Kraków, w dniu 24 sierpnia 2017 r.

dr hab. Piotr Kalita
Instytut Informatyki i Matematyki Komputerowej
Wydział Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego
ul. Łojasiewicza 6
30-348 Kraków

Recenzja

pracy doktorskiej mgra inż. Macieja Woźniaka
pt. "Solwery izogeometryczne dla różnych architektur maszyn równoległych
bazujące na teorii śladów"

1. Problematyka pracy

Autorem przedstawionej mi do recenzji pracy doktorskiej jest mgr inż. Maciej Wożniak, a jej promotorem jest dr hab. prof. AGH Maciej Paszyński.

Praca poświęcona jest zrównoleglaniu pewnego wariantu algorytmu Metody Elementów Skończonych (MES) dla równania parabolicznego

$$u_t - \operatorname{div}(K(x,u)\nabla u) = h(x),$$

danego na dziedzinie przestrzennej będącej trójwymiarową kostką. Równanie to opisuje nieliniowy przepływ w ośrodku niejednorodnym i ma zastosowanie przy modelowaniu procesów wydobycia ropy naftowej i gazu ziemnego. Ponieważ symulacje numeryczne dla takiego równania, gdy chcemy mieć jego rozwiązanie przybliżone dane z dużą dokładnością, są niezwykle kosztowne obliczeniowo, istotne jest zaprojektowanie takiej wersji MES, aby symulacje zajmowały jak najmniej czasu. Można to osiągnąć zrównoleglając w odpowiedni sposób algorytm obliczeniowy i właśnie wersję takiego zrównoleglenia autor proponuje w pracy. Stosuje metodę numeryczną opartą o jawny schemat Eulera, dzięki czemu w każdym kroku czasowym musi jednokrotnie rozwiązać układ równań liniowych, pomimo, że oryginalny rozwiązywany problem jest nieliniowy. Jako funkcje bazowe w MES wybiera tak zwane B-spline'y. Funkcje te są funkcjami wielu zmiennych danymi jako iloczyny tensorowe funkcji pojedynczych zmiennych. Taki wybór funkcji bazowych pozwala po pierwsze na bardzo wydajne nawet w przypadku sekwencyjnym rozwiązywanie układu równań liniowych, a po drugie, czego autor dowodzi w pracy, daje się wydajnie zrównoleglić ze względu na to że najbardziej kosztowny obliczeniowo krok, którym jak autor dowodzi jest całkowanie numeryczne, nie wymaga w ogóle komunikacji. Ponadto możliwe jest dalsze, bardziej niskopoziomowe, zrównoleglenie kroku całkowania iloczynów funkcji bazowych. Całkowanie okazuje się być najbardziej kosztownym krokiem całego obliczenia a jego dalsze zrównoleglanie jest możliwe poprzez wielokrotne wykorzystanie tej samej wartości funkcji w punktach Gaussa oraz struktury iloczynu tensorowego funkcji bazowych. Istotne przy zrównoleglaniu całkowania jest też to, że funkcje bazowe wyższych rzędów można wyrazić za pomocą funkcji bazowych niższych rzędów.

Autor stawia sobie za cel takie wielopoziomowe zrównoleglenie algorytmu obliczeniowego. Cel ten udaje mu się osiągnąć, podaje bardzo wydajną i oryginalną równoległą wersję algorytmu. Pokazuje jego przewagę w stosunku do standardowego algorytmu wielofrontalnego. Fakt wydajności zaproponowanego algorytmu potwierdza teoretycznymi wynikami dotyczącymi złożoności obliczeniowej i testami numerycznymi które ilustrują poprawność uzyskanych teoretycznych oszacowań.

2. Treść pracy

W rozdziale pierwszym, czyli we wstępie pracy, autor przedstawia swoje cele i opisuje krótko podstawowe metody jakich używa. W szczególności formułuje problem matematyczny, który będzie rozwiązywał. Istotne jest to, że ośrodek jest niejednorodny, niejednorodność ta dana jest za pomocą funkcji $K_q(x)$, która silnie zależy od x co powoduje, że siatka obliczeniowa musi być gęsta.

Rozdział drugi jest poświęcony analizie złożoności klasycznego równoległego algorytmu obliczeniowego, czyli algorytmu wielofrontalnego, na maszynie równoległej z rozproszoną pamięcią. Algorytm ten opiera się na hierarchicznej dekompozycji dziedziny na poddziedziny będące mniejszymi kostkami i wielokrotnym zastosowaniu metody uzupełnień Schura do usuwania niewiadomych związanych z wewnętrznymi elementami kostek. Autor wyprowadza równoległe złożoności odpowiednio $\mathcal{O}(Np^2t_{comp} + \log(N^{1/2})t_{init} + Np^2t_{comm})$ dla wersji dwuwymiarowej i $\mathcal{O}(N^{4/3}p^2t_{comp} + \log(N^{1/3})t_{init} + N^{4/3}p^2t_{comm})$ dla wersji trójwymiarowej, gdzie N to rozmiar problemu, a p to stopień wielomianu. Autor zauważa, że złożoność dla problemu trójwymiarowego jest wysoka (bo nadliniowa względem N) i pociąga to za sobą konieczność szukania innych, wydajniejszych algorytmów.

W rozdziale trzecim autor przedstawia równoległą wersję algorytmu przemiennych kierunków (alternating directions - AD) dla MES. Wylicza złożoność tego algorytmu dla przypadku trójwymiarowego. Jak się okazuje, algorytm jest liniowy względem N, a dokładnie autor uzyskuje złożoność

$$\mathcal{O}\left(\left(\frac{p^6N}{c} + \frac{p^2N}{c^{2/3}} + \frac{p^3N}{c}\right)t_{comp} + \frac{N}{c^{2/3}}t_{comm}\right),$$

gdzie c to ilość węzłów obliczeniowych w sześcianie procesorów. Istotna jest zależność od c gdyż zależność od p i N jest taka sama jak podana w Dodatku B dla wersji sekwencyjnej. Ponadto autor zauważa, że w oszacowaniach złożoności dominuje wyrażenie

$$\frac{p^6N}{c}$$

odpowiadające za złożoność całkowania. Co jest istotne, krok ten nie wymaga komunikacji między poszczególnymi procesorami. W związku z tym autor będzie szukał dalszych optymalizacji tego właśnie kroku.

Równoległej wersji algorytmu całkowania poświęcony jest rozdział czwarty pracy. Całkowanie kwadraturą Gaussa iloczynów funkcji bazowych rozbite jest tu na kroki obliczeniowe tak, że wynik poprzedniego kroku może być wykorzystany w kilku obliczeniach kolejnego kroku. Przedstawiona jet szczegółowa analiza oparta o teorię śladów dla spline'ów liniowych i kwadratowych oraz pseudokod dla implementacji w technologii OpenMP.

Rozdział piąty przestawia testy numeryczne weryfikujące uzyskane wcześniej teoretyczne wyniki. Autor przestawia czasy obliczeń dla implementacji metody wielofrontalnej dla dwu- i trójwymiarowej symulacji. Wyniki potwierdzają uzyskane w rozdziale drugim teoretyczne złożoności algorytmu wielofrontalnego. Następnie autor przestawia czasy obliczeń dla metody AD. Ponieważ algorytm jest rozbity na kilka kroków (integration, solve, gather, scatter), taka analiza jest zrobiona dla wszystkich tych kroków. Na uwagę zasługuje bardzo wysoka zgodność przewidzianych teoretyczne wyników z faktycznym czasem obliczeń widoczna na rysunkach 5.24 i 5.25. Autorowi udaje się też uzyskać numeryczne potwierdzenie teoretycznie uzyskanego wyniku, że w metodzie AD najbardziej kosztowne obliczeniowo jest numeryczne całkowanie. Kolejna seria testów przedstawia wyniki implementacji dla równoległej wersji całkowania numerycznego na architekturze GPU i z wykorzystaniem OpenMP. Testy pokazują, że czas całkowania jest logarytmiczny względem rozmiaru problemu dla sytuacji gdy ilość procesorów jest większa niż rozmiar problemu i liniowy w przeciwnym przypadku. W tej ostatniej sytuacji czas obliczeń dla równoległej wersji jest o więcej niż rząd wielkości mniejszy, co oznacza, że przy tej samej złożoności stała jest odpowiednio niższa. Autor przedstawia także wyniki uzyskane dla implementacji wykorzystującej OpenMP. Ostatnie testy pokazują wynik symulacji i potwierdzenie jej poprawności poprzez porównanie wyników dla różnych kroków czasowych.

3. Najważniejsze wyniki pracy

Kluczowym wynikiem jaki autorowi udało się uzyskać jest stworzenie bardzo efektywnej równoległej metody numerycznej dla rozwiązywania MES-em nieliniowych i niejednorodnych równań parabolicznych. Autor uczynił ten algorytm bardzo wydajnym poprzez jego zrównoleglenie na dwóch poziomach. Najpierw zrównoleglił algorytm AD i wykazał że jest on bardziej wydajny niż równoległa wersja standardowego algorytmu wielofrontalnego. Następnie wziął najbardziej złożony obliczeniowo krok tego algorytmu - czyli całkowanie numeryczne - i dalej poprawił jego wydajność poprzez wprowadzenie równoległej wersji na poziomie obliczania wartości funkcji podcałkowej w punktach Gaussa. Dla zaproponowanych algorytmów przestawił teoretyczne wyniki dotyczące ich złożoności i potwierdził ich poprawność za pomocą testów numerycznych które okazały się zgodne z teorią. Zaproponowane sposoby zrównoleglania algorytmów numerycznych uważam za pomysłowe, a potwierdzone testami numerycznymi wyniki dotyczące złożoności obliczeniowej algorytmów uważam za wartościowe.

Na uwagę zasługuje również dorobek naukowy doktoranta. W bazie Web of Science naliczyłem aż 9 artykułów i 9 cytowań nie będących autocytowaniami. Aż 5 z tych dziewięciu artykułów zostało opublikowanych w wysoko punktowanych czasopismach. W czterech z nich doktorant jest pierwszym autorem, co świadczy o tym, że jego wkład w powstanie pracy jest największy, a w jednej jest wręcz autorem jedynym. Uważam, że na etapie doktoratu jest to wynik znakomity. Ponieważ jest autorem aż pięciu prac w roku 2017 sugeruje to, że będzie się dalej rozwijał naukowo.

4. Uwagi

W tym punkcie podam kilka uwag jakie nasunęły mi się przy czytaniu pracy. Uwagi te są drobne, a wręcz techniczne i w moim poczuciu nie umniejszają wysokiej wartości naukowej, jaką w mojej ocenie ma ta praca.

- Str 14. Autor podał równanie jakie rozwiązuje, ale nie podał przyjętych przez niego warunków brzegowych. Jakie były warunki brzegowe w równaniu?
- Str 66. Warunek początkowy dla symulacji znajduje się na wykresie, ale autor mógłby podać wzór na ten warunek, jak również uzasadnić dlaczego przyjął akurat taki warunek początkowy.
- Str 14 wzór (1.10). Postać funkcji K jest przyjęta za pracą [4] ale ciekawi mnie dlaczego (z fizycznego punktu widzenia) należy przyjąć akurat eksponencjalną postać tej funkcji. Dodam, że z matematycznego punktu widzenia problem z eksponencjalnym warunkiem wzrostu jest ciekawy i niestandardowy bo znane mi matematyczne wyniki dotyczące quasiliniowego równania parabolicznego, jakie autor rozważa, zakładają prostszy, wielomianowy, warunek wzrostu na nieliniowość.
- Jedyną weryfikacją poprawności symulacji jest porównanie jej wyników dla różnych kroków czasowych. I słusznie, bo to krok czasowy decyduje po stabilności algorytmu dla schematu jawnego. Ale czy doktorant wykonał również porównanie wyników dla różnych siatek?
- Czy jest możliwość wyliczenia teoretycznego stałych występujących w wyrażeniu $\mathcal{O}$ dla równoległego całkowania a przynajmniej teoretycznego pokazania o ile ta stała jest lepsza dla wersji algorytmu wykorzystującej równoległe całkowanie i GPU dla przypadku gdy rozmiar problemu jest duży? Wyniki symulacji przedstawione na rysunkach 5.38 - 5.41 sugerują, że ta stała jest niższa, ale ciekawym by było pokazać o ile jest niższa, a w szczególności jak to zależy od p, i czy teoretyczny wynik zgadza się w tym punkcje z testem numerycznym.
- Ostatnia, bardzo drobna, uwaga dotyczy wyrażenia $\mathcal{O}(\log(N^{0.5}))$ na stronie 22. Oczywiście można je zapisać trochę bardziej elegancko jako $\mathcal{O}(\log(N))$.

5. Konkluzja

Oceniam rozprawę jako bardzo dobrą merytorycznie i zdecydowanie uważam, że spełnia ona wszystkie wymogi stawiane pracom doktorskim. **Wnoszę o dopuszczenie mgra inż. Macieja Woźniaka do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Wnoszę również o wyróżnienie rozprawy.**