компонента и 2716 реакций, была увеличена до 154,89 раза по сравнению с CPU-методом.

Положения, выносимые на защиту

Предложенные GPU-алгоритмы по сравнению с CPU-методами на первом этапе показали ускорение вычислений в 17,5 раза, а в результате оптимизации памяти GPU с применением shared memory скорость вычислений была увеличена до 154,89 раза, что подтверждает их высокую производительность.

Теоретическая и практическая значимость исследования

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что полученные результаты вносят вклад в развитие методов параллельного расчёта уравнений химической кинетики на высокопроизводительной архитектуре GPU. В работе рассмотрены теоретические и алгоритмические основы распределения системы реакций между CUDA-потоками, использования иерархии памяти GPU и параллельной реализации метода Рунге–Кутты.

Практическая значимость исследования состоит в том, что разработанные алгоритмы и программные решения позволяют выполнять расчёт сложных механизмов горения за короткое время. Данный подход может быть применён при моделировании процессов горения, исследовании

альтернативных видов топлива, оптимизации энергетических установок, оценке вредных выбросов и выполнении высокопроизводительных научных вычислений.

Объём и структура диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, трёх разделов, заключения, списка использованных источников и приложения. Общий объём диссертационной работы составляет 123 страниц. Работа содержит 43 рисунка, 3 таблицы и 47 формул. Список использованных источников включает 74 наименования.

Апробация работы

Результаты работы обсуждались на научных семинарах кафедры компьютерных наук и факультета информационных технологий Казахского национального университета имени аль-Фараби, а также были представлены на следующих конференциях:

- 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.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 4 печатные работы, в том числе 3 работы — в изданиях, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования Республики Казахстан, 1 работа — в рецензируемом журнале, входящем в международные базы цитирования Web of Science и/или Scopus, а также 3 работы — в материалах международных конференций.

Кроме того, по результатам диссертационного исследования зарегистрирован объект авторского права: **«Информационно-вычислительная система для автоматизированной генерации химических моделей, описывающих горение реальных топлив»**. Свидетельство №13255 о внесении сведений в Государственный реестр прав на объекты, охраняемые авторским правом, выдано 17 ноября 2020 года в Республике Казахстан (Приложение В).

Связь исследования с научными проектами

Диссертационная работа выполнена в рамках следующих научных проектов:

- «Разработка теоретических основ и прототипа облачной информационно-вычислительной системы для автоматической генерации химических моделей, описывающих горение реального топлива» НИР №0115РК00770, 2015–2017 гг.;

- «Создание и внедрение облачного информационно-вычислительного комплекса для автоматической разработки и оптимизации моделей фармакокинетики и фармакодинамики» проект ИРН: АР051329, 2018–2020 гг.