

Nagy Dániel

*Gépészmérnöki Kar
Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék*

Nagy teljesítményű számítástechnika (HPC) alkalmazása a szonokémiában

A szonokémiában kiemelt fontosságúak az alacsony dimenziós hagyományos differenciálegyenletek. A szonokémia fő egyenlete a buborékok összeroppanását leíró Keller-Miksis differenciálegyenlet, amely bár csak két függő változót tartalmaz, de a lehetséges paraméterkombinációk száma nagyon nagy. A szonokémiában azonban késleltetett differenciálegyenletek is megjelenhetnek, mert buborékfelhők esetén az egyik buborék által keltett nyomásingadozás csak bizonyos idő után érkezik meg a többi buborékhoz. **Azonban a késleltetések modellezésére eddig nem volt lehetőség, mivel nem állt rendelkezésre megfelelő teljesítményű késleltetett differenciálegyenlet megoldó szoftver.**

Nagyméretű paramétert tanulmányok esetén több millió vagy milliárd hasonló differenciálegyenlet megoldása szükséges, amelyek mindössze paramétereikben térnek el. A nagyméretű paramétert tanulmányok gyors elkészítéséhez a nagyteljesítményű számítástechnika (HPC – *High Performance Computing*) eszköztárat (*professzionális grafikus kártyák – GPU*) használjuk a szonokémiában egyedülálló módon. Ezekben az esetekben a megoldó programok optimalizálása, párhuzamosítása, a megfelelő algoritmus és programstruktúra kiválasztása elengedhetetlen, amelyek segítségével a futási idő akár 5 nagyságrenddel is felgyorsítható.

A kutatásom során elkészült egy C++-ban írt késleltetett differenciálegyenlet-megoldó csomag hagyományos processzorokra (CPU) és kiegészítésre került a BME-HDS tanszékén fejlesztett *CUDA C* alapú *MPGOS* GPU-s differenciálegyenlet-megoldó csomag egy késleltetett differenciálegyenlet-megoldóval. **Az MPGOS így az első programcsomag a piacon, amely képes késleltetett differenciálegyenletek megoldására GPU-n,** így 2 nagyságrenddel gyorsabb a futási idő, mint az MIT-n fejlesztett *DifferentialEquations.jl* használata esetén és 4 nagyságrenddel gyorsabb a *Wolfram Mathematica* megoldójánál. Ez a késleltetett megoldó így már megfelelő nagyméretű paramétert tanulmányok hatékony futtatására. Ezen előadásban bemutatom, hogy miként használtam a nagyteljesítményű számítástechnika eszközeit a CPU és GPU erőforrások legjobb kihasználására. Továbbá több különböző problémán összehasonlítom az általam készített programokat a már elérhető megoldókkal és probléma specifikus kódokkal. Az egyik ilyen probléma a Keller-Miksis egyenlet.