



Posudek školitele na diplomovou práci studenta **Tomáše Jakubce**  
**"Numerická simulace vícefázového proudění na nestrukturovaných sítích s libovolnou topologií ve 3D"**

**Úvod.** V rámci svého předešlého výzkumného úkolu se student zapojil do aktivit, které naše výzkumná skupina vyvíjí v rámci projektu OP VVV zaměřeného na nízkouhlíkové technologie produkce energie, v našem případě na matematické modelování a počítačové simulace procesů ve fluidním kotli při spalování biomasy v režimu oxyfuel. Pronikl do problematiky energetických zařízení, matematického modelování jejich provozu a vhodných numerických algoritmů, aby se v budoucnu mohl potenciálně zapojit do práce na projektu. Jemu samotnému však nejvíce vyhovovalo pracovat na vývoji softwaru, a tak jsme téma diplomové práce orientovali více na vývoj obecné knihovny pro práci s nestrukturovanými sítěmi, kterou by na rozdíl od dostupných numerických softwarových balíčků mělo být možné využít pro efektivní simulace různých úloh na moderních paralelních architekturách (zejména GPGPU, ale i MPI a OpenMP). Numerické řešení úlohy dvoufázového proudění ustoupilo poněkud do pozadí a v práci je prezentováno spíše jako (velmi úspěšná) demonstrace použití vyvinuté knihovny.

**Shrnutí odvedené práce.** Tomáš se zhostil svého úkolu z programátorského hlediska takřka mistrovským způsobem. Nejprve teoreticky analyzoval návrh datové reprezentace obecných nestrukturovaných sítí, k čemuž využil teorii grafů a zavedl i některé inovativní pojmy a označení (množiny sousedů atp.). Zásadní výsledek práce, tj. flexibilní, efektivní a uživatelsky přívětivou softwarovou knihovnu pro práci s obecnými nestrukturovanými sítěmi, nazvanou *GTMesh*, popisuje téměř osmdesátistránková druhá kapitola. Návrh knihovny je hluboce promyšlený a poté implementovaný s využitím velmi pokročilých technik šablonového metaprogramování v C++. Zhusta se využívá variadických šablon, rekurzivního dědění pomocí šablonových specializací a podmíněného generování kódu pomocí paradigmatu SFINAE (Substitution Failure Is Not An Error). Díky tomu bylo možné vytvořit šablonové datové struktury, které reprezentují geometrii a topologii nestrukturované sítě nejen ve 2D nebo 3D, ale dokonce ve zcela obecné dimenzi. Přitom bylo myšleno na paměťovou a algoritmickou efektivitu datové reprezentace. Kromě samotných datových struktur obsahuje knihovna i generické algoritmy pro zpracování elementů (neboli entit) sítě zadané dimenze v automaticky generovaných vnořených cyklech, čehož následně využívá při výpočtu některých vlastností sítě (objemů buněk, normálových vektorů ke stěnám atd.). Paralelizaci podporuje obecným konceptem obarvení elementů sítě.

Třetí kapitola představuje unikátní šablonový koncept anotace dat v C++ strukturách nazvaný *class traits*, který je inspirován již existujícím konceptem *type traits*. Zhruba řečeno může uživatel na síť namapovat libovolnou datovou strukturu a pomocí *class traits* pro ni nechat automaticky generovat kód efektivně realizující numerické algoritmy i vstupně-výstupní operace. Konkrétně je tímto způsobem v knihovně implementován Rungeův-Kuttův-Mersonův řešič pro systémy ODR paralelizovaný pomocí OpenMP, import/export sítě i dat ve formátech VTK

a FPMA (AVL Fire), a rovněž velmi šikovný flexibilní systém pro ladící výpisy, což je popsáno ve čtvrté kapitole.

Pátá kapitola prezentuje numerické schéma metody konečných objemů pro úlohu dvoufázového proudění v dimenzi  $d \in \{2, 3\}$ , včetně upwind schématu pro advektivní toky a Gaussova schématu pro výpočet gradientů. Navíc řeší i aplikaci na sítích s velmi komplexními buňkami s neplanárními stěnami, které jsme měli k dispozici k testování díky spolupráci s kolegou J. Hahnem.

Šestá kapitola představuje rozpracovaný koncept využití knihovny GTMesh společně s knihovnou TNL, která je vyvíjena na KM FJFI ČVUT (<https://tnl-project.org/>). Účelem má být adaptace numerických algoritmů i datových struktur pro GPU (NVIDIA CUDA). Plně funkční CUDA kód se dosud nepodařilo vyvinout, ale některé algoritmy jsou již hotové.

Konečně sedmá kapitola prezentuje využití knihovny GTMesh pro řešení úlohy vícefázového proudění numerickým schématem popsaným v páté kapitole. Jsou demonstrovány různé topologie sítě ve 2D i 3D. Tato kapitola je oproti zbytku práce relativně stručná a neobsahuje obvyklé podrobnější analýzy konvergence apod., avšak to ani nebylo cílem práce.

**Hodnocení.** Spolupráce s Tomášem byla velmi intenzivní, příjemná a přínosná. Naprostou většinu práce na návrhu i implementaci knihovny GTMesh odvedl zcela bez mojí pomoci. Pouze mi pravidelně prezentoval dosažené pokroky a sledoval, jakou z nich mám radost. Při implementaci numerického schématu a simulacích již byla moje pomoc výraznější, stejně jako při formulaci anglického textu práce. Bylo sice třeba významných jazykových a občas i věcných korektur, avšak vzhledem k výsledku ani v nejmenším nelituji času, který jsem jimi strávil.

Výsledná knihovna je plně funkční, včetně numerických algoritmů je zveřejněna online v systému GitLab a dle zadání obsahuje i automatické unit testy. Text práce ji detailně a hlavně dobře popisuje. Na první pohled velmi četné výpisy kódu jsou všechny přínosné a mají své opodstatnění. Čtení to přesto není snadné; i pro zkušeného programátora, za kterého se považuji, představuje něco jako „vysokou školu C++“.

Tomáš odvedl neuvěřitelný kus práce a předčil všechny studenty, které jsem dosud vedl. I po skončení studia plánujeme s Tomášem spolupracovat v rámci projektu OP VVV, dosažené výsledky dále rozvíjet a využít je v publikacích v impaktovaných časopisech. Z pozice školitele proto nemám absolutně pochyb o hodnocení. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit ji známkou

**A (výborně).**

Praha 26. června 2020

Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

---

**Ing. Pavel Strachota, Ph.D.**

katedra matematiky  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská  
České vysoké učení technické v Praze  
Trojanova 13  
120 00 Praha 2

Tel: (+420) 224 358 563

E-mail: [pavel.strachota@fjfi.cvut.cz](mailto:pavel.strachota@fjfi.cvut.cz)