

JMK tezės, 2018 m. balandžio 13 d., Vilnius, Lietuva
© VGTU, 2018

ŠIUOLAIKINĖS EFEKTYVAUS LYGIAGRETINIMO SU FPGA TECHNOLOGIJOS

ANDREJ BUGAJEV

Vilniaus Gedimino technikos universitetas
Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva
El-paštas: anb@vgtu.lt

Pranešimas skirtas skaičiavimams su FPGA, naudojant šiuolaikinius technologinius sprendimus. Konceptija, kuria remiasi tokie skaičiavimai, vadinama Dataflow computing. Pagrindinis principas yra skaičiavimų konvejerio sudarymas programos lygmenyje. Dataflow kompiuteriai orientuoti į duomenų judėjimo optimizavimą įsisavinant masinį lygiagretumą tarp tūkstančių smulkiu dataflow branduolių. Palyginus su tradiciniais lygiagretinimo būdais, tai leidžia pasiekti kitos eilės skaičiavimų našumą, sutaupant erdvę ir elektros energiją.

Bus pristatomi uždaviniai, sėkmingai išspręsti naudojant minėtą technologiją, ir pagrindiniai technologijos veikimo principai.

Organinių molekulių Furjė transformacijos spektroskopijos spektrinių požymių nustatymo metodai

Ignas Dapšys, Mindaugas Karaliūnas

Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Sauletekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

El-paštas: chemikasdapsys@gmail.com

Furjė transformacijos spektroskopija terahercų (THz) bangų ruože yra patikimas ir jautrus organinių molekulių aptikimo ir atpažinimo metodas [1]. Apšvietus bandinį THz spinduliuote, dalis spinduliuotės atsispindi nuo paviršiaus dėl laisvos erdvės ir bandinio lūžio rodiklių skirtumo, dalis praeina pro bandinį sąveikaudama su tiriamąja medžiaga. Praėjusi (pralaidumo konfigūracijoje) arba atsispindėjusi (atspindžio konfigūracijoje) THz spinduliuotė registruojama detektoriumi, kuris matuoja elektrinio lauko stiprį arba intensyvumą.

Atlikus išmatuotų impulsų Furjė transformaciją, rezultatai yra perkeliama iš laiko srities į dažnio sritį. Turint pralaidumo ir palyginamąjį spektrus, bei žinant bandinio storį, galima apskaičiuoti sugerties spektrą THz dažnių ruože.

Vis dėlto spektroskopijos taikymas yra ribotas grynomis cheminėms medžiagoms ir jų mišiniais. Organinių molekulių aptikimui natūraliose aplinkose, tokiose kaip augalų pluoštai arba ekstraktai, reikia atsižvelgti į spektrus iškraipiančius faktorius:

1. Natūraliose aplinkose esančių organinių molekulių sugerties linijos yra išplitusios ir persikloja su kitų aplinkos sudedamųjų dalių spektriniais požymiais [2, 3].
2. Dėl mišinio komponentų sąveikos atsiranda papildomi spektriniai požymiai, nebūdingi pavieniems komponentams. Be to, ieškomos medžiagos sugerties linijos gali išplisti arba pasislinkti dažnių skalėje.

Del šių priežasčių sunku vienareikšmiškai atpažinti ieškomų medžiagų spektrinius požymius.

Šiam tikslui pasiekti sukūrėme metodą, paremtą mažiausių kvadratų aproksimavimu. Jį išbandėme su sintetiniais ir realiais spektrais. Pastariesiems reikalingas filtravimas, nes juose yra ne vien grynų Gauso funkcijos – yra įvairių iškraipymų. Filtravimas vykdomas trimis žingsniais: (1) triukšmo šalinimas polinominės regresijos metodu; (2) diferencinio spektro gavimas atimant tendencijos liniją; (3) diferencinio spektro filtravimas pritaikius juostinį filtrą. Atlikus šiuos žingsnius, mūsų pasiūlytas metodas tampa tinkamas realiems spektrams.

Šiame pranešime detalčiau aptarsime siūlomą metodą ir bandymų su dirbtiniais ir realiais spektrais rezultatus.

LITERATŪRA

- [1] Jepsen, P.U. and Cooke, D.G. and Koch, M. “Terahertz spectroscopy and imaging – Modern techniques and applications”. *Laser & Photonics Reviews*, **5** 1 (2011).
- [2] Karaliūnas, M., Venckevičius, R., Kašalynas, I., Puc, U., Abina, A., Jeglic, A., Zidanšek, A., and Valušis, G. “Investigation of pharmaceutical drugs and caffeine-containing foods using fourier and terahertz time-domain spectroscopy”. *Proc. SPIE*, **9585** 95850U (2015).
- [3] Karaliūnas, M., Jakštas, V., Nasser, K. E., Venckevičius, R., Urbanowicz, A., Kašalynas, I., and Valušis, G. “Application of terahertz spectroscopy for characterization of biologically active organic molecules in natural environment”. *Proc. SPIE*, **9934** 99340P (2016).

VIENO UŽDAVINIO TRIJŲ LYGMENŲ LYGIAGRETINIMO SCHEMOS TYRIMAS

RIMA KRIAUSIENĖ^{a,b}, ANDREJ BUGAJEV^b and RAIMONDAS ČIEGIS^b

^a *Vilniaus universiteto duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institutas*

Akademijos g. 4, LT-04812 Vilnius

^b *Vilniaus Gedimino technikos universitetas*

Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

El-paštas: rima.kriausiene@vgtu.lt

Šiame darbe pristatome trijų lygmenų lygiagretinimo schemą. Kiekvienas lygiagretinimo lygmuo pasižymi skirtingomis savybėmis, todėl kelia skirtingus iššūkius. Trečiame lygmenyje naudojamas Vango lygiagretusis algoritmas trijstrižainėms sistemoms spręsti. Naudojamo algoritmo sudėtingumas yra blogesnis už nuoseklaus, tačiau šis algoritmas leidžia išspręsti antrojo lygmens problemą, kai uždavinių dydžiai skirtingi. Antrasis lygmuo – klasikinis, turime M nepriklausomų uždavinių ir juos sprendžiame lygiagrečiai. Didžiausia problema – skirtingi uždavinio dydžiai, nes diskretizacija reikalauja skirtingo taškų skaičiaus pagal laiką ir erdvę, norint gauti tą pačią paklaidą. Šiai problemai spręsti siūlome euristiką, kuri leidžia paskirstyti užduotis tarp procesorių – tai vienas iš pagrindinių šio darbo tikslų. Pirmame lygmenyje siūlome simplekso metodo skaičiavimo eigos išlygiagretinimą. Šis lygmuo įvedamas norint pagerinti algoritmo išplečiamumą.

Šie lygiagretinimo lygmenys reikalingi, norint efektyviai panaudoti esamus išteklius. Siūlomas įrankis (euristika) nusprendžia, kiek reikia procesorių panaudoti, turint atitinkamą procesorių skaičių. Šiame darbe orientuojamės į vieną aktualų taikymo uždavinį, kada uždavinys, kurį spręsimė, yra optimizavimo algoritmo lygiagretinimas.

ELEKTRONŲ SRAUTO DOZĖS SKAIČIAVIMAS HOGSTROMO ALGORITMU

EDGARAS ŠIMKUS

Vilniaus Gedimino technikos universitetas

Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

El-paštas: edgaras.simkus@stud.vgtu.lt

Šiame pranešime pristatomas Hogstromo algoritmas skirtas apskaičiuoti elektronų srauto dozę nehomogeniškoje terpėje. Remiantis šio algoritmo rezultatais, išskiriamos elektronų srauto paveiktos terpės sritys. Numatytas esminis šio rezultato tikslas yra kuo didesne energija paveikti norimą terpės sritį, tačiau kartu – kaip galima mažiau, šia spinduliuote, paveikti šios srities aplinką.

Aprašytas uždavinys ypatingai aktualus medicinos fizikoje, radiologijos srityje, kur nuo vėžinių susirgimų kenčiantys pacientai gydomi išorine fotonų ar elektronų spinduliuote. Nepaisant gydymo metodų ir technologijų įvairovės šioje srityje, gydymas išorine spinduliuote lieka nepakeičiamas.

Spinduliuotės skaičiavimo uždaviniuose standartu pripažinti Monte Karlo metodai, kurie naudojami komerciniuose technologijų paketuose „Varian“, „Accuray“ ar kt. Verta paminėti, kad yra ir atviro kodo Monte Karlo paketų skirtų spinduliuotei apskaičiuoti, pavyzdžiui, „EGSnrc“. Monte Karlo metodai gali pasiekti praktikoje reikalaujamą tikslumą, tačiau tai reikalauja didelių skaičiavimo resursų, o kartu – laiko skaičiavimams atlikti. Alternatyva – Hogstromo algoritmas, kuriame naudojami pieštukiniai spinduliai ir išvengiama Monte Karlo tipo skaičiavimų.

Išraiškoje (1) pateikiamas dvimatis, galutinio uždavinio matematinis modelis, į kurį įtraukiami medicinos fizikų pateikiami duomenys, kurie priklauso nuo ekspertų naudojamos technikos bei paciento kompiuterinės tomografijos nuotraukų informacijos.

$$D(x, z) = \left(\frac{SSD}{SSD + z} \right)^2 \frac{g(z)}{2\sigma_{MCS}^2(z)} \int_{-A}^A e^{-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_{MCS}^2(z)}} W(x') F_{air}(x', y') dx'. \quad (1)$$

Šio pranešimo tikslas – įvertinti Hogstromo algoritmo pranašumus ir trūkumus lyginant jį su Monte Karlo metodais, nustatyti kokiomis sąlygomis galima pasikliauti ir teikti pirmenybę Hogstromo algoritmui, o kada užleisti vietą Monte Karlo metodams atsižvelgiant į tikslumą, skaičiavimų laiką, išlygiagretinimo galimybes bei skaičiavimams reikalingus duomenis.

LITERATŪRA

- [1] K. Hogstrom, M. Mills, P. Almond. Electron beam dose calculations. *Physics in medicine and biology*, **26** .1981, 445-459
- [2] R. Parker, P. Hobday, K. Cassell. The direct use of CT numbers in radiotherapy dosage calculations for inhomogeneous media. *Physics in medicine and biology*, **24** 4.1979, 802-809
- [3] L. Eyges. Multiple scattering with energy loss. *Phys. Rev.*, **74** .1948, 1534-1545

Foto-laidžių terahercų antenų fizikinių modelių hierarchija

Gediminas Šlekas^{a,b} and Raimondas Čiegis^a

^a *Vilniaus Gedimino technikos universitetas*

Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

^b *Fizinių ir technologijos mokslų centras*

Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius, Lietuva

El-paštas: gediminas.slekas@ftmc.lt

Terahercas (THz) vadinamas elektromagnetinių bangų diapazonas apimantis dažnių ruožą nuo 300 GHz iki 3 THz. Terahercų spinduliuotė pasižymi tuo, kad yra nejonizuojanti, tačiau prasiskverbia į objektus giliau nei infraraudonoji, o jos erdvinė raiška yra geresnė nei mikrobangų. Dėl tokių savybių THz turi itin didelį pritaikymo potencialą aplinkos stebėjimui, cheminių junginių atpažinimui, medžiagų charakterizavimui, medicininiuose stebėjimuose, biojutikliuose, saugumo sistemose, kosmoso tyrimuose[1].

Vienas iš populiariausių ir daugiausiai žadančių THz generatorių yra foto-laidžios antenos (FLA). Jų veikimas pagrįstas itin trumpo lazerio impulso pagalba sužadintų elektronų ir skylių judėjimu link antenos elektrodų. Krūvininkų atsiskyrimas erdvėje sukuria laike kintantį dipolinį momentą, kuris ir sukuria THz spinduliuotę. Nepaisant itin didelio susidomėjimo THz generavimo ir detektavimo sistemomis, pagrindinis veiksnys vis dar ribojantis THz technologijų panaudojimą yra mažos galios ir mažo efektyvumo THz šaltiniai [1]. Paskatinti proveržį šioje srityje galėtų tikslių FLA matematinių modelių sukūrimas.

FLA modeliai remiasi Bolcmano kinetinės lygties (BKL) artiniais, kurie susiejami su Puasono ar Maksvelo lygtimis. Apžvelgus FLA teorinių modelių tyrimų būklę galima padaryti išvadą, kad iki šiol sukurti jų modeliai dažniausiai remiasi dreifo-difuzijos (DD) lygtimis. DD lygtis yra paprasčiausia BKL aproksimacija, kuri ilgą laiką buvo krūvininkų pernašos puslaidininkuose modeliavimo pagrindas. Tačiau DD modelis prastai aprašo procesus vykstančius stipriame ar greitai kintančiame elektriniame lauke, todėl mažėjant prietaisams tenka naudoti tikslesnius ir sudėtingesnius fizikinius modelius, tokius kaip lokalaus energijos balanso artinys, ar hidrodinaminiai modeliai, kurie gaunami užrašant lygtis pirmiesiems BKL momentams [2]. Nors aukštesnės eilės BKL artiniai aprašo platesnį FLA vykstančių procesų spektrą, tačiau siekiant sudaryti didelio tikslumo modelius susiduriama su įvairiomis kliūtimis, tokiomis kaip nepakankamai tiksliai žinomos fizikinių parametrų vertės, ar sąryšiai tarp jų. Fizikinių FLA modelių sudarymo aspektai bus aptarti šio pranešimo metu.

LITERATŪRA

- [1] Xi-Cheng Zhang, Jingzhou Xu. *Introduction to THz Wave Photonics*. Springer US, 2010.
- [2] T. Grasser, T.-W. Tang, H. Kosina, and S. Selberherr. A review of hydrodynamic and energy-transport models for semiconductor device simulation. *Proceedings of the IEEE*, **91** (2):251–274, 2003.

NO + CO reakcijos modeliavimas

VYTENIS ŠUMSKAS

Vilniaus universitetas

Naugarduko 24, LT-03225, Vilnius, Lietuva

El-paštas: vytenis.sumskas@mif.stud.vu.lt

Darbe pateikiamas modelis, kuriame nagrinėjama anglies monoksido (CO) oksidavimo su azoto monoksidu (NO) reakcija virš sudėtinio katalizatoriaus. Koncentracijoms $u = (u_1, u_2, u_3, u_4, u_5)$ gaunamas reakcijos-difuzijos uždavinys su lygtimis, kiekvienam $i = 1, \dots, 5$ turinčiomis pavidalą

$$\partial_t u_i = L_i(u) + f_i(u),$$

čia f_i žymi netiesinius reakcijos narius, gaunamus iš cheminės kinetikos dėsnų, o L_i žymi difuzinius narius, gaunamus remiantis paviršinės difuzijos mechanizmais (pvz. [2]) ir turinčius pavidalą

$$L_i(u) = \frac{\partial}{\partial x} J_i(u),$$

$$J_i(u) = \kappa_i \left(\left(s - \sum_m u_m \right) \frac{\partial u_i}{\partial x} - u_i \frac{\partial \left(s - \sum_m u_m \right)}{\partial x} \right),$$

čia κ_i - paviršinės difuzijos konstanta, s - paviršinis tankis.

Katalizatoriaus paviršių padalinus į aktyvią (ten koncentracijas žymėsime u_{i2}) ir neaktyvią (u_{i1}) sritis bei ribą tarp jų pažymėjus x_* , uždavinys papildomas masės tvermės dėsniumi bei su juo susietomis specialiomis neklasikinėmis suderinamumo sąlygomis:

$$J_{i1}(u)|_{x_*=+0} = J_{i2}(u)|_{x_*=-0} = \lambda_{2,i1} u_{i1}|_{x_*=+0} \left(s_2 - \sum_m u_{m2} \right) \Big|_{x_*=-0} - \lambda_{1,i2} u_{i2}|_{x_*=-0} \left(s_1 - \sum_m u_{m1} \right) \Big|_{x_*=+0},$$

čia $\lambda_{1,i2}, \lambda_{2,i1}$ - konstantos, nusakančios molekulių peršokimo per x_* greitį, o papildomais indeksais (1 bei 2) žymimi dydžiai ant atitinkamai neaktyvaus bei aktyvaus katalizatoriaus paviršiaus.

Pranešime pateikiamos sprendinio savybės, grindžiamos skaitiniais tyrimais. Tolimesni skaičiavimai atliekami naudojant skaitinius metodus.

LITERATŪRA

- [1] V.P. Zhdanov, B. Kasemo. Mechanisms and kinetics of the NO-CO reaction on Rh. *Surf. Sci. Rep.*, 29:31-90, 1997.
- [2] A.N. Gorban, H.P. Sargsyan, H.A. Wahab. Quasichemical Models of Multicomponent Nonlinear Diffusion. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 6:184-262, 2011.
- [3] V. Skakauskas, P. Katauskis. Numerical study of CO oxidation by N2O reaction over supported catalysts. *Journal of mathematical chemistry*, 54:1306-1320, 2016.

Rodyklė

Bugajev A., 1, 3

Čiegis R., 3, 5

Dapšys I., 2

Karaliūnas M., 2

Kriauzienė R., 3

Šimkus E., 4

Šlekas G., 5

Šumskas V., 6