

## СТАНОВИЩЕ

От: проф. дмн Светослав Маринов Марков, Институт по Математика и Информатика, БАН

Относно: дисертация на тема „Съставни числени методи и скалируеми блочни алгоритми“, от Димитър Георгиев Славчев, във връзка с процедурата за придобиване на образователната и научна степен “доктор” в Институт по информационни и комуникационни технологии на БАН (ИИКТ-БАН)

1. Общи данни относно процедурата. На основание чл. 4, ал. 2 от Закона за развитието на академичния състав в Република България и решение на Научния съвет на Институт по информационни и комуникационни технологии на БАН (ИИКТ-БАН), протокол № 1/26.01.2022 г., във връзка с процедурата за придобиване на образователната и научна степен “доктор” по професионално направление 4.5. Математика, докторска програма „Изчислителна математика“, от Димитър Георгиев Славчев с дисертация на тема „Съставни числени методи и скалируеми блочни алгоритми“, като член на научното жури за защита на дисертацията представям настоящето становище.
2. Кратки данни за автора. Димитър Славчев е магистър на ТУ-София – Приложна математика — 2013. Славчев е редовен докторант в ИИКТ от 2017 до 2020 г., а от 2020 до 2022 г. е асистент. Научен ръководител е чл.-кор. Светозар Маргенов. Дисертацията е обсъдена и допусната до защита на разширено заседание на секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“ на ИИКТ-БАН, състояло се на 11.01.2022 г. Представени са: Дисертационният труд, АВТОРЕФЕРАТ на дисертация, декларация за оригиналност на резултатите, списък на публикациите по дисертационния труд, апробация на резултатите, приложение и библиография.
3. Кратки данни за дисертационният труд. Дисертационният труд е структуриран в: увод, изложение от четири глави и заключение. Дисертационният труд е в обем от 140 страници, 47 фигури и 7 таблици, 90 цитирани литературни източника и 2 приложения.
4. Актуалност на темата. Численото решаване на задачи с голяма размерност изискващо използването на високо-производителни изчислителни компютърни системи е актуална тема. Тя изисква специализиран хардуер и софтуер – графични карти, ускорители, високоскоростна комуникация между сървърите на системата, софтуерни стандарти и пакети за комуникация между процесорни ядра и сървъри, софтуерни пакети имплементиращи ефективни числени методи и мн. др. При дискретизация на диференциалното уравнение с метода на граничните елементи, както и при прилагане на метода на крайните елементи за нелокални задачи (например изследваната в тази дисертация аномална (дробна) дифузия), получената матрица на коравина е плътна. Един възможен подход за намаляване на изчислителната сложност на решението на системи с такива матрици е йерархичната компресия въведена от Хакбуш (Hackbusch). При нея се използва структурата на изходната матрица. Целта е както за да се редуцира заеманата памет, така и да се подобри изчислителната ефективност. Тук под структура на плътна матрица се разбира наличието на апроксимация на изходящата матрица с нисък ранг на извъндиагоналните блокове. Това свойство позволява представянето на извъндиагоналните блокове като произведение на по-малки матрици. Съществуват различни разновидности на йерархични матрици, в т.ч.  $H_2$  или йерархични полусепарабелни (Hierarchically Semi-Separable) HSS матрици. Суперкомпютърните симулации са определящи за развитието в редица високо-технологични области. Такива например са *in silico* молекулярната биология и проектиране на лекарствени средства, анализа на турбулентни течения, без-разрушителният контрол, обработката на тримерни изображения, динамика на флуидите и



много други. След подходяща дискретизация математическите модели обикновено се свеждат до задачи на линейната алгебра, измежду които определяща е ролята на решаването на системи от линейни алгебрични уравнения. За целта се разработват специализирани софтуерни средства. В общия случай за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с плътни матрици се прилагат варианти на метода на Гаус, които използват последователно изключване на неизвестните. По предположение плътната матрица е хомогенна, тъй като не се предполага, че тя има нулеви елементи. Методът на Гаус има изчислителна сложност  $O(n^3)$ . В настоящата дисертация е изследван алтернативен подход на базата на йерархична компресия. Целта е намаляване на изчислителната сложност. Тук под структура на плътна матрица се разбира наличието на извън-диагонални блокове с нисък ранг. Съществена част от дисертацията е посветена на численото решаване на дробно дифузионни задачи. Дробната дифузия (наричана още аномална дифузия) описва нелокални процеси, които се наблюдават в различни физични и социални среди. За разлика от обикновената (локална) дифузия аномалната дифузия включва т.н. бързи преходи или тунелни ефекти. В литературата са публикувани разнообразни примери на математически модели на процеси и явления, които се описват с дробна дифузия. Такива например са: течения в силно нееднородни порести среди, суперпроводимост, дифузия на полимери в суперстудени среди; електродифузия на йони в нервни клетки и диагностика с помощта на фотонна дифузия; обработка на изображения и машинно самообучение, разпространение на вирусни заболявания, компютърни вируси, както и на престъпност. *Дробният* оператор на Лаплас описва аномална дифузия по пространството. Съществуват различни дефиниции на *дробен* лапласиан. Важно е да отбележим, че те не са еквивалентни. Така например в [13] е анализирана разликата между интегралната и спектралната дефиниции (виж също статиите в цитираната литература).

5. Основни цели на дисертацията са: 1. Сравнителен анализ на бързодействието и паралелната производителност на често използвани софтуерни пакети прилагачи директна гаусова елиминация за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с плътни матрица при използване на централни процесори (CPU) и ускорители (MIC). 2. Анализ на бързодействието, паралелното ускорение и точността на приблизителен метод за решаване на системи линейни алгебрични уравнения базиран на йерархична полусепарабелна компресия (HSS) от софтуерния пакет STRUMPACK за системи с подходяща структура на матрицата. 3. Разработване на алгоритми за пренареждане на неизвестните при задачи породени от дискретизация с метод на крайните елементи на дробна дифузия с цел подобряване на ефективността на йерархичната полусепарабелна компресия на така изчислената матрица на коравина. 4. Числено решаване на елиптични и параболични задачи от областта на аномалната дифузия описана с интегралната формулировка на дробен лапласиан и дискретизирана по пространството с метод на крайните елементи.
6. Кратко съдържание. В Увода са описани използваните методи и решаваните задачи. В Глава 1 се въвеждат използваните блочни методи за решаване на плътни системи линейни уравнения, и оценки за изчислителните им сложности; описан е метода на гаусова елиминация и базираната на него LU-факторизация. В Раздел 1.4 са разгледани йерархични методи за решаване на системи линейни уравнения разработени за решаване на системи със структурирани матрици (плътни и разредени). Описани са предимствата на метода, базиран на HSS компресия – по-ниска оценка на изчислителната сложност за задачи с подходяща структура на матрицата. В Глава 2 са представени числени резултати за обтичането на крилни профили на Жуковски. Получената система с плътна матрица се използва за бенчмарк при сравнителният анализ на използваните блочни алгоритми. В Глава 3 е разгледана задача за двумерна дробна дифузия моделирана с дробния оператор на Лаплас. За дискретизация по пространството се прилага метод на крайните елементи. В



Глава 4 е разгледана параболична задача за двумерна по пространството дробна дифузия. В Заключението са представени основните научни и научно-приложни приноси. Даден е списък на публикуваните статии и изнесени доклади на научни форуми, върху които се базира дисертацията. В Глава 2 се разглежда числен метод за компютърна симулация на ламинарен поток около крилни профили на Жуковски. В дисертацията е приложен методът описан в [23], като е разработена програмна реализация за обтичане на каскада от крилни профили от идеален флуид. Методът е базиран на колокация на сплайни с на части линейна интерполация. След дискретизиране на интегралните уравнения по метода на граничните елементи се получава система от линейни уравнения с плътна матрица. Резултатите от прилагане на изследваните в дисертацията методи и алгоритми се сравняват с резултати получени по метода на последователно изключване (метод на Гаус) реализиран в няколко популярни софтуерни пакета. Върху CPU процесори в сравнителния анализ на производителността се използва Intel Math Kernel Library (MKL) и Parallel Linear Algebra for Scalable Multi-core Architectures (PLASMA), докато за Intel Xeon Phi копроцесорите (накратко наричани MIC от името на архитектурата Many Integrated Core) MKL производителността се сравнява и с Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures (MAGMA) за MIC архитектура (наричан за кратко MAGMA MIC). Централно място в представените резултати в Глава 2 заема изследването на метода на йерархична полусепарабелна компресия (HSS компресия). Експерименталният сравнителен анализ е на базата на неговата реализация в софтуерния пакет STRUMPACK. Той показва по-добро бързодействие от преките Гаусови солвъри, използващи блочна LU факторизация. В същото време получените паралелни ускорения със STRUMPACK са по-малки, което се обуславя от по-сложната йерархична структура на алгоритъма. Точността и изчислителната ефективност на HSS компресията зависят от праговете на относителна и абсолютна грешка. Това са параметри, които се избират от потребителя. Представеният анализ показва как да получим най-добра ефективност при зададена точност. Глава 3 е посветена на дробните елиптични оператори по пространството на степен  $\alpha \in (0,1)$  описващи процеси на дробна дифузия. Свързаните с тях гранични задачи са нелокални и, в общия случай, численото решение на такива задачи е изчислително скъп процес. Такъв тип нелокални модели се прилага например в обработката на изображения, финансовата математика, електро-магнитостатиката, перидинамиката, моделирането на течения в порести среди и много други. Анализирани са няколко софтуерни пакета реализиращи методи от тип гаусова елиминация. В глава 3 е използван само най-ефективният от тях: Intel's Math kernel Library (MKL). Анализирана е производителността на алгоритъма базиран на йерархична полусепарабелна компресия (HSS), реализиран в пакета STRUctured Matrix PACKage (STRUMPACK). Изследвани са няколко метода за пренареждане на неизвестните с цел подобряване ефективността на HSS компресията. Експерименталният сравнителен анализ се базира на реализацията на HSS компресия и ULV-подобна факторизация в софтуерния пакет STRUMPACK. Анализът показва добро бързодействие на последователния алгоритъм в сравнение с прекия гаусов солвър, използващ блочна LU факторизация. В същото време, получените паралелни производителности и ускорения при използване на пакета STRUMPACK са по-малки, което се обяснява с по-сложната йерархична и рекурсивна структура на компресията. Точността и изчислителната ефективност на HSS компресията съществено зависят от праговете на относителна грешка  $\epsilon_{rel}$  и абсолютна грешка  $\epsilon_{abs}$ , както и от наличието на подходяща структура на матрицата. При експериментите се наблюдава относителна грешка  $R_{relative}$  на численото решение близка до  $\epsilon_{rel}$ . За подобряване на структурата на матрицата са предложени пет начина за пренареждане на неизвестните, които увеличават съществено ефективността на компресията. Представеният анализ показва, че при повечето експерименти ефективността на HSS компресията е най-добра при пренареждане с рекурсивната бисекция. Предложените пренареждания на неизвестните значително подобряват ефективността. В



Глава 4 се правш анализ на числени експерименти върху компютърни системи с обща памет. Водеща тема в представените резултати е анализът на изчислителната ефективност на метода базиран на йерархична полусепарабелна компресия и ULV-подобна факторизация и неговата паралелна реализация в софтуерния пакет STRUMPACK.

7. Общ поглед. В дисертацията е анализирана изчислителната ефективност на блочни числени методи и алгоритми за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с плътни матрици. Мотивация на това изследване са приложения свързани с числено решаване на елиптични и параболични частни диференциални уравнения. Две такива задачи са използвани в представения сравнителен анализ: а) гранична задача описваща обтичане на крилни профили на Жуковски, дискретизирана с метод на граничните елементи; б) аномална дифузия в ограничена област моделирана с дробен лапласиан, където за дискретизация е приложен метод на крайните елементи. И в двата случая непрекъснатите задачи се свеждат до системи линейни алгебрични уравнения с плътни матрици. Показано е, че структурата на тези матрици е подходяща за прилагане на йерархичен метод използващ HSS компресия. Важна част е сравнителният анализ на изчислителната ефективност на софтуерни пакети имплементиращи блочна LU факторизация, като вариант на гаусова елиминация. Общият извод е, че софтуерният пакет MKL има по-добро бързодействие от анализирания алтернативни паралелни реализации на блочна LU факторизация. Основен акцент в дисертацията е анализът на възможността за подобряване на изчислителната ефективност на решаването на системи линейни алгебрични уравнения с плътни матрици с помощта на блочен йерархичен метод използващ HSS компресия. Този метод е реализиран в софтуерния пакет със свободен достъп STRUMPACK. Анализирана е производителността на йерархичния алгоритъм за системи линейни алгебрични уравнения, получени при прилагане съответно на метод на граничните елементи и метод на крайните елементи за разглежданите елиптични гранични задачи. Анализът показва, че тези плътни матрици имат подходяща структура за прилагане на йерархичния метод. Това означава, че в процеса на HSS се получават извъндиагонални блокове с нисък ранг. Последователните експерименти потвърждават оценките на изчислителната сложност на анализирания блочни методи. И за двете задачи йерархичният солвър има по-добро бързодействие от гаусовия солвър от пакета MKL – най-ефективният от анализирания в настоящата работа софтуерни средства използващи LU факторизация. При прилагане на йерархичния метод се намира приближено решение на системата, като неговата точност зависи от това каква е точността на HSS компресията. За задачата за обтичане на крилни профили на Жуковски относителните грешки за съответните прагове  $\varepsilon_{rel}$  са по-големи, което обаче се компенсира от по-доброто бързодействие. Структурата на получената плътна матрица не е подходяща за HSS компресия. За нейното подобряване са предложени и пет метода за пренареждане. Представеният анализ показва преимущества на методите на вложените сечения и на рекурсивната бисекция. Изследвана е изчислителната ефективност и точност на йерархичния солвър базиран на HSS компресия за параболична задача с дробна дифузия по пространството. За дискретизация по времето е използвана неявна диференчна схема на Ойлер с постоянна стъпка. При тази постановка на задачата намирането на численото решение се свежда до решаване на последователност от системи линейни алгебрични уравнения с една и съща матрица. Така на всяка стъпка по времето се решава система с матрицата на прехода, която е факторизирана еднократно. Решаването на такива системи с помощта на HSS компресия има по-ниска изчислителна сложност –  $O(nr)$ , в сравнение с използваната в метода на Гаус LU факторизация –  $O(n^2)$ . За разглежданата параболична задача времената на йерархичния солвър са по-добри, както при последователните, така и при паралелните експерименти. В същото време, благодарение на безусловната



устойчивост на неявния метод на Ойлер, относителната грешка на решението се запазва близка до зададения относителен праг  $\epsilon_{rel}$ .

8. Основни научни и научно-приложни приноси. Изследвана е производителността на следните софтуерни пакети за решаване на линейни системи с плътни матрици, с помощта на блочна LU факторизация: - за процесори с общо предназначение (CPU) – пакетът на Intel Math Kernel Library (MKL) и библиотеката със свободен достъп Parallel Linear Algebra Software for Multicore Architectures (PLASMA); - за ускорители с архитектурата Many Integrated Core (MIC) на Intel – MKL и пакетът със свободен достъп Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures (MAGMA). Резултатите от числените експерименти за системи получени при дискретизация с метод на граничните елементи за гранична задача за ламинарен поток около крилни профили на Жуковски са в съответствие с асимптотичните оценки на изчислителната сложност. Сравнителният анализ показва по-добро бързодействие и много добра паралелна скалируемост на пакета MKL. Изследвана е изчислителната сложност, паралелната ефективност и относителната грешка на метод на йерархична полусепарабелна компресия (HSS). Числените експерименти са проведени с пакета със свободен достъп STRUctured Matrices PACkage (STRUMPACK), в който е реализиран паралелен солвър на базата HSS компресия и ULV-подобна факторизация. Сравнителният анализ включва два типа плътни матрици, които са получени при дискретизация. Показано е, че за задачата за обтичане на профили на Жуковски при дискретизация по метода на граничните елементи, последователната номерация на възлите по границата на профилите води до матрица с подходяща за HSS компресия структура. Това не е така за дробно дифузионната гранична задача, дискретизирана с метод на крайните елементи. С цел подобряване на ефективността на йерархичната полусепарабелна компресия са предложени и изследвани пет метода за пренареждане на неизвестните. За три от тях са разработени собствени алгоритми и програмни реализации. Сравнителният анализ показва съществено подобрение на резултатите при прилагане на методите на вложените сечения и на рекурсивната бисекция. Разработен е метод, алгоритъм и програмна реализация за числено решаване на параболично уравнение с дробно дифузионен оператор по пространството. За дискретизация по времето е приложен неявен метод на Ойлер с постоянна стъпка по времето и диагонална концентрация на масата. Доказано е, че за тази нестационарна задача, изчислителната сложност на отделните части на алгоритъма създава условия за предимство на йерархичния метод на базата на HSS компресия. Това е потвърдено от проведените числени експерименти. Така за всички размерности на дискретната задача по пространството, както и при всички варианти на праг на относителна грешка, вариантът на програмата използваща солвъра от пакета STRUMPACK има по-добро бързодействие от този използващ MKL.

**Заклучение.** Оценката ми за научните и научно-приложни приноси на Димитър Георгиев Славчев в дисертацията му на тема „Съставни числени методи и скалируеми блочни алгоритми“, във връзка с процедурата за придобиване на образователната и научна степен “доктор” в Институт по информационни и комуникационни технологии на БАН (ИИКТ–БАН) е категорично положителна. Тези приноси съответстват на изискванията на ЗРАСРБ, Правилниците за прилагане на ЗРАСРБ на БАН. Изпълнени са минималните национални изисквания и тези на ИИКТ–БАН. Препоръчвам на Димитър Георгиев Славчев да бъде присъдена образователната и научна степен „доктор“ по професионално направление 4.5. Математика, докторска програма „Изчислителна математика“.

29.04.2022 год.

Изготвил становището:

гр. София

/проф. дмн Светос

На основание

ЗЗЛД