

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного
учреждения «Федеральный исследовательский
центр «Информатика и управление»
Российской академии наук»

(ФИЦ ИУ РАН)



Академик РАН

И. А. Соколов

ноября 2015 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» на диссертацию Горобца Андрея Владимировича «Параллельные технологии математического моделирования турбулентных течений на современных суперкомпьютерах», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Общая характеристика работы

Докторская диссертационная работа Горобца А. В. посвящена суперкомпьютерному моделированию задач механики сплошной среды с помощью численных методов повышенной точности на современных суперЭВМ, как российских (НИВЦ МГУ, ИПМ), так и иностранных (Испания). 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.

В работе подробно представлены разработанные по предложенной технологии новые параллельные алгоритмы и их реализующие комплексы параллельных программ для моделирования сжимаемых и несжимаемых турбулентных течений. Ключевым моментом является то, что представленные алгоритмы и программное обеспечение для суперкомпьютерных расчетов могут применяться для решения действительно крупных задач, с использованием десятков тысяч процессоров, с возможностью задействовать гибридные системы с ускорителями различной архитектуры, включая графические процессоры GPU, многоядерные сопроцессоры Intel Xeon Phi.

Автор применяет разработанный подход и программные комплексы для выполнения крупных вычислительных экспериментов по моделированию турбулентных течений. Помимо демонстрации эффективности предложенных методов и реализованных программных средств, результаты расчетов сами по себе представляют научную ценность, поскольку могут использоваться в качестве референсных данных при разработке новых моделей турбулентности.

Кроме того, следует отметить, что возможности разработанных в диссертационной работе параллельных технологий не исчерпываются задачами вычислительной газовой динамики, т. к. они могут быть с успехом использованы при численном решении различных задач математической физики.

Структура и содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы, содержащего 200 наименований. Общий объем диссертации составляет 226 страниц.

Во введении обосновывается актуальность тематики и научная новизна диссертации, сформулированы цели и задачи работы.

В первой главе с точки зрения высокопроизводительных вычислений описывается технология математического моделирования турбулентных течений с использованием конечно-объемных и конечно-разностных численных методов повышенной точности. Предлагаемая методика представляет собой набор взаимосогласованных подходов и способов эффективной разработки параллельных алгоритмов вычислительной газовой динамики и их программной реализации, рассчитанной на современные суперкомпьютерные архитектуры, в которых могут сочетаться различные типы вычислительных устройств и форм параллелизма.

Вторая глава посвящена составлению по предложенной в первой главе технологии нового параллельного алгоритма на основе схем повышенной точности на

неструктурированных сетках. Алгоритм составлен из ограниченного набора операций, совместимых со всеми уровнями многоуровневой параллельной модели, обладающей достаточной степенью универсальности для применения на широком спектре вычислительных архитектур. Демонстрируется использование более 20 тыс. процессорных ядер, а также производительность на ускорителях Intel Xeon Phi.

Затем, в третьей главе достаточно подробно описывается программная реализация разработанного алгоритма в виде программного комплекса для суперкомпьютерного моделирования сжимаемых турбулентных течений и генерируемых турбулентностью акустических возмущений.

В четвертой главе предложен новый параллельный алгоритм для моделирования несжимаемых течений на основе оригинального решателя для уравнения Пуассона, базовая версия которого имеет узкую специализацию: течения в трехмерных областях с одним однородным периодическим направлением. Представленный алгоритм также составлен из набора операций, полностью адаптированных к многоуровневой параллельной модели, позволяющей задействовать различные типы ускорителей.

Далее, в пятой главе, соответственно, подробно описывается гетерогенная программная реализация предложенного в предыдущей главе алгоритма. Использование средств открытого вычислительного стандарта OpenCL позволяет применять созданный программный комплекс на гибридных вычислительных системах с различными типами ускорителей. Демонстрируется использование более 10 тыс. процессорных ядер, а также производительность на ускорителях GPU производства AMD и NVIDIA.

Шестая глава посвящена крупным вычислительным экспериментам, выполненным по предложенной в диссертационной работе технологии с помощью разработанных автором программных комплексов. Представлены расчеты, в которых моделируется внешнее обтекание сжимаемым течением твердых препятствий и возникающие акустические поля; внешнее обтекание твердых тел несжимаемым течением; несжимаемые течения при естественной конвекции (каверны с разнотемпературными стенками, конвекция Рэлея–Бенара).

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Замечания к работе и отмеченные недостатки

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.

Значимость для науки результатов диссертации

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. Подробно исследованы различные модели параллельных вычислений применительно к конечно-объемным алгоритмам: модели с распределенной и общей памятью, параллелизм с одиночным и множественными потоками команд. Научную значимость представляют и результаты представленных в работе крупных расчетов фундаментальных задач, в которых численно исследованы различные типы турбулентных течений. Полученные численные решения вносят вклад в исследование таких сложных физических явлений, как турбулентность, генерация шума, тепломассоперенос. Результаты прямого численного моделирования имеют значимость как валидационный базис для разработки моделей и подходов к моделированию турбулентности.

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.

О значимости диссертационной работы также можно судить по использованию результатов в различных совместных научных исследованиях с отечественными и зарубежными научными организациями, включая работы коллег из Испании, Нидерландов, Франции, Китая. Предложенная технология применяется для разработки

порядка десятка параллельных расчетных кодов, в том числе создаваемых без непосредственного участия автора работы. Применение кодов продемонстрировано в различных публикациях на множестве вычислительных архитектурах: многоядерные CPU, GPU AMD, GPU NVIDIA, Intel Xeon Phi, процессоры и ускорители ARM.

Рекомендации по использованию результатов диссертации

Представленная в работе методика разработки параллельных алгоритмов и программ может применяться для создания эффективных переносимых программных комплексов для математического моделирования задач механики сплошной среды конечно-объемными, конечно-разностными, конечно-элементными методами, а также прямыми методами решения кинетического уравнения Больцмана с точным и модельным интегралом столкновений, разрабатываемых в ВЦ РАН.

Программные комплексы могут применяться для расчетов задач аэродинамики, аэроакустики, несжимаемых турбулентных течений и тепломассопереноса, в которых рассматривается течение однофазного газа или жидкости. Кроме того, программные комплексы могут использоваться в качестве платформ для разработки и реализации новых моделей турбулентности, численных методов и схем пространственной дискретизации, и так далее.

Результаты представленных в диссертационной работе расчетов могут использоваться для разработки моделей турбулентности на основе подходов LES, RANS, DES, регуляризации.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы, например, в следующих организациях: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ЦИАМ, ФИЦ ИУ РАН, ОАО «Камов», ОАО «ОКБ Сухого», ЦАГИ, МФТИ, ВМК МГУ, ИБРАЭ РАН и др. Также результаты работы могут быть рекомендованы к использованию в учебном процессе по направлениям 010400 – «Прикладная математика и информатика», 010800 – «Механика и математическое моделирование».

Заключение ведущей организации

Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне, имеет важное научное и практическое значение. Тематика диссертационной работы соответствует специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Автореферат диссертации в достаточной степени передает содержание работы и содержит необходимую информацию об основных положениях и результатах. Диссертационная работа Горобца А.В. отвечает требованиям,

предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание степени доктора физико-математических наук, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заключение подготовлено по результатам обсуждения диссертации на семинаре сектора кинетической теории газов отдела механики ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН.

Зав. сектором кинетической теории газов отдела механики
ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН, д. ф.-м. н.



Аристов Владимир Владимирович

Ведущий научный сотрудник сектора кинетической теории газов
отдела механики ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН, к. ф.-м. н.



Титарев Владимир Александрович

16 ноября 2015 года