Қасымбек Нұрислам Мұратбекұлының 8D06103 – Компьютерлік ғылымдар білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін «Тең салмақсыз фильтрация есебін (композициялық модель) шешу үшін белсенді білім түрінде өнімді параллельді алгоритмдерді және параллельді бағдарламалардың орындалу алгоритмдерін әзірлеу» тақырыбынағы диссертациясына

АҢДАТПА

Өзектілігі. Қазіргі заманда жоғары өнімді есептеулер қарқынды дамып келеді, бұл зерттеушілерге әртүрлі жаңа күрделі ғылыми және қолданбалы есептерді, соның ішінде әртүрлі процестерді модельдеуге, үлкен деректерді өңдеуге және жалпы көп есептеу ресурстарын талап ететін міндеттерді шешуге мүмкіндік береді. Осындай есептердің бірі – дифференциалдық теңдеулер жүйесін сандық әдістермен шешу. Дифференциалдық теңдеулер жүйесін сандық әдістермен шешкенде, шешімнің дәлдігін арттырған сайын есептеу ресурстарының, соның ішінде есептеу уақытының қажеттілігі де артады. Суперкомпьютерлерді пайдалану көптеген мәселелерді шешуді едәуір жылдамдатуға мүмкіндік береді.

Сандық есептерді шешу саласында суперкомпьютерде орындалатын тиімді параллель алгоритмдерді әзірлеу мәселесі өзекті болып табылады. Мұндағы тиімділік ұғымы параллель бағдарламалардың орындалу уақытын және жадты пайдалануын азайту, есептеу тораптары арасындағы жүктемені динамикалық бөлу және т.б. қамтиды. Параллель бағдарламалардың жақсы тиімділігін қамтамасыз ету белгілі бір қиындықтар тудыруы мүмкін. Бұл бағытта бағдарламалаушы таңдалған сандық әдістің, кіріс деректердің, есептеу құрылғысының, есептеу тораптары арасындағы жүктемені бөлудің ерекшеліктерін ескеруі тиіс; тек есептеулерді ғана емес, сонымен қатар тораптар арасындағы коммуникацияны да іске асыруы қажет. Тиімді бағдарламаларды жазудың күрделілігі есептеу құрылғыларының біртекті еместігімен, гетерогендігімен (GPU және басқа үдеткіштердің болуы) байланысты.

Жоғары өнімді есептеу жүйелері үшін бағдарламаларды қолмен де, дайын шешімдерді қолдану арқылы да жүзеге асыруға болады. Осындай дайын шешімдердің бірі – LuNA жүйесі, ол тиімді параллель бағдарламаларды әзірлеу мәселелерін шешуге бағытталған.

LuNA – бұл суперкомпьютерде әртүрлі бағдарламаларды параллель түрде орындау үдерісін автоматтандыруға мүмкіндік беретін фрагменттелген бағдарламалау жүйесі. Жоғарыда аталған қасиеттерге қол жеткізу үдерісі бұл жүйеде автоматтандырылған. Автоматты түрде генерацияланған бағдарламалардың сапасы кейбір көрсеткіштер бойынша қолмен жазылған бағдарламалардан төмен болуы мүмкін, дегенмен автоматтандыру бағдарламаны әзірлеуге, жөндеуге және қолдауға жұмсалатын күш-жігерді азайтады.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты – көпфазалы және көпкомпонентті сұйықтық ағынын модельдеу есебін шешуге арналған фрагменттелген алгоритмді әзірлеп, оны LuNA белсенді білімдер базасына енгізілетін түрде жүзеге асыру.

Зерттеу міндеттері:

1) Мұнай өндіру есептерінде көпкомпонентті көпфазалы ағынды модельдеу есебін Ньютон және GMRES әдістері арқылы сандық шешу;
2) Мұнай өндіру есебін шешуге арналған фрагменттелген алгоритмді әзірлеу;
3) Фрагменттелген алгоритмді MPI көмегімен жүзеге асыру;
4) Фрагменттелген алгоритмді LuNA тілінде жүзеге асыру;
5) Әзірленген алгоритмдерді жетілдіру және оларды LuNA жүйесіне енгізілетін түрде ұсыну.

Зерттеу объектісі – мұнай кен орны қабатындағы геофизикалық процестер, жоғары өнімді есептеулер және белсенді білімдер базасы.

Зерттеу пәні – тепе-теңсіз фильтрация есебін шешуге арналған параллель және фрагменттелген алгоритмдер.

Алынған ғылыми нәтижелердің жаңалығы

- алғаш рет Ньютон әдісіне негізделген көпфазалы және көпкомпонентті сұйықтық ағынын модельдеу есебін сандық шешуге арналған фрагменттелген алгоритм әзірленді;

- теңдеулер жүйесімен сипатталатын, симметриясыз және диагональды түрде басым емес матрицалары бар есептер класын шешуге арналған, сипатталған қасиеттері бар кітапханалық ішкі бағдарлама (подпрограмма) жасалды. Бұл бағдарлама есептеу ресурстарын динамикалық түрде басқаруға, сонымен қатар есептеу тораптары арасында жүктемені теңгеруге мүмкіндік береді.

Қорғауға ұсынылатын тұжырымдар:

- Ньютон әдісіне негізделген көпфазалы және көпкомпонентті сұйықтық ағынын модельдеу есебін шешуге арналған ірі блокты әзірленген және іске асырылған фрагменттелген алгоритмдер;

- Фильтрация есебін шешуге арналған, ресурстар мен есептеулерді басқару сияқты динамикалық қасиеттерді қамтамасыз ететін кітапханалық ішкі бағдарламалар (подпрограммалар).

Зерттеудің теориялық және практикалық маңыздылығы

Жұмыстың теориялық маңыздылығы – фильтрация есептерін линеаризациялау және кейінгі сызықтық теңдеулерді шешу үшін параллельді/үлестірілген алгоритмдерді әзірлеу әдістерін зерттеуде жатыр.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы – әзірленген параллельді/үлестірілген алгоритмдерді мұнай өндіру саласындағы көптеген есептерді, сондай-ақ сиретілген матрицалар алгебрасының есептерін шешуде қолдану мүмкіндігінде. Әзірленген фрагменттелген алгоритм LuNA ортасында жүзеге асырылған, бұл оны белсенді білімдер базасына енгізуге және әртүрлі есептеу архитектураларында автоматты түрде орындалуын қамтамасыз етуге мүмкіндік береді. Бұл параллель бағдарламаларды әзірлеуге

кететін еңбек шығындарын едәуір азайтып, құрылымы ұқсас есептерде алгоритмді көп мәрте қайта қолдану мүмкіндігін ашады.

Ғылыми нәтижелердің шынайылығы дәлелденген әдістерді (параллель бағдарламалау, фрагменттелген бағдарламалау, жүктемені теңестіру) қолдану арқылы, әртүрлі параллель алгоритмдердің әртекті есептеу ресурстарында есептеу нәтижелерінің сәйкес келуімен, ұсынылған алгоритмдердің ішкі қарама-қайшылықсыздығымен, сондай-ақ алынған нәтижелердің басқа авторлардың нәтижелерімен сәйкестігімен қамтамасыз етіледі.

Тақырыптың ғылыми-зерттеу бағдарламаларымен байланысы

Диссертациялық жұмыс келесі ғылыми-зерттеу жұмыстар аясында орындалды:

- «Құрылымдалмаған деректерді өңдеу және фильтрация есептеріндегі сандық модельдеу үшін жоғары өнімді параллель бағдарламаларды құрастыруды автоматтандыруға арналған белсенді білімдерді басқару жүйесін әзірлеу» – мемлекеттік тіркеу № 0118РК00741, 2018–2020 жылдарға арналған гранттық қаржыландыру бойынша Математика және механика ҒЗИ орындалған

- «Кеуекті ортада көпфазалы сұйықтық қозғалысын белгісіздік жағдайында жоғары өнімді компьютерлік модельдеу» – мемлекеттік тіркеу № 0121РК00431, 2021–2023 жылдарға арналған гранттық қаржыландыру бойынша «ҚР ҰИА» республикалық қоғамдық бірлестігінде орындалған.

Диссертациялық жұмыстың құрылымы мен мазмұны

Кіріспеде диссертациялық тақырыптың өзектілігі негізделіп, зерттеудің мақсаттары мен міндеттері, ғылыми жаңалығы, зерттеу әдістері мен жұмыстың практикалық маңыздылығы тұжырымдалады, сондай-ақ диссертация бөлімдерінің қысқаша мазмұны беріледі.

Бірінші бөлімде көпкомпонентті көпфазалы ағынды модельдеу есебін шешуге арналған сандық әдістер, параллель архитектуралар, параллель бағдарламалау стандарттары және параллель ішкі бағдарламалар кітапханалары қарастырылады. Зерттеу нәтижелері негізінде қарастырылып отырған есепті шешуге қажетті сандық әдістер таңдалып, параллель алгоритмді әзірлеу үшін фрагменттелген технология қолданылды. Бұл алгоритмдерді жүзеге асыруды жеңілдетіп, есептеу машинасындағы есептеу процестерін автоматты түрде теңгеруге мүмкіндік береді.

Екінші бөлімде кеуекті ортада көпкомпонентті көпфазалы сұйықтық қозғалысының математикалық моделі сипатталады. Сандық шешу тәсілдері қарастырылады және бір өлшемді жағдай үшін айырма схемасы келтіріледі, сондай-ақ сиретілген үлкен матрицалармен жұмыс істейтін сызықтық теңдеулерді шешу алгоритмі сипатталады.

Үшінші бөлімде фрагменттелген алгоритмнің әзірленуі мен оның LuNA жүйесінде жүзеге асырылуы сипатталады. Таңдалған есепті шешуге арналған фрагменттелген алгоритмнің сипаттамасы келтіріледі. Фрагменттелген бағдарламаның орындалу уақытын қысқарту жолдары көрсетіледі.

Төртінші бөлімде жүзеге асырылған параллель алгоритмдердің тиімділігі тұрғысынан тестілеу нәтижелері келтіріледі. Мұнай өндіру есебін шешуге арналған, Ньютон әдісіне негізделген әзірленген алгоритмдердің салыстырмалы талдауы жүргізіледі.

Қорытындыда диссертациялық жұмыста алынған негізгі теориялық және практикалық нәтижелер қорытындыланып, болашақ зерттеулердің мүмкін бағыттары айқындалады және жұмыстың негізгі нәтижелері келтіріледі.

Жұмыстың апробациясы.

Жұмыстың нәтижелері әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің ақпараттық технологиялар факультеті мен компьютерлік ғылымдар кафедрасының ғылыми семинарларында талқыланды, сондай-ақ келесі конференцияларда баяндалды:

- IV Халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция «Информатика және қолданбалы математика» (Алматы, 2019 ж.);
- 17th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery (ECMOR XVII), (online, 2020);
- Қазақстан Республикасы Ғылым қызметкерлері күніне арналған дәстүрлі халықаралық сәуір айындағы математика конференциясы, ҚР ҰҒА академигі Тынысбек Шарипұлы Қалменовтің 75 жылдығына арналған (Алматы, 2021 ж.);
- The 18th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery (ECMOR 2022), (Гаага, Нидерланды, 2022).

Жарияланымдар. Диссертация тақырыбы бойынша барлығы 8 баспа жұмысы жарық көрді, оның ішінде 2 жұмыс ҚР ҒЖБМ БҒССҚК ұсынған басылымдарда, 2 жұмыс «Web of Science» және/немесе «SCOPUS» халықаралық дәйексөздер базасына кіретін рецензияланатын журналдарда, 4 жұмыс халықаралық конференциялар жинақтарында жарияланған:

- Mukhambetzhanov, S. T., Lebedev D.V., Kassymbek N.M., Imankulov T.S., Matkerim B., Akhmed-Zaki D.Zh. (2020). GMRES based numerical simulation and parallel implementation of multicomponent multiphase flow in porous media. Cogent Engineering, 7(1), 1785189. https://doi.org/10.1080/23311916.2020.1785189
- Imankulov T.S., Kassymbek N.M., Lebedev D.V., Matkerim B., Daribayev B.S. Numerical Simulation of Multiphase Multicomponent Flow in Porous Media: Efficiency Analysis of Newton-Based Method. Fluids 2021, 6, 355. https://doi.org/10.3390/fluids6100355
- Қасымбек Н.М., Ахмед-Заки Д.Ж., Иманкулов Т.С., Лебедев Д.В., Кенжебек Е.Ғ. Highperformance and Intelligent Computational Models for Oil Production Problems // Вестник НИА РК 2020 - г. 8 - стр.
- Қасымбек Н.М., Лебедев Д.В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДВУХФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА НЬЮТОНА //

ВЕСТНИК КазНПУ им. Абая, серия «Физико-математические науки», No4(76), 2021 г. с. 38-44

- Касымбек Н.М., МаткеримБ., Лебедев Д.В., Иманкулов Т.С., Ахмед-Заки Д.Ж., Численное моделирование и параллельная реализация многокомпонентного многофазного течения в пористых средах на основе метода GMRES. МАТЕРИАЛЫ IV международной научно-практической конференции "Информатика и прикладная математика", 25-29 сентябрь 2019, Алматы, Казахстан. - С. 253 -260.
- N. Kassymbek, B. Matkerim, D. Lebedev, T. Imankulov and D. Akhmed-Zaki, GMRES Based Numerical Simulation of Multicomponent Multiphase Flow in Porous Media on LuNA Fragmented Programming System, Conference Proceedings, ECMOR XVII, Sep 2020, Volume 2020, p. 1-10.
- Ахмед-Заки Д.Ж., Лебедев Д.В., Қасымбек Н.М. Высокопроизводительное моделирование движения многокомпонентной многофазной жидкости в пористой среде / Традиционная международная апрельская математическая конференция в честь Дня работников науки Республики Казахстан, посвященная 75-летию академика НАН РК Тынысбека Шариповича Кальменова", Международный, КАЗАХСТАН, 05.04-08.04.2021
- Kassymbek, N., Lebedev, D., & Akhmed-Zaki, D. (2022). Optimization of a GMRES-Based Parallel Algorithm for Numerical Simulation of Multicomponent Multiphase Flow in Porous Media. In ECMOR 2022. ECMOR 2022. European Association of Geoscientists & Engineers. https://doi.org/10.3997/2214-4609.202244055