

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.024.03
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от « 3 » декабря 2015 г., № 15

О присуждении **Горобцу Андрею Владимировичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Параллельные технологии математического моделирования турбулентных течений на современных суперкомпьютерах», в виде рукописи, по специальности 05.13.18 — математическое моделирование, численные методы и комплексы программ принята к защите 28 мая 2015 года, протокол № 10, диссертационным советом Д002.024.03 на базе ФГБУН Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4, приказ №105/нк от 11 апреля 2012 года.

Соискатель **Горобец Андрей Владимирович**, 1981 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Параллельные алгоритмы повышенной точности для численного моделирования задач газовой динамики и аэроакустики» защитил в 2007 году в диссертационном совете № К 002.058.01 при Институте математического моделирования РАН, работает старшим научным сотрудником в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, отдел №16, сектор вычислительной аэроакустики .

Диссертация выполнена в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Научный консультант - доктор физико-математических наук Козубская Татьяна Константиновна, зав. сектором Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,

Официальные оппоненты:

- 1) **Воеводин Владимир Валентинович**, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, профессор, заместитель директора, Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова;
- 2) **Волков Андрей Викторович**, доктор физико-математических наук, доцент, начальник отделения Центрального аэрогидродинамического института им. профессора Н. Е. Жуковского;
- 3) **Дерюгин Юрий Николаевич**, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, начальник отдела теоретической и экспериментальной физики, Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» в своем положительном заключении указала, что диссертация Горобца А. В. «посвящена суперкомпьютерному моделированию задач механики сплошной среды с помощью численных методов повышенной точности на современных суперЭВМ. В работе рассматриваются различные аспекты выполнения вычислительного эксперимента, от создания параллельного алгоритма, адаптированного к многоуровневому параллелизму современных суперкомпьютеров, разработки эффективной программной реализации, до непосредственно выполнения расчётов на крупных вычислительных системах общего пользования. Совокупность предложенных методов и подходов к распараллеливанию для различных моделей параллельных вычислений, а также способов и особенностей программной реализации представляют собой целостную

комплексную технологию, формирующую готовый рецепт создания эффективных алгоритмов и суперкомпьютерного программного обеспечения. Значимость предложенного в работе подхода к разработке параллельных алгоритмов и программ для моделирования турбулентных течений обусловлена тем, что позволяет на основе новых принципов создавать эффективные средства для суперкомпьютерного моделирования, и охватывает при этом все этапы численного эксперимента. ... Параллельные алгоритмы и расчетные коды, представленные в работе, могут использоваться для крупномасштабных численных экспериментов на суперкомпьютерах для широкого спектра задач вычислительной газовой динамики. Значимость, как с научной, так и с практической точки зрения, следует из возможности решения и задач фундаментального характера, и промышленно-ориентированных приложений... К диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. Недостаточно внимания уделено проблеме векторизации вычислений и использованию SIMD расширений процессорных ядер, что является актуальным для современных процессоров Intel Xeon Haswell и ускорителей Intel Xeon Phi.
2. Производительность на Intel Xeon Phi показана только для случая одиночного ускорителя. Было бы интересно увидеть параллельную эффективность при использовании комплекса программ для расчета на многих ускорителях Phi.
3. В работе автор отказывается от использования CUDA, при этом тесты для сравнения скорости исполнения программы на CUDA и OpenCL не упоминаются. Возможно, применение CUDA позволило бы в более полной мере использовать возможности устройства NVIDIA.
4. Также было бы интересно увидеть результаты тестирования кода на современных процессорах Intel Xeon с 15+ ядер (от 30 физических ядер на узел).
5. Автореферат написан слишком узкоспециализированным языком, что затрудняет его понимание».

Соискатель имеет 28 публикаций по теме диссертации, опубликованных в ведущих отечественных и зарубежных рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК для опубликования научных результатов докторских диссертаций, включая 21 статью в журналах, входящих в реферативную базу Scopus. Среди них:

1. Горобец А.В. Параллельная технология численного моделирования задач газовой динамики алгоритмами повышенной точности // Журнал выч. математики и матем. физики. 2015. т. 4.
2. Горобец А.В., Суков С.А., Богданов П.Б. На пути к освоению гетерогенных супервычислений в газовой динамике // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. т.4. с. 15–26.
3. A. Gorobets, F.X. Trias, A. Oliva. A parallel MPI+OpenMP+OpenCL algorithm for hybrid supercomputations of incompressible flows // Computers and Fluids 2013. Vol. 88. Pages 764–772.
4. Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.В., Дубень А.П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOISETTE для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики // Вычислительные методы и программирование. 2012. т.13. стр. 110–125.
5. A. Gorobets, F. X. Trias, R. Borrell, O. Lehmkuhl, A. Oliva. Hybrid MPI+OpenMP parallelization of an FFT-based 3D Poisson solver with one periodic direction // Computers and Fluids. 2011. vol. 49. pp. 101–109.

Во всех работах с соавторами присутствует существенный авторский вклад Горобца А.В., соответствующий тематике диссертационной работы и относящийся по большей части к области параллельных вычислительных технологий.

На автореферат диссертации поступило 3 отзыва. Все отзывы положительные.

В отзыве зам. директора ИБРАЭ РАН д. ф.-м. н. В. Ф. Стрижова сказано, что «Диссертация Горобца А. В. посвящена актуальной проблеме создания эффективных параллельных алгоритмов и программных комплексов, применимых на широком спектре современных

высокопроизводительных вычислительных систем при моделировании трехмерных нестационарных задач механики сплошной среды. ... Обоснованность сформулированных в диссертационной работе научных положений, а также достоверность полученных в ней научных результатов не вызывают сомнения, поскольку они представлены в десятках статей в международных рецензируемых журналах и в многочисленных докладах на ведущих международных конференциях.

Автором решена важная научно-техническая задача: разработаны и реализованы в виде завершенных программ методы проведения высокопроизводительных расчетов на параллельных вычислительных системах различной архитектуры, в том числе гибридной с использованием графических ускорителей...»

В отзыве зав. отделом ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, к. ф.-м. н., доцента А.Г. Кушниренко сказано, что «...Достоверность результатов и обоснованность научных положений, изложенных в автореферате, не вызывают сомнения... Эффективность технологии разработки и применения вычислительного ПО для моделирования турбулентных течений, а также разработанных параллельных алгоритмов и программных комплексов продемонстрирована в серии крупных суперкомпьютерных расчетов. Практическая значимость диссертации состоит в широких возможностях применения на практике предложенных методов и подходов к разработке параллельных алгоритмов и гетерогенного суперкомпьютерного ПО для численного решения задач механики жидкости и газа...»

В отзыве профессора СПбГУ ГА, д. ф.-м. н. С.А. Исаева сказано, что «...Диссертация посвящена разработке и применению параллельных технологий для гибридных платформ с ориентацией на решение задач моделирования турбулентности. Комплексная работа акцентирована на пакет NOISEtte с использованием методов повышенного порядка точности и неструктурированных сеток... Работа выполнена на высоком профессиональном уровне и ее квалификационная состоятельность не вызывает сомнений. Апробация работы вполне достаточная.»

В отзывах на автореферат диссертации содержатся следующие замечания:

1. Автор предлагает различные методы параллельных вычислений, однако, судя по автореферату, применяются ортогональные декартовы координаты и соответствующие сетки. Автор в большинстве случаев не приводит характеристик используемых сеток - равномерные, неравномерные, что особенно важно для моделирования турбулентности.

2. Результаты, представленные в главах 3 - 5, как правило, оперируют относительно небольшими сетками (16 млн. узлов) при достаточно большом числе процессоров (вплоть до 24000), что означает, что на одно расчетное ядро приходится относительно небольшое число узлов (до 1000). Было бы целесообразно привести эффективность предлагаемых алгоритмов в зависимости от количества узлов на одно расчетное ядро (или процессор при использовании гибридной технологии MPI и OpenMP).

3. Не всегда понятны утверждения автора относительно эффективности распараллеливания. Так, на странице 18-20 обсуждаются результаты применения технологий распараллеливания MPI и OpenMP. При этом на стр. 18 говорится об эффективности 10 - 15% от пиковой производительности CPU ядра, в то же время на 8 ядерном процессоре и сетке 1 млн. узлов эффективность составляет 85 и 65% для явной и неявной схем. На рисунках 6 и 7 эффективность для различных вычислительных систем составляет 60 - 80%. Не ясно также, для каких задач получено то или иное ускорение. В подписи к рисунку говорится о модели турбулентности, однако не говорится ничего о решаемой задаче, методе её решения, модели турбулентности. Целесообразно указывать для какой задачи и какой модели получены приведенные результаты, поскольку на стр. 16 анонсируется создание кода NOISEtte, включающего различные модели турбулентности - RANS, LES, DES, DDES, IDDES.

4. По пятой главе, в которой приводится описание программы STG-CFD&HT для DNS расчетов с использованием гибридной технологии распараллеливания, на рис. 14 приведена результирующая

производительность алгоритма для различных графических ускорителей, однако не говорится, для какой задачи и на каких сетках получены данные результаты.

5. На стр. 28 говорится: «Полученные результаты расчета [13] лучше подходят для валидации моделей турбулентного течения, чем экспериментальные данные, поскольку явление естественной конвекции изолировано, а вклад излучения, который существенно влияет на течение в физическом эксперименте, отсутствует в DNS расчете». Это утверждение требует уточнений, поскольку неясно, что автор имеет в виду, говоря об изолированности явления конвекции, и о вкладе излучения, вклад которого, безусловно, сказывается при достаточно высоких температурах, и определяет граничное условие на поверхности, которое может и должно быть учтено в расчете при его наличии в эксперименте.

6. Задача естественной конвекции между разнотемпературными вертикальными стенками, приведенная в параграфе 6.2, - классическая задача конвективного массопереноса и теплообмена, исследованная при различных числах Рэлея. Целесообразно для подтверждения правильности расчетов привести сравнение с данными экспериментов. То же можно сказать о результатах исследования по расчету естественной конвекции между разнотемпературными вертикальными и горизонтальными стенками с помощью кода STG-CFD&HT, приведенными в параграфе 6.7. Целесообразно провести сравнение с экспериментом как по локальным, так и по интегральным характеристикам тепломассопереноса.

7. В списке публикаций автора из 28 работ одна выполнена лично автором, остальные 27 выполнены в соавторстве. В частности, в 18 работах соавтором является Assensi Oliva, в 16 работах соавтором является Xavier Trivas, но в автореферате не сделана попытка разграничить результаты автора и данных "постоянных" соавторов.

8. Глобальная научная проблема требует уточнения и конкретизации, в особенности в части ее соединения с турбулентностью.

9. Много громких деклараций, особенно в части «рекордных» результатов.

Хотелось видеть их подтверждение на основе сопоставительного анализа с другими работами. Практически нет сравнений (одного рисунка 15 маловато).

10. Отсутствуют тесты по эффективности вычислений.

11. Привязка к турбулентности не отражена. Упоминаний о вихреразрешающих методах недостаточно.

12. Где описаны граничные условия? Какие выбраны сетки и есть ли сеточная сходимость?

13. Выводы отсутствуют и заменены перечислением сделанного. Количественных выводов нет.

Имеется также несколько замечаний, касающихся опечаток и небольших текстовых ошибок:

- на стр. 4 7 строка сверху - неверное окончание у слова eddies;
- на странице 8 (3 строка сверху) пропущен предлог;
- на странице 8 (абзац «Теоретическая ценность») пропущен предлог;
- на стр. 26 подпись к рисунку 12 - неверный падеж;
- на стр. 27 4 строка снизу - незаконченное предложение.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации объясняется их широко известной компетенцией в вопросах математического моделирования, вычислительной газовой динамики и параллельных вычислений, высоким квалификационным уровнем и знакомством с тематикой защищаемой работы.

Диссертационный совет отмечает, что в результате выполненных соискателем исследований:

- разработан новый комплексный подход к математическому моделированию турбулентных течений на суперкомпьютерах с экстра-массивным параллелизмом;
- предложен эффективный параллельный алгоритм повышенной точности с многоуровневым распараллеливанием для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики на неструктурированных сетках;
- разработан параллельный метод решения уравнения Пуассона для моделирования несжимаемых турбулентных течений, позволяющий

- проводить расчеты на десятках тысяч процессоров и на гибридных суперкомпьютерах с ускорителями различной архитектуры;
- созданы программные комплексы для крупномасштабных расчетов с использованием суперкомпьютеров с десятками тысяч процессоров, а также гибридных суперкомпьютеров;
 - выполнены крупные расчеты сжимаемых и несжимаемых турбулентных течений. Получен широкий набор данных для разработки и валидации моделей турбулентности.

Рассматриваемая диссертация является научно-квалификационной работой, в которой решена крупная научная проблема, заключающаяся в детальном исследовании турбулентных течений на основе развитых в работе алгоритмов и комплекса программ для параллельных вычислений на суперкомпьютерах.

Достоверность. Разработанные коды верифицированы на широком круге задач. Подтверждены корректность реализации и порядки сходимости дискретных операторов. Эффективность и производительность параллельных вычислений подтверждается серией тестов, выполненных на многопроцессорных системах различных архитектур.

Теоретическая значимость работы заключается в исследовании различных моделей параллельных вычислений применительно к различным типам алгоритмов повышенной точности для решения задач механики сплошной среды. Исследованы различные подходы к программной реализации и повышению эффективности вычислений, численно исследованы различные задачи фундаментального характера в области моделирования сложных турбулентных течений, изучение которых вносит существенный вклад в исследование турбулентности, генерации шума, теплопереноса и других физических явлений.

Практическую значимость представляют параллельные алгоритмы и комплексы программ для суперкомпьютерных расчетов задач газовой динамики. Реализованное ПО позволяет задействовать десятки тысяч процессоров и массивно-параллельные ускорители различных архитектур.

Полученные результаты прямого численного моделирования различных задач представляют практическую ценность для разработки моделей и подходов к моделированию турбулентности, как для сжимаемых, так и для несжимаемых течений. Результаты работы внедрены в программные комплексы NOISEtte и STG-CFD&HT, которые нашли широкое применение в прикладных и фундаментальных научных исследованиях.

Личный вклад соискателя состоит в разработке технологий, эффективных параллельных алгоритмов и распараллеливания программных комплексов для моделирования турбулентных течений на крупных суперкомпьютерах различной архитектуры, а также в личном выполнении серии крупных суперкомпьютерных расчетов.

Диссертация охватывает все основные вопросы поставленной научной задачи, является целостным и законченным научным исследованием.

На заседании 03 декабря 2015 года диссертационный совет принял решение присудить Горобцу Андрею Владимировичу ученую степень доктора физико-математических наук. При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 8 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 18, против - нет, недействительных бюллетеней - нет.

Председатель диссертационного совета

Д 002.024.03, академик РАН

Б.Н.Четверушкин

Ученый секретарь диссертационного

совета Д 002.024.03, к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

«04» декабря 2015 года.