Kraków, 20 maja 2019r.

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

Recenzja pracy doktorskiej mgra inż. Marcina Łosia.

Praca doktorska mgra inż. Marcina Łosia została napisana pod kierunkiem prof dra hab. Macieja Paszyńskiego. Liczy 116 stron a jej tytuł to "Efektywne algorytmy dla różnych architektur maszyn równoległych do przeprowadzania symulacji procesów niestacjonarnych". Rozprawa jest napisana w języku angielskim.

Głównym tematem pracy jest koncepcja, a w zasadzie dwie koncepcje, zrównoleglenia symulacji numerycznej opartej o adaptacyjną Metodę Elementów Skończonych dla zadań brzegowo-początkowych dla ewolucyjnych równań cząstkowych.

Przejdę do omówienia zawartości pracy.

Po pierwszym, wstępnym, rozdziale, autor przechodzi w rozdziale 2 do omówienia *hp*-adaptacyjnej Metody Elementów Skończonych. Omawia także stosowane przez siebie dalej przestrzenie elementów skończonych oparte na splinach oraz algorytmy rozwiązywania układów równań liniowych. W szczególności omawia metodę ADS, która pozwala przy odpowiedniej strukturze macierzy masy, wynikającej z użytej przestrzeni elementów skończonych, na wydajne rozwiązanie układu równań pochodzącego od schematu jawnego w czasie liniowym. W tym tekście, przedstawiającym znane wcześniej metody i wyniki, widać erudycję autora w dziedzinie metody elementów skończonych i schematów numerycznych dla równań ewolucyjnych.

Kolejne dwa rozdziały poświęcone są odpowiednio dwóm algorytmom zrównoleglenia obliczeń zaproponowanym i przetestowanym przez autora. Pierwszy z algorytmów, omówiony w rozdziale 3 został nazwany "space-time adaptivity" i opiera się na zrównolegleniu procesu adaptacji przestrzennej. Mianowicie w czasie gdy w i-tym kroku czasowym algorytm liczy rozwiązanie na siatce zagęszczonej (i z wyższym stopniem wielomianu aproksymującego) wcześniej wyliczone mniej wymiarowe rozwiązanie jest wykorzystane jako prawa strona w obliczeniu dla $i+1$-szego kroku czasowego. W następnym kroku obliczenia liczone jest jeszcze bardziej zagęszczone rozwiązanie w kroku i-tym, rozwiązanie zagęszczone z kroku i-tego z poprzedniego kroku obliczenia jest wykorzystane w $i+1$-szym kroku czasowym w czasie obliczania zagęszczonego rozwiązania, a rozwiązanie najrzadsze z $i+1$-szego kroku jest wykorzystane do zainicjowania $i+2$-giego kroku czasowego. W efekcie prowadzi to do potokowego sposobu obliczeń, gdzie wiele kroków czasowych jest obliczanych równolegle. Pomysł jest ciekawy i, jak się wydaje, nietrywialny implementacyjnie. W rozdziale znajduje się pochodzący od doktoranta dowód twierdzenia o zbieżności, którego treścią, zgodnie z intuicją, jest, że przy nieograniczonej możliwości osiągnięcia dokładności przestrzennej błąd jest ograniczony jedynie krokiem czasowym. Doceniam ten fragment pracy, zwłaszcza, że jest to doktorat z nauk technicznych.

Rozdział czwarty poświęcony jest algorytmowi zrównoleglania obliczania prawej strony równania dla zagadnienia pochodzącego z dyskretyzacji schematem jawnym. Jako że dla rozwiązania układu równań z macierzą masy można tu wykorzystać wydajny liniowy algorytm ADS, autor koncentruje się na zrównolegleniu obliczania prawej strony, gdzie liczy się wiele niezależnych od siebie całek. Na wydajność rozwiązania wpływa tu konieczność synchronizacji, dla której autor proponuje optymalizację pozwalająca mu zwiększyć ilość obliczeń jakie mogą być wykonane równolegle. Przeprowadzona jest też analiza złożoności algorytmu.

W rozdziale 5 przedstawione są liczne symulacje numeryczne ilustrujące zaproponowane wcześniej algorytmy. Autor przedstawia kilka symulacji rozwiązania numerycznego równania ciepła (w jednej z symulacji liczy rozchodzenia się ciepła w ludzkiej głowie wskutek rozmowy przez telefon komórkowy, jako dziedzinę problemu wykorzystuje siatkę skonstruowaną w oparciu o skan MRI głowy swojego promotora), rozwiązuje także równanie elastodynamiki, równanie paraboliczne symulujące wydobycie ropy naftowej oraz układ równań typu reakcji dyfuzji modelujących wzrost nowotworu. Wśród przykładów w tym rozdziale znalazłem też algorytm aproksymacji funkcji fitness oparty o projekcje L^2 i H^1 mający zastosowanie w algorytmach optymalizacji. Ten ostatni przykład jest ciekawy, i rozumiem że autor chciał się nim pochwalić, przy czym mam nieodparte wrażenie że tematycznie nieco odstaje od reszty pracy.

Praca łączy precyzję matematyczną, zaawansowane metody numeryczne, ich implementacje w oparciu o różne architektury równoległe, i ciekawe, nietrywialne zastosowania. Przedstawia oryginalne koncepcje zrównoleglenia zaproponowane przez autora. W związku z tym zdecydowanie rekomenduję przyznanie mrg inż. Łosiowi stopnia doktora.

Podaję kilka komentarzy i uwag szczegółowych.

- Str 19. Oczywiście złożoność solwera wielofrontalnego w 2D to $\mathcal{O}(N^2)$ a nie $\mathcal{O}(N^3)$. Z kolejnych wzorów wynika, że to literówka.
- Rozdział 3. Algorytm jest nazwany "space-time adaptivity", jednak tak naprawdę nie ma tu adaptacji względem czasu, tylko względem aproksymacji po zmiennej przestrzennej. Czy doktorant ma pomysł jak można by sprząc adaptację przestrzenną z adaptacją czasową i jakie mogłoby być wówczas oszacowanie błędu medody względem τ i względem zmiennej przestrzennej.
- Str 24. Doktorant pisze: "family of continuous linear projections $\pi_{A,B} : A \to B$ for all $A, B, \in \mathcal{V}$". Matematycznie operator projekcji musi być równy złożeniu ze sobą samym $\pi_{A,B} \circ \pi_{A,B} = \pi_{A,B}$. Aby ta definicja była poprawna wymagane jest, aby obraz $\pi_{A,B}(A)$ zawierał się w A. Moim zdaniem nie musi to być prawda. Operator ten nie jest więc projekcją. Myślę, że jest to operator typu "projection based interpolation" i możliwa jest jego aksjomatyzacja.
- Str 24. Rozdział 3.2. Typowo pochodna czasowa rozwiązania równania cząstkowego ma niższą regularność przestrzenną niż samo rozwiązanie. Przy regularności $f : I \times U \to U'$ nie spodziewamy się rozwiązania w przestrzeni $C^1(I; U)$. Pochodna czasowa nie będzie miała regularności $C(I; U)$. Regularność u' zależy tu od założeń na f i typowo jest to $L^p(I; U')$ lub ogólniej $L^p(I; V')$ gdzie V może być inną niż U przestrzenią Banacha, a $p \geq 1$. W odpowiedniej sytuacji może to być $C(I; U')$ jednak nie w klasie rozwiązań słabych, a takie autor rozważa, co wynika z dalszej części pracy.
- Str 31. Znów pojawia się gładkość $u \in C^1(I; U)$.
- Str 32. Założenia 3.2 i 3.3. Tu trochę brak mi odpowiedniego ustawienia kwantyfikatorów. Moim zdaniem powinno być tak:

$$\text{dla dowolnych } \epsilon > 0, v \in U \text{ istnieje przestrzeń } V \in \mathcal{V} \text{ i } u \in V \text{ takie, że } \|v - u\| \leq \epsilon.$$

Pragnę dodać, że formalnie, aby to założenie zachodziło rodzina $\mathcal{V}$ musi być nieskończona, bowiem błąd najlepszej aproksymacji jest typowo dany wzorem

$$\|v - \Pi v\| \leq C h^{\alpha} \|v\|_X,$$

gdzie X jest przestrzenią funkcji gładszych niż nasza przestrzeń rozwiązań, C, α zależą od gładkości v, a także od p. Zatem dla każdego ϵ, v możliwe jest dobranie h (jeśli tylko v jest odpowiednio gładkie) ale w tym celu rodzina $\mathcal{V}$ musi być nieskończona. Nawiasem mówiąc autor nie potrzebuje dowolnie małego ϵ, tylko ϵ jak dane w Twierdzeniu 3.1. A zatem dostaje warunek $Ch^{\alpha}\|v\|_X \leq C_{\tau,i,k}^{-1}\tau^{d+1}$. Jego krok czasowy musi być więc odpowiednio duży w odniesieniu do aproksymacji przestrzennej. Jest to warunek odwrotny niż warunek Couranta i gwarantuje, że błąd będzie zdominowany przez błąd aproksymacji czasowej. Ale i ten warunek nie jest tu niezbędny, autor może zostawić sobie ϵ bez szacowania przez τ i wówczas będzie miał błąd rzędu $h^{\alpha} + \tau^{d}$. Powyższa uwaga to jedynie pomysł jak ulepszyć rozumowanie, chcę zaznaczyć że ten dowód mi się bardzo podoba.

- Str 36. Tu znajduje się uzasadnienie znanego faktu, że w metodzie Rothe nie da się pokazać zbieżności schematu jawnego po czasowej dyskretyzacji. Rozumowanie jest poprawne i pomysłowe. Wzór (3.17) należy przenieść do "simple case" natomiast w podrozdziale "Lipschitz continuity of $E_{\tau,i}$" pożądany wniosek jest natychmiastowy i nie wymaga (3.17).
- Str 37. Example. W rachunku przytoczonym w *Example* stała Lipschitza będzie rzędu $1/\sqrt{\tau}$ co sprawi, że stanie się zależna od τ, a za czym idzie nie może być wykorzystana w Theorem 3.1. Ale tak naprawdę ta stała nie przekracza 1 co widać w następującym rachunku wymagającym regularności rozwiązania metody Rothe
$$(u_{i+1}, -\Delta u_{i+1}) + \tau\|\Delta u_{i+1}\|^2 = (u_i, -\Delta u_{i+1})$$
$$(\nabla u_{i+1}, \nabla u_{i+1}) + \tau\|\Delta u_{i+1}\|^2 = (\nabla u_i, \nabla u_{i+1})$$
$$(\nabla u_{i+1} - \nabla u_i, \nabla u_{i+1}) + \tau\|\Delta u_{i+1}\|^2 = 0.$$
Teraz korzystamy z typowej w metodzie Rothe zależności
$$(a-b, a) = \frac{a^2}{2} - \frac{b^2}{2} + \frac{(a-b)^2}{2}$$
$$\frac{1}{2}\|\nabla u_{i+1}\|^2 + \frac{1}{2}\|\nabla u_i - \nabla u_{i+1}\|^2 + \tau\|\Delta u_{i+1}\|^2 = \frac{1}{2}\|\nabla u_i\|^2.$$
Widać, że stała Lipschitza nie przekracza 1, a w schemacie pojawia się numeryczna dyssypacja pochodząca od członu $\frac{1}{2}\|\nabla u_i - \nabla u_{i+1}\|^2$.
- W rozdziale 4.1 autor mógłby po prostu przytoczyć twierdzenie Hilberta o projekcji ortogonalnej, z którego tu korzysta. Daje ono równocześnie minimalność jak i charakteryzację projekcji przez ortogonalność.
- W rozdziale 4.2.1 oznaczenie $l \in U'$ jest uproszczone, gdyż jest to także funkcja czasu.
- We wzorze (4.4) powinno być $S\left(1 - \frac{\alpha}{k}\right)$, wyrażenie $\mathcal{O}$ powinno wyglądać $\mathcal{O}\left(\frac{\alpha^3}{k^2}\right)$ (bo S jest rzędu α).
- Na stronie 48 znajduje się zapis $u \in H^2(\Omega)$, podczas, gdy u jest także funkcją zmiennej t.
- Str 63. Ciekawym by było sprawdzić, czy zastosowany schemat Newmarka zachowuje energię, na co wskazuje symulacja z kolejnej strony.

Powyższe uwagi i komentarze nie umniejszają wartości pracy, są to w większości uzupełnienia lub uwagi techniczne. Podoba mi się, że autor zaproponował nową strategię zrównoleglania metody adaptacyjnej a przy tym jego praca jest dobrze napisana i przedstawia równoległe symulacje numeryczne oraz precyzyjną matematyczną teorię ich zbieżności.

Zwracam uwagę na wysoką jak na doktoranta aktywność publikacyjną. Według bazy MathSciNet mgr inż. Łoś jest autorem 5 publikacji cytowanych czterokrotnie, a jego h-indeks to 2. Z kolei baza Web of Science podaje aż 20 publikacji (w tej liczbie są także prace konferencyjne), z czego co najmniej 7 to publikacje w czasopismach posiadających Impact Factor. Wśród czasopism, w których mgr inż Łoś publikuje swoje wyniki znajdują się, między innymi, takie bardzo dobrej klasy czasopisma jak "Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering" czy "Computer Physics Communications". Moim zdaniem mgr. inż Łoś mógłby z powodzeniem skorzystać ze ścieżki pozwalającej na obronę pracy doktorskiej "z dorobku".

W mojej ocenie przedstawiona rozprawa spełnia wszystkie wymogi stawiane pracom doktorskim. Wnioskuję o dopuszczenie mgr inż. Łosia do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Wnioskuję również o wyróżnienie pracy.

Piotr Kalita

Piotr Kalita