

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ

**Аннотация.** Рассмотрена задача химической кинетики, проведен расчет изменений концентрации веществ в реакциях по времени и созданию массивно-кинетического инструментария для решения задачи с использованием современных технологий распараллеливания. Описана математическая модель изменения концентраций веществ в системе с одномерным приближением и возможностью ускорения вычислений с использованием технологии CUDA. Расчет на графических процессорах NVIDIA показал, что с увеличением числа химических реакций время вычисления намного уменьшается по сравнению со временем расчета на центральных процессорах.

**Ключевые слова:** горение, механизмы горения, параллельное вычисление, графические процессоры, CUDA, метод Рунге–Кутты.

### ВВЕДЕНИЕ

Тенденция к изучению процесса горения заложена с давних времен. В настоящее время около 90% всей энергии обеспечивается именно процессами горения. В прошлом исследование процесса горения было направлено главным образом на изучение механики сплошной среды, включая тепловыделение за счет химических реакций. Часто такое тепловыделение описывалось с использованием термодинамики, что предполагало бесконечно быстрые химические реакции. В определенной степени подобный подход оказался продуктивным для описания стационарных процессов горения. Однако этого недостаточно для понимания переходных процессов, таких как воспламенение и затухание, а также для объяснения образования вредных выбросов, тем более что проблема образования вредных выбросов при горении ископаемых топлив всегда будет одной из актуальных задач будущего [1].

Физическое описание процесса горения является весьма сложной задачей в связи с многообразием явлений, происходящих от момента воспламенения до самого процесса горения. Несмотря на последние достижения в этой области, необходимость в изучении процесса горения продолжает оставаться актуальной проблемой. Процесс сгорания топлива является основным процессом, в котором теплота топлива превращается в механическую работу [2, 3, 5, 6].

Использование численных методов моделирования, ориентированных на применение суперкомпьютеров, значительно расширяет возможности математического моделирования, позволяя включить в модель факторы, не учитываемые ранее. Детальный анализ динамики горения топлива предполагает строгий учет всех физических процессов, в том числе процессов конвективного теплообмена между газом и продуктами горения и конструктивными элементами оболочки [4, 7].

В процессе реализации параллельно-вычислительного кинетического инструментария для моделирования кинетики химически реагирующих систем для различных приближений было разработано программное обеспечение «Химический калькулятор», с использованием которого уменьшаются временные и вычислительные затраты.

## ПЛАТФОРМА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ CUDA

Графические процессоры для распараллеливания данных при вычислениях в последние годы широко используют при обработке видео и изображений, в вычислительной биологии и химии, при моделировании динамики жидкостей, восстановлении изображений, полученных путем компьютерной томографии, сейсмическом анализе, трассировке лучей и многом другом. Использование такой технологии параллелизации при решении уравнений химической кинетики дает возможность уменьшить временные и вычислительные затраты.

CUDA (Compute Unified Device Architecture — унифицированная архитектура вычислительного устройства) — это архитектура параллельных вычислений на графических ускорителях (графических картах) NVIDIA, позволяющая существенно увеличить вычислительную производительность благодаря использованию GPU (графических процессоров) [8]. Особенность оборудования, поддерживающего технологию CUDA, это возможность обеспечивать на порядок большую по сравнению с кластерами пропускную способность при работе с памятью [9]. Эта технология в графических ускорителях NVIDIA появилась, начиная с восьмой серии. В этом устройстве реализована архитектура параллельных вычислений, которая предоставляет специализированный программный интерфейс для неграфических процессоров.

Логический процессор с поддержкой CUDA можно рассматривать как набор многоядерных процессоров. Основными вычислительными блоками таких видеочипов являются мультипроцессоры, которые состоят из восьми ядер, нескольких тысяч 32-битных регистров, 16 Кбайт общей памяти, текстурных и константных кэшей.

До официального появления технологий CUDA проводились эксперименты по использованию графических карт настольных систем для реализации потоковых вычислений. Так, с помощью графических программно-аппаратных интерфейсов и представления данных в качестве массивов текстур удалось добиться трехкратного увеличения производительности в экспериментах. Отметим также, что одним из ключевых достоинств технологии CUDA является отсутствие необходимости в разработке программ — типов данных и принципов построения вычислений, характерных исключительно для обработки вершин и пикселей при построении кадра.

Реализация вычислений в сочетании CUDA и OpenMP и параллелизма центральных процессоров на уровне языка программирования и программно-аппаратного интерфейса создает еще один уровень прироста производительности.

Публикации, касающиеся не только CUDA, но и предыдущих аппаратных реализаций параллельных вычислений химических задач на графических картах, демонстрируют ускорение в пределах от двух до 15 раз [10–12].

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим задачу химической кинетики для вычисления изменения концентраций веществ в ходе реакции, закон скорости химической реакции на примере реакции, записанной в общем виде:



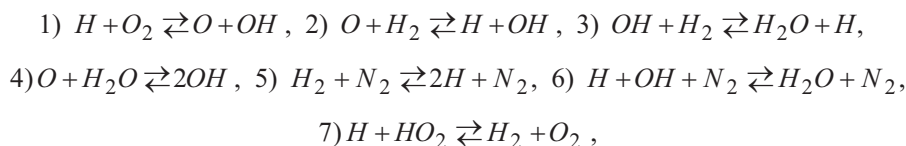
где  $A_1, A_2, A_3, \dots$  — компоненты, участвующие в реакции;  $k$  — константа

скорости. Скорость реакций можно записать следующим образом:

$$\frac{dC_1}{dt} = -kC_1^{a1}C_2^{a2}C_3^{a3} \dots \quad (2)$$

Здесь  $C_1^{a1}, C_2^{a2}, C_3^{a3}, \dots$  — концентрации компонентов, где  $a1, a2, a3, \dots$  — порядки реакций по отношению к компонентам  $A_1, A_2, A_3, \dots$  соответственно.

Рассмотрим пример построения уравнения для окисления иона водорода:



где  $H_2$  — водород,  $O_2$  — кислород,  $N_2$  — азот.

Исходя из формулы (2) определим изменение каждого компонента системы по времени в обобщенном виде следующим образом:

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{i=1}^{Nr} \left( v_{ik}^+ \left[ -k_i^+ \prod_{j=1}^{Nc} C_j^{v_{ij}^+} + k_i^- \prod_{j=1}^{Nc} C_j^{v_{ij}^-} \right] - v_{ik}^- \left[ -k_i^- \prod_{j=1}^{Nc} C_j^{v_{ij}^+} + k_i^+ \prod_{j=1}^{Nc} C_j^{v_{ij}^-} \right] \right), \quad (3)$$

где  $C_k$  — элемент, концентрация которого определяется по времени,  $Nr$  — число реакций,  $Nc$  — число компонент,  $v_{ik}$  — стехиометрический коэффициент  $i$ -й реакции  $j$ -го элемента. Когда реагент  $C_j$  в процессе реакции расщепляется, то стехиометрический коэффициент вычитается (в формуле (3) обозначается как  $v_{ik}^-$ ); если в процессе реакции формируется продукт реакции  $C_j$ , то соответственно  $v_{ik}^+$  равносильно сложению  $v_{ik}$ :

$$\begin{aligned} &C_1 - H_2, \quad C_2 - O_2, \quad C_3 - H_2O, \quad C_4 - OH, \\ &C_5 - H, \quad C_6 - HO_2, \quad C_7 - O, \quad C_8 - N_2. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставляя соответствующие индексы, получаем систему дифференциальных уравнений для каждого компонента:

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{dt} &= -k_2C_1C_7 + k_{-2}C_4C_5 - k_3C_1C_4 + k_{-3}C_3C_5 - k_5C_1C_8 + k_{-5}C_5^2C_8 + \\ &+ k_7C_5C_6 - k_{-7}C_1C_2, \\ \frac{dC_2}{dt} &= -k_1C_2C_5 + k_{-1}C_4C_7 + k_7C_5C_6 - k_{-7}C_1C_2, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{dC_3}{dt} = k_3C_1C_4 - k_{-3}C_3C_5 - k_4C_3C_7 + k_{-4}C_4^2 + k_6C_4C_5C_8 - k_{-6}C_3C_8,$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_4}{dt} &= k_1C_2C_5 - k_{-1}C_4C_7 + k_2C_1C_7 - k_{-2}C_4C_5 - k_3C_1C_4 + k_{-3}C_3C_5 + \\ &+ 2k_4C_3C_7 - 2k_{-4}C_4^2 + 2k_5C_1C_8 - 2k_{-5}C_5^2C_8 - k_6C_4C_5C_8 + k_{-6}C_3C_8, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_5}{dt} &= -k_1 C_2 C_5 + k_{-1} C_4 C_7 + k_2 C_1 C_7 - k_{-2} C_4 C_5 + k_3 C_1 C_4 - k_{-3} C_3 C_5 + \\ &+ 2k_5 C_1 C_8 - 2k_{-5} C_5^2 C_8 - k_6 C_4 C_5 C_8 + k_{-6} C_3 C_8 - k_7 C_5 C_6 + k_{-7} C_1 C_2, \\ \frac{dC_6}{dt} &= -k_7 C_5 C_6 + k_{-7} C_1 C_2, \\ \frac{dC_7}{dt} &= k_1 C_2 C_5 - k_{-1} C_4 C_7 - k_2 C_1 C_7 + k_{-2} C_4 C_5 - k_4 C_3 C_7 + k_{-4} C_4^2, \\ \frac{dC_8}{dt} &= 0. \end{aligned}$$

Поскольку изменение концентрации веществ в такой системе по времени непосредственно зависит от скорости длительности реакции, нам потребуется определить скорости прямой и обратной реакций:

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (i=1, \dots, I). \quad (6)$$

Здесь стехиометрические коэффициенты  $v_{ki}$  — целые числа;  $\chi_k$  — химический символ  $k$ -го вещества;  $v'_{ki}$  — стехиометрические коэффициенты реагентов;  $v''_{ki}$  — стехиометрические коэффициенты продуктов. Обычно в элементарных реакциях участвуют три или четыре вещества.

Скорость образования  $\dot{\omega}_k$   $k$ -го вещества вычисляется по формуле

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I v_{ki} q_i \quad (k=1, \dots, K), \quad (7)$$

где  $v_{ki} = v''_{ki} - v'_{ki}$ .

Скорость изменения длительности  $i$ -й реакции определяется по формуле

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{ki}}. \quad (8)$$

Здесь  $[X_k]$  — молярная концентрация  $k$ -го вещества;  $k_{fi}$  и  $k_{ri}$  — скорость прямой и обратной реакций соответственно. Из этого соотношения получим константу равновесия

$$K_{c_i} = \frac{k_{fi}}{k_{ri}}. \quad (9)$$

Скорость прямой реакции определяется формулой Аррениуса

$$k_{fi} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_i}{R_c T}\right), \quad (10)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $A_i$  — предэкспоненциальный множитель, который не зависит от температуры, а определяется только видом реакции;  $\beta_i$  — температурный экспонент;  $E_i$  — энергия активации  $i$ -й реакции, которую можно охарактеризовать как некоторую пороговую энергию. Так, если энергия сталкивающихся частиц меньше  $E_i$ , то при их столкновении реакции не произойдет; если энергия превышает  $E_i$ , то реакция произойдет. Энергия активации не зависит от температуры.

Графическая зависимость  $k_{fi}(T)$  представлена на рис. 1.

При низких температурах химические реакции протекают очень медленно. При очень высоких температурах константа скорости стремится к предельному значению:  $k_{fi} \rightarrow A_i$ . Это свидетельствует о том, что все молекулы являются химически активными и каждое столкновение приводит к реакции.

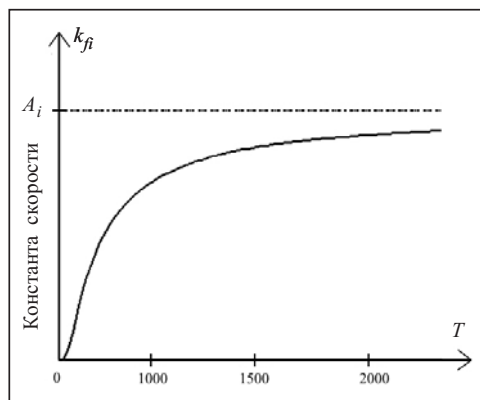


Рис. 1. Графическая зависимость  $k_{fi}(T)$

Скорость обратной реакции определяется по формуле

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{K_{c_i}}, \quad (11)$$

где

$$K_{c_i} = K_{p_i} \left( \frac{P_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^K \nu_{ki}}. \quad (12)$$

Коэффициент равновесия определяется по формуле

$$K_{p_i} = \exp \left( \frac{\Delta S_i^0}{R} - \frac{\Delta H_i^0}{RT} \right), \quad (13)$$

где  $\Delta S_i^0$  — энтропия,  $\Delta H_i^0$  — энтальпия веществ, описывающая изменение, которое происходит при переходе полностью от реагентов к продуктам в  $i$ -й реакции:

$$\frac{\Delta S_i^0}{R} = \sum_{k=1}^K \nu_{ki} \frac{S_k^0}{R}, \quad (14)$$

$$\frac{\Delta H_i^0}{RT} = \sum_{k=1}^K \nu_{ki} \frac{H_k^0}{RT}. \quad (15)$$

В программном комплексе Chemkin эти коэффициенты разделены на две группы согласно двум промежуткам температурного интервала (область низкой и область высокой температуры). В этом случае для вычисления термодинамических свойств (энтальпий и энтропий) данного вещества используются следующие формулы:

$$\frac{H_k^0}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T_k + \frac{a_{3k}}{3} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5} T_k^4 + \frac{a_{6k}}{6}, \quad (16)$$

$$\frac{S_k^0}{R} = a_{1k} \ln(T_k) + a_{2k} T_k + \frac{a_{3k}}{2} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4} T_k^4 + a_{7k}. \quad (17)$$

Коэффициент  $a_i$  для  $k$ -го вещества взят из файла термодинамических данных веществ (рис. 2).

После определения скоростей изменения веществ в реакции решаем вышеуказанную систему дифференциальных уравнений. Данная формулировка определения обратной скорости реакции обычно не применяется для реакции,

$$H_k^o = \int_0^{T_k} C_{pk}^o dT + H_k^o(0) \Rightarrow \frac{H_k^o}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T_k + \frac{a_{3k}}{3} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5} T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k}$$

$$S_k^o = \int_{298}^{T_k} \frac{C_{pk}^o}{T} dT + S_k^o(0) \Rightarrow \frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T_k + a_{2k} T_k + \frac{a_{3k}}{2} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4} T_k^4 + a_{7k}$$

$$K_{pi} = \exp\left(\frac{\Delta S_i^o}{R} - \frac{\Delta H_i^o}{RT}\right)$$

C2H5O2	C	2H	5O	20	00	300.00	5000.00	1000.00	1	
0.78275410E+01	0.15347090E-01	0.56108700E-05	0.10465070E-08	0.71520540E-13					2	
-0.45527100E+04	0.12726800E+02	0.39390180E+01	0.13991490E-01	0.21720800E-04					3	
-0.36137480E-07	0.14824910E-10	0.28469040E+04	0.10394470E+02						4	
C2H5O	T11/820	1C	2H	5	0G	300.000	5000.0	1000.0	1	
0.60114346E+01	0.12165219E-01	0.40449604E-05	0.59076588E-09	0.30969595E-13					2	
-0.49366992E+04	0.67901798E+01	0.17302504E+01	0.16908489E-01	0.39996221E-05					3	
-0.13711180E-07	0.57643603E-11	0.32922483E+04	0.17336115E+02	0.20138288E+04					4	
C2H5OH	L	8/88C	2H	6O	1	OG	200.000	6000.00	1000.0	1
0.65624365E+01	0.15204222E-01	0.53896795E-05	0.86225011E-09	0.51289787E-13					2	
-0.31525621E+05	0.94730202E+01	0.48586957E+01	0.37401726E-02	0.69555378E-04					3	
-0.88654796E-07	0.35168835E-10	0.29996132E+05	0.48018545E+01	0.28257829E+05					4	

Рис. 2. Связь, определяющая место термодинамических данных веществ в файле Chemkin

проходящей с участием электронов. Для решения таких задач используется уравнение Саха [1].

#### МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Для моделирования кинетики химических реагирующих систем используется метод Рунге–Кутты 4-го и 5-го порядков. С помощью этого метода был написан код программы на языке C++ для последовательного вычисления на центральном процессоре, и для параллельного вычисления использована технология CUDA.

#### Алгоритм вычисления изменения концентрации по методу Рунге–Кутты 4-го и 5-го порядков.

1. Выделение памяти для массивов.
2. Чтение входных данных из файла (данные о прямых и обратных скоростях реакции, данные о концентрации, коэффициенты левой и правой матриц реакционного механизма).
3. Вычисление изменений концентрации для каждого элемента реакционного механизма в заданной временной точке.
4. Запись новых значений концентраций в файл.
5. Проверка времени вычисления: если время на данном шаге меньше, чем общее время вычислений, то возвращаемся к п. 3; в противном случае останавливаем вычисление.

#### Алгоритм распараллеливания данных при вычислении на графическом устройстве по методу Рунге–Кутты 4-го и 5-го порядков.

1. Чтение входных данных из файла (данные о прямых и обратных скоростях реакции, данные о концентрации, коэффициенты левой и правой матриц реакционного механизма).
2. Выделение памяти на графическом устройстве для копирования входных данных.
3. Копирование данных из оперативной памяти в память графического процессора.
4. Определение числа нитей на одном блоке и числа блоков на сетке.

5. Вычисление изменения концентрации для каждого элемента реакционно-го механизма в заданной временной точке:

- 1) вызов функции вычисления на графическом процессоре первого коэффициента (GPU) по методу Рунге–Кутты;
- 2) вызов функции вычисления на GPU второго коэффициента по методу Рунге–Кутты и вычисление изменения концентрации на данном временном шаге;
- 3) вызов функции вычисления на GPU третьего коэффициента по методу Рунге–Кутты и вычисление изменения концентрации на данном временном шаге;
- 4) вызов функции вычисления на GPU четвертого коэффициента по методу Рунге–Кутты 4-го порядка и вычисление изменения концентрации на данном временном шаге;
- 5) вызов функции вычисления на GPU пятого коэффициента по методу Рунге–Кутты 5-го порядка и вычисление изменения концентрации на данном временном шаге;
- 6) вызов функций вычисления на GPU для замены всех значений концентраций веществ с новыми значениями;
- 7) копирование данных из памяти GPU в память CPU и запись новых значений концентраций в файл.

6. Проверка времени вычисления: если время на данном шаге меньше, чем общее время вычислений, то возвращаемся к п. 5; в противном случае останавливаем вычисление.

В табл. 1 даны результаты времени расчета на CPU и GPU при разных размерах входного механизма. При расчетах использовался механизм Aramco\_Mech. Применялся метод Рунге–Кутты 4-го порядка. Шаг времени (dt, сек) составлял  $1,00E-19$ , время вычисления ( $1000*dt$ , сек)  $1,00E-16$ . Каждый модуль вычисляет, насколько изменилась концентрация химического вещества при данной реакции в заданном временном интервале. Например, при использовании 21 элемента число реакций соответствует 51, при этом ускорение процесса составляет 0,76 от вре-

**Таблица 1**

Число элементов	Число реакций	Время на CPU (мсек)	Время на GPU (мсек)	Ускорение процесса вычисления
21	51	6901,00	9080,24	0,76
33	118	39081,00	20204,50	1,93
39	191	87735,00	29619,10	2,96
52	245	199169,00	49747,80	4,00
61	301	336749,00	67557,10	4,98
66	376	491811,00	83188,70	5,91
84	448	946439,00	125339,00	7,55
103	565	1795548,00	186175,00	9,64
162	1006	6832052,80	390403,00	17,5

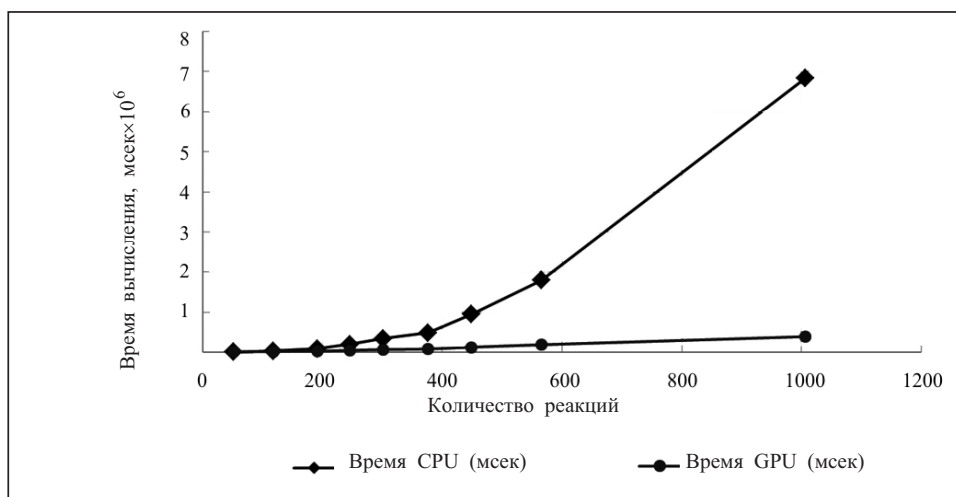


Рис. 3. Графики вычисления по времени (мсек) на CPU и GPU методом Рунге-Кутты 4-го порядка

менной скорости. При увеличении количества элементов до 33 мы добиваемся ускорения до 1,93 раза. Последующие увеличения количества элементов позволяют ускорить процесс до 17,5 раз при 162 элементах и 1006 реакциях. Так как распараллеливание проводится по реакциям, то с увеличением количества реакций в механизме вычисления на GPU дает заметный выигрыш по времени (рис. 3).

Таким образом, при использовании графических процессоров имеем заметное повышение скорости вычисления и при этом данный процесс занимает мало времени.

#### ИНТЕРФЕЙС ПРОГРАММЫ

В процессе реализации массивно-параллельного кинетического инструментария для моделирования кинетики химически реагирующих систем для различных приближений было разработано программное обеспечение «Химический калькулятор». Работа программы объединяет процесс вычисления как на центральном процессоре, так и на графических процессорах NVIDIA с использованием технологий CUDA. Графический интерфейс программы разработан на языке программирования C# с учетом того, чтобы пользователю было максимально удобно выполнять решение задач с химическими реагирующими системами. Вид основного интерфейса представлен на рис. 4.

При проведении вычислений в разработанной программе используются сокращенные файлы механизма Chemkin. Это позволяет пользователю трансформировать свои объемные механизмы в формат Chemkin. Пользователь может загружать эти файлы, задействуя меню «Файл» → «Реакции» и «Файл» → «Термодинамические свойства». После загрузки входного файла в области программы создается «Входной файл». Здесь разделителем между реакциями и термодинамическими свойствами веществ является строка с названием «THERM». Чтение данных из области «Входной файл» проводится построчно и результаты чтения записываются в область «Результаты чтения».

При чтении определяются количества реагентов и реакций в данном механизме, коэффициенты формулы Аррениуса, формируются левая и правая матрицы для реакционного механизма и термодинамические данные для каждого эле-



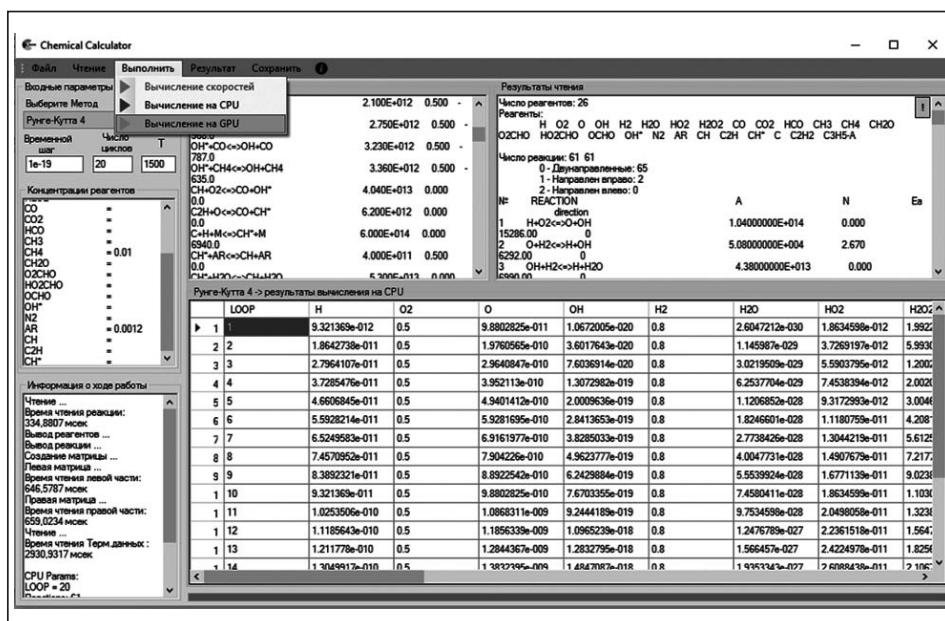


Рис. 4. Главный интерфейс программы «Химический калькулятор»

мента в механизме. Определение этих данных осуществляется выбором одного пункта меню «Чтение» → «Чтение данных из файла». После этого вводятся входные данные для проведения вычислений путем выбора определенного метода из выпадающего списка. Вычисления можно проводить как на центральном процессоре, так и на графическом. Проведенный расчет на графических процессорах NVIDIA показал, что с увеличением числа реакций время вычислений намного уменьшается по сравнению со временем расчета на центральных процессорах.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При проведении вычислений в разработанной программе используются сокращенные файлы механизма Chemkin. Это позволяет пользователю применять в созданном проекте свои объемные механизмы в формате программного комплекса Chemkin. Вычисления концентраций химических веществ можно провести как на центральном процессоре, так и на графическом. При проведении расчета на графических процессорах NVIDIA с увеличением числа химических реакций время вычисления уменьшается по сравнению с временем расчета на центральных процессорах.

В программе реализованы модули для автоматизированного чтения данных из входных файлов на формате программного комплекса Chemkin, вычислительные алгоритмы расчета скоростей реакций, получение изменения концентраций веществ по времени. Основные вычисления проводят с использованием методов Рунге–Кутты 4-го и 5-го порядков. Вычисление на центральном процессоре проводится с использованием последовательного алгоритма. Вычисление на графических картах NVIDIA с использованием технологий распараллеливания CUDA проводится параллельно.

С помощью созданной программы проведен сравнительный анализ временного интервала вычислений на центральном и графическом процессорах. В результате при использовании механизма Aramco\_Mech с числом элементов 162 и

числом реакций 1006 ускорение процесса вычислений с использованием графических карт позволяет сократить время в 17,5 раз по сравнению с вычислением на центральном процессоре.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Varnatts Yu., Maas U., Dibble R. Burning physical and chemical aspects, modeling, experiments, formation of pollutants. Trans. Agafonova G.L., Ed. Vlasov P.A. Moscow: Fizmatlit, 2003. 352 p.
2. Pio G., Ricca A., Palma V., Salzano E. Low temperature combustion of methane/alkenes mixtures. *Fuel*. 2019. Vol. 254. Article 115567. P. 224–231. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.05.150>.
3. Kuppa K., Nguyen H.D., Goldmann A., Korb B., Wachtmeister G., Dinkelacker F. Numerical modelling of unburned hydrocarbon emissions in gas engines with varied fuels. *Fuel*. 2019. Vol. 254. Article 115532. P. 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.05.115>.
4. Syrodoy S., Penyazkov O., Assad M., Gutareva N. Mathematical modeling of the electric spark ignition of the coal-water particle fuel under conditions relevant to the internal combustion engines. MATEC Web of Conferences. 2016. Vol. 92. Article 01028. P. 1024–1030. <https://doi.org/10.1051/mateconf/20179201028>.
5. Sathiah P., Holler T., Kljenak I., Komen E. The role of CFD combustion modeling in hydrogen safety management. V. Validation for slow deflagrations in homogeneous hydrogen-air experiments. *Nuclear Engineering and Design*. 2016. Vol. 310. P. 520–531. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2016.06.030>.
6. Fattah I.M.R., Yip H.L., Jiang Z., Yuen Anthony C.Y., Yang W., Medwell P., Kook S., Yeoh G., Chan Q. Effects of flame-plane wall impingement on diesel combustion and soot processes. *Fuel*. 2019. Vol. 255. Article 115726. P. 59–69. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.115726>.
7. Zhabasbaev U.K., Makashev E.P. Diffusion combustion of a system of plane supersonic hydrogen jets in a supersonic flow. *Combustion explosion and shock waves*. 2003. Vol. 39. P. 415–422.
8. NVIDIA CUDA parallel computing platform Programming Guide. URL: <http://www.nvidia.ru/object/cuda-parallel-computing-ru.html>.
9. Harris M. Mapping computational concepts to GPUs. *GPU Gems*. 2006. Vol. 2. P. 493–508.
10. Hall J.D., Carr N.A., Hart J.C. Cache and bandwidth aware matrix multiplication on the GPU. URL: <http://graphics.cs.illinois.edu/sites/default/files/UIUCDCS-R-2003-2328.pdf>.
11. Horn D. Stream reduction operations for GPGPU applications. *GPU Gems*. 2006. Vol. 2. P. 573–589.
12. Sosutha Sa., Mohana Db. Heterogeneous parallel computing using CUDA for chemical process. *Procedia Computer Science*. 2015. Vol. 47. P. 237–246. <https://doi.org/10.1016/j.procs.2015.03.203>.

Надійшла до редакції 19.09.2019

**М.С. Сарсембаєв, Б.А. Урмашев, Н. Младенович, В.А. Заславський**  
**ВИКОРИСТАННЯ ТЕХНОЛОГІЇ CUDA ДЛЯ ПРИСКОРЕННЯ ОБЧИСЛЕНЬ**  
**В ЗАДАЧАХ ХІМІЧНОЇ КІНЕТИКИ**

**Анотація.** Розглянуто задачу хімічної кінетики, проведено розрахунок змін концентрації речовин в реакціях за часом і створення масивно-кінетичного інструментарію для розв'язання задачі з використанням сучасних технологій розпаралелювання. Описано математичну модель зміни концентрацій речовин в системі з одновимірним наближенням і можливістю прискорення обчислень з використанням технології CUDA. Розрахунок на графічних процесорах NVIDIA показав, що зі збільшенням кількості хімічних реакцій час обчислення набагато зменшується в порівнянні з часом розрахунку на центральних процесорах.

**Ключові слова:** горіння, механізми горіння, паралельне обчислення, графічні процесори, CUDA, метод Рунге-Кутти.

**M. Sarsembayev, B. Urmashhev, N. Mladenovic, V.A. Zaslavskiy**  
**SOLVING THE PROBLEMS OF CHEMICAL KINETICS BY USING THE CUDA TECHNOLOGY**

**Abstract.** The paper focuses on the problem of chemical kinetics, calculation of changes in the concentration of substances in the reactions over time, and creation of a mass kinetic solver to solve the problem using modern parallelization technologies. A mathematical model of variation in the concentration of substances in a system with a one-dimensional approximation and the possibility of accelerating the calculations using the CUDA technology are described. The calculation performed on NVIDIA graphic processor showed that an increase in the number of responses much reduces the computing time as compared with the computing time on the central processors.

**Keywords:** combustion, combustion mechanisms, parallel computation, graphic processors, CUDA, Runge-Kutta method.

**Сарсембаєв Магжан Смагулович,**  
PhD студент Казахского національного университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,  
e-mail: sarsembayev.magzhan@gmail.com.

**Урмашев Байдаулет Амантаевич,**  
кандидат физ.-мат. наук, доцент Казахского национального университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан, e-mail: baydaulet.urmashev@gmail.com.

**Младенович Ненад,**  
доктор мат. наук, профессор Математического института Сербской академии наук и искусств, Белград, Республика Сербия, e-mail: nenad@mi.sanu.ac.rs.

**Заславский Владимир Анатольевич,**  
доктор техн. наук, профессор, профессор кафедры Киевского национального университета имени Тараса Шевченко, e-mail: zas@unicyb.kiev.ua.