Oponentský posudek na disertační práci Ing. Jakuba Klinkovského

Data Structures and Parallel Algorithms for Numerical Solvers in Computational Fluid Dynamics

Předložená disertační práce je věnována vývoji efektivních postupů pro numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic na moderních paralelních počítačích a aplikaci těchto metod na simulaci některých úloh mechaniky tekutin. Jedná se o aktuální problematiku důležitou pro řadu aplikací.

V úvodní kapitole je čtenář stručně uveden do rozsáhlé problematiky náročných vědeckotechnických výpočtů na moderních paralelních počítačích a seznámen s hlavními softwarovými knihovnami, které jsou v současnosti k dispozici. Jsou zde rovněž formulovány cíle a výsledky disertace a představeny směry dalšího výzkumu.

První kapitola seznamuje čtenáře s postupy programování na moderních paralelních architekturách. Jedná se o přehledovou kapitolu názorně srovnávající různé přístupy na příkladu operace *axpy*. Je zde pojednáno též o numerické knihovně TNL (Template Numerical Library), jejímž hlavním vývojářem je autor disertace. Kromě pojednání o hlavních komponentách, myšlenkách a funkcích, je zde i cvičení pro čtenáře a popis plánované práce na knihovně v budoucnu.

Druhá kapitola popisuje vlastní výsledky autora týkající se vývoje datových struktur pro reprezentaci dat pomocí vícerozměrných polí a nestrukturovaných polygonálních a polyhedrálních sítí. Obě datové struktury jsou implementovány v knihovně TNL a mají přímou podporu pro výpočty na grafických akcelerátorech a pro distrubuované výpočty s MPI. Zatímco případ vícerozměrných polí je pojednán relativně stručně, datové struktury pro reprezentaci zmíněných nestrukturovaných sítí jsou představeny velice podrobně a ilustrovány řadou výpočtů pro benchmarky. Tyto výpočty ukazují, že autorem navržený a implementovaný přístup vede k výrazně vyšší efektivitě než při použití knihovny MOAB.

Krátká třetí kapitola je přehledová a poskytuje informaci o iteračních metodách pro řešení soustav lineárních algebraických rovnic a softwarových balících, v nichž jsou tyto metody implementovány.

Čtvrtá kapitola obsahuje původní výsledky autora a je věnována formulaci diskretizace hybridní smíšenou metodou konečných prvků pro (obecně nelineární) systém parciálních diferenciálních rovnic obsahujících časové derivace prvního řádu a prostorové derivace do druhého řádu včetně. Systém je doplněn různými typy okrajových podmínek na jednotlivých částech hranice výpočetní oblasti. K diskretizaci jsou použity Raviartovy–Thomasovy–Nédélecovy konečné prvky nejnižšího řádu a diskretizace typu upwind pro první prostorové derivace. Navržená diskretizace je aplikována na soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic popisujících dvoufázové proudění v porézním prostředí. Numerické výsledky ilustrují konvergenci diskrétních řešení a efektivitu výpočtů na paralelních počítačích.

Následující tři kapitoly rovněž obsahují původní výsledky a využívají k výpočtům mřížkovou Boltzmannovu metodu. Implementace této metody je popsána v páté kapitole a autor se zde věnuje i související optimalizaci výkonu paralelních počítačů. Navržená metoda je opět ilustrována výsledky získanými pomocí vhodných benchmarků.

Krátká šestá kapitola je věnována numerickému řešení nestlačitelných Navierových–Stokesových rovnic spřažených s rovnicí konvekce–difúze. Je zde zformulován algoritmus kombinující metody z předchozích dvou kapitol: Navierovy–Stokesovy rovnice jsou řešeny pomocí mřížkové Boltzmannovy metody, zatímco rovnice konvekce–difúze je řešena pomocí hybridní smíšené metody konečných prvků popsané ve čtvrté kapitole. Numerické výsledky srovnávají přibližná řešení v závisloti na typu upwindu (explicitní nebo implicitní) a způsobu interpolace rychlostního pole (lineární nebo kubická) a jsou prezentovány též chyby přibližných řešení.

V závěrečné sedmé kapitole je algoritmus z předchozí kapitoly aplikován na simulaci transportu páry v turbulentní mezní vrstvě vzduchu nad nerovným povrchem. Získané numerické výsledky jsou srovnány s experimentálními daty, přičemž v některých případech (v závislosti na náročnosti výpočtu) je pozorována dobrá shoda.

Práce obsahuje podrobný závěr, několik dodatků obsahujících různé detaily, které by zatěžovaly text, i bohatou bibliografii.

Předložená disertační práce má obdivuhodně široký záběr zahrnující využití různých typů diskretizací i komplikované otázky efektivní implementace na moderních paralelních počítačích. Práce popisuje řadu nových přístupů v oblasti implementace i diskretizace a numerické experimenty demonstrují, že navržené metody jsou výpočetně efektivní a vhodné pro simulaci komplikovaných úloh. Disertační práce je tak přínosná pro další rozvoj vědeckotechnických výpočtů na moderních paralelních počítačích i diskretizačních technik pro uvažované třídy problémů. To dokládá i to, že řada výsledků autora je obsažena v celkem osmi článcích uveřejněných v kvalitních mezinárodních časopisech.

Disertační práce ukazuje, že autor má ve všech oblastech, jimž je práce věnována, velmi hluboké znalosti a je schopen samostatné tvořivé práce. Je rovněž patrné, že autor musel věnovat velké úsilí implementaci navržených algoritmů a jejich testování. Vyzdvihnout je potřeba i autorův přínos pro vývoj knihovny TNL. Oceňuji rovněž, že autor má dobrou představu o možných směrech budoucího výzkumu.

Práce je dobře strukturovaná, přehledná a srozumitelná a formální úprava práce je na velmi vysoké úrovni. Je napsána velmi pěknou angličtinou a velice dobře se čte. Práce je velmi pečlivě zpracována a i přes její velký rozsah se mi v ní podařilo nalézt jen několik tiskových chyb.

K práci mám následující otázky a připomínky:

- Metody navržené autorem neuvažují případ sítí obsahujících tzv. hanging nodes. Jak obtížné by bylo rozšířit uvažované postupy i na tento případ? Jaké by to mělo důsledky pro paralelizaci výpočtů?

- Definice 2 na str. 32 není dle mého názoru vhodná, neboť podle ní je každá síť nestrukturovaná (vrcholy na hranici pro strukturované sítě náleží méně elementům sítě než vrcholy uvnitř).

- V kapitole 3 věnované numerickému řešení soustav lineárních algebraických rovnic se autor soustředí na iterační metody, zatímco přímé metody jsou zmíněny pouze velmi okrajově. U úloh, které nejsou příliš velké, mezi něž spadají dvourozměrné úlohy uvažované v práci, jsou přímé metody čato efektivnější, neboť konvergence iteračních metod může být pomalá v důsledku vlastností matice soustavy. U autorem vyvíjené knihovny TNL je zmíněna pouze možnost použití přímého řešiče UMFPACK, který ovšem nebyl navržen jako paralelní řešič. Přitom existuje řada paralelních přímých řešičů (např. PARDISO nebo MUMPS). Bylo by možné tyto řešiče efektivně použít v rámci knihovny TNL? Jaké jsou autorovy zkušenosti a plány s využitím paralelních přímých řešičů?

- Jaká je hlavní motivace použití smíšené metody konečných prvků ve čtvrté kapitole? Proč jsou použity pouze prostory nejnižšího řádu, u nichž nelze očekávat příliš velkou přesnost řešení? Proč jsou data aproximována vztahy (4.8) a (4.13) a nejsou místo toho příslušné integrály vyhodnoceny pomocí numerické integrace s využitím přesných dat? Podle tabulek na straně 75 časový krok klesá rychleji než prostorový krok. Na čem je založena volba časového kroku v těchto výpočtech? Diskretizací úlohy v části 4.3 se získá aproximace tlaků p_w a p_n, z nichž se vypočítá aproximace $S_{n,h}$ saturace S_n pomocí komplikovaného nelineárního vztahu. Jaký řád konvergence lze teoreticky pro $S_{n,h}$ očekávat?

- V šesté kapitole jsou prezentovány v tabulce 6.2 chyby aproximace ϕ_h funkce ϕ. Pro nekonzervativní tvar rovnice konvekce–difúze je získáno přesné řešení, zatímco pro konzervativní tvar je přibližné řešení zatíženo nezanedbatelnou chybou. Autor z toho vyvozuje, že nekonzervativní tvar je vhodnější než konzervativní. Pozorované rozdíly mezi konzervativním a nekonzervativním tvarem jsou však významně ovlivněny skutečností, že přesné řešení ϕ je konstanta a pro nekonzervativní tvar tak dostaneme $\phi_h = \phi$ pro víceméně libovolně špatnou aproximaci rychlostního pole. Autor by tedy měl oba tvary srovnat pro případ, kdy řešení ϕ rovnice konvekce-difúze neleží v použitém prostoru konečných prvků.

Práce je celkově velice kvalitní, bohatě splnila svůj cíl a prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci. Proto předloženou disertační práci doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 1. 6. 2023

doc. Mgr. Petr Knobloch, Dr., DSc.
Univerzita Karlova
Matematicko–fyzikální fakulta