

**ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию Куликова Игоря Михайловича
«Математическое моделирование трехмерных гидродинамических процессов
в самосогласованном гравитационном поле на суперЭВМ», представленную на
соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18
– математическое моделирование, численные методы и комплексы программ**

Представленная диссертационная работа посвящена вопросам численного моделирования сложных задач механики сплошной среды на современных гибридных суперкомпьютерах. В основном это задачи, связанные с движением самогравитирующей среды, включая и случаи, когда необходимым является учёт магнитного поля. Рассматривается также проблема моделирования упругопластических деформаций при наличии фазовых переходов. В работе формулируется целый ряд физико-математических моделей, предлагаются алгоритмы для численного моделирования физических процессов в рамках сформулированных моделей, рассматриваются вопросы эффективной параллельной реализации предложенных численных алгоритмов на суперкомпьютерах гибридной архитектуры, оснащённых графическими ускорителями NVIDIA или ускорителями Intel Xeon Phi. Автором диссертации разработаны и верифицированы расчётные коды для решения уравнений гравитационной газовой динамики, выполнено численное моделирование широкого спектра задач — от формирования крупномасштабной структуры Вселенной и эволюции скопления галактик до образования протопланетных дисков, столкновения метеоритов с поверхностью планеты и процесса сварки взрывом двух металлических пластин.

Актуальность темы диссертационной работы определяется в первую очередь астрофизическими приложениями полученных результатов. В последние годы мы стали свидетелями бурного развития космологии и астрофизики, в этих областях был совершён ряд выдающихся открытий, таких, например, как открытие ускоряющегося расширения Вселенной. Наряду с наблюдательной астрономией, одним из основных инструментов исследования в этих, всегда вызывавших у человека большой интерес попытках понять устройство окружающего нас мира на космических масштабах, стало численное моделирование, требующее обычно использования всей мощи современных компьютеров. Несомненно, важной и актуальной темой является и разработка численных методов расчёта упруго-пластических деформаций, причём не только с точки зрения практических приложений к сварке взрывом, но и для общего улучшения нашего понимания сложных процессов, происходящих при высокоскоростном взаимодействии твёрдых тел и включающих фазовые переходы и разрушение.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения.

Во *введении* обосновывается актуальность темы исследования, определяются объект исследований и цели работы, формулируется, в чем именно состоит ее научная новизна, какова научная и практическая ценность проведённых исследований. Дан обзор нерешенных задач в рассматриваемой области, анализируются достоинства и недостатки различных подходов,

используемых в настоящее время при численном моделировании задач гравитационной газовой динамики, перечисляются и кратко характеризуются 20 наиболее известных вычислительных кодов для решения астрофизических задач.

Первая глава диссертации посвящена моделированию упруго-пластических деформаций, возникающих при высокоскоростном столкновении твёрдых тел.

Формулируется математическая модель, основанная на уравнениях нелинейной теории упругости в лагранжевых координатах с максвелловскими релаксационными членами. Вводится уравнение состояния, выражающее внутреннюю энергию упруго-пластической среды через ее энтропию и инварианты тензора дисторсии, получены условия его корректности. Учитывается возможность фазовых переходов, приводящих к появлению жидкой и газообразной фаз.

Для численного решения уравнений строится метод типа метода Годунова, основанный на решении задачи о распаде разрыва. Ячейки расчётной сетки движутся и деформируются в соответствии с рассчитанным полем скорости сплошной среды. Алгоритм верифицирован на решении задачи о распаде разрыва в упругой среде. После этого он применён к решению задачи о сварке взрывом двух алюминиевых пластин и задачи о столкновении метеорита с поверхностью планеты (рассмотрен удар с дозвуковой скоростью и удар со сверхзвуковой скоростью). К сожалению, результаты расчётов описаны чересчур кратко.

Во *второй главе* описываются физико-математические модели, используемые в диссертации при моделировании астрофизических процессов в самосогласованном гравитационном поле.

Описание газовой компоненты астрономических объектов в диссертации основано на уравнениях газовой динамики (в общем случае многокомпонентной, но односкоростной) или магнитной газовой динамики. Для моделирования бесстолкновительной компоненты, представляющей звезды и тёмную материю, в диссертации, в отличие от широко распространённой модели N тел, используется подход, основанный на решении уравнений для первых моментов функции распределения, выводимых из бесстолкновительного уравнения Больцмана. При этом могут рассматриваться как уравнения для полного тензора дисперсии скоростей, так и уравнения только для его диагональных компонент.

Решаемые уравнения для газовой и бесстолкновительной компонент включают источниковые члены, описывающие взаимные переходы между двумя компонентами за счёт звездообразования и взрывов сверхновых, а также процессы нагрева и охлаждения галактического газа и большой набор химических реакций, связанных с ионизацией, диссоциацией и рекомбинацией водорода и гелия.

Гравитационное поле определяется из решения уравнения Пуассона для потенциала. При решении космологических задач учитывается вклад тёмной энергии, для этого уравнения переписываются в координатах, преобразованных в соответствии с мгновенным значением параметра расширения, вычисляемым из уравнения Эйнштейна.

Третья глава, самая большая по объёму, посвящена подробному описанию численных подходов, используемых в диссертации для решения задач астрофизики и космологии на основе сформулированных в предыдущей главе физико-математических моделей, и вопросам эффективной программной реализации этих подходов на современных суперкомпьютерах гибридной архитектуры.

Для решения уравнений газовой динамики автор использует схему сквозного счета, основанную на представлении решения кусочно-параболической функцией и являющуюся развитием хорошо известного метода РРМ. Характерной особенностью подхода автора является то, что практически во всех задачах он решает переопределенные системы уравнений, содержащие уравнения как для полной, так и для внутренней энергии. Полученные значения используются затем в процедуре коррекции: в той части области, где плотность газа достаточно велика, полученное значение внутренней энергии заменяется на вычисленное из величин полной энергии, плотности и компонент скорости; в остальной части, напротив, значение внутренней энергии используется для коррекции длины вектора скорости. Еще одной особенностью применяемого подхода является использование метода дробных шагов: уравнения расщепляются на две подсистемы, решаемые, соответственно, на «эйлеровом» и «лагранжевом» этапах; при этом в систему, решаемую на первом этапе включаются все члены, кроме описывающих конвективный перенос (адвекцию).

Трехмерное уравнение Пуассона для гравитационного потенциала аппроксимируется конечноразностной схемой на 27-точечном шаблоне. При задании граничных условий для потенциала используются первые члены мультипольного разложения. Решение находится с помощью преобразования Фурье по всем трем координатам, при этом, естественно, используется быстрое преобразование Фурье.

Для верификации численных методов выполнено большое число численных экспериментов: решены ряд классических одномерных и двумерных задач газовой динамики и магнитной газовой динамики, рассмотрены равновесные конфигурации вращающегося самогравитирующего газа, столкновение двух самогравитирующих сфер с одинаковыми и различными массами.

Большое внимание уделено параллельной реализации вычислительных алгоритмов на многопроцессорных суперкомпьютерах гибридной архитектуры, оснащенных графическими ускорителями NVIDIA или ускорителями Intel Xeon Phi. Соответственно, автором разработаны два вычислительных кода — GPUPEGAS на основе интерфейса MPI и платформы CUDA, и AstroPhi, использующий MPI и стандарт OpenMP. В обоих кодах производится геометрическая декомпозиция расчётной области вдоль одной из координат на блоки, присваиваемые различным ЦПУ, а затем декомпозиция по двум другим направлениям для распределения ячеек сетки между ядрами ускорителей. Выполнены численные эксперименты для исследования эффективности параллелизации для обеих платформ.

Последняя, *четвертая, глава* диссертации содержит результаты численного моделирования гидродинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле. Решаемые задачи охватывают очень большой диапазон масштабов. Последовательно рассматривается образование крупномасштабных космологических структур, эволюция скопления галактик, столкновения галактик, взаимодействие галактики с галактическим ветром, образование спиральных рукавов и хвостов галактик, динамика молекулярных облаков и межзвездной среды (сжатие вращающегося облака, коллапс Эвварда, взаимодействие облака с межзвездной средой, образование в облаке молекулярного водорода, МГД турбулентность межзвездной среды) и, наконец, образование однопланетной системы и поздние стадии эволюции протопланетного диска. Уже простое перечисление задач дает представление о

большом объеме выполненной работы и разнообразии решаемых задач. Центральное место при этом занимают задачи динамики галактических структур, включающие большое число различных постановок и вариантов. При проведении расчетов использованы весьма подробные сетки (до $7168 \times 1024 \times 1024 \approx 7,5$ млрд. ячеек).

Оценивая диссертацию в целом нужно сказать, что она представляет заметный вклад в развитие методов математического моделирования газодинамических процессов в самосогласованном гравитационном поле. Автором разработаны вычислительные алгоритмы решения сложных трехмерных задач газовой динамики с дальнедействующими силами, осуществлена их эффективная программная реализация для гибридных суперкомпьютеров двух различных архитектур, получено большое количество новых результатов, касающихся формирования и эволюции астрономических объектов. Полученные результаты могут найти применение в научных организациях, занимающихся вопросами космологии, астрономии и астрофизики, планетологии, в частности Институте астрономии РАН, Государственном астрономическом институте им. П.К. Штернберга, Астрокосмическом центре ФИАН, Институте космических исследований РАН, Пулковской и Крымской обсерваториях.

Большой интерес представляют и результаты по расчету упругопластических деформаций при высокоскоростном соударении твердых тел. Кроме вклада в разработку моделей, способов описания и методов решения задач нелинейной теории упругости и пластичности материалов, включающих фазовые переходы, они имеют непосредственное практическое значение, в частности для совершенствования технологий сварки взрывом.

Разработанные автором проблемно-ориентированные программные комплексы для численного моделирования на гибридных суперкомпьютерах зарегистрированы в Фонде алгоритмов и программ СО РАН, Роспатенте и специализированной библиотеке журнала *Computer Physics Communications*; они используются в нескольких институтах РАН, Южно-Уральском федеральном университете и Институте астрономии Венского университета (Австрия), группе компаний РСК.

Разумеется, представленная диссертация не свободна и от определенных недостатков. После ее прочтения у меня возник ряд замечаний, сформулированных ниже.

1. Используемый в диссертации при решении уравнений движения газовой и бесстолкновительной компонент метод расщепления по физическим процессам вероятно облегчает разработку вычислительных алгоритмов, заменяя полный набор характеристик гиперболической системы двумя редуцированными наборами. В то же время он ухудшает точность интегрирования уравнений по времени, вводя, независимо от точности интегрирования на отдельных этапах, ошибку первого порядка по Δt . Численные эксперименты свидетельствуют, что при решении одномерных тестовых задач решение определяется с высокой точностью. Однако, по крайней мере в одном из двумерных тестов (сверхзвуковое течение в канале со ступенькой) качество решения кажется не вполне удовлетворительным.

2. Граничные условия для гравитационного потенциала, вытекающие из мультипольного разложения не являются периодическими. В то же время для решения уравнения Пуассона используется преобразование Фурье. Известно, что коэффициенты разложения непериодической функции по фурье-гармоникам будут убывать весьма медленно. Вообще говоря, это может привести к потере точности.

3. В целом ряде мест при построении вычислительных алгоритмов автором используются эвристические приемы, не имеющие строгих теоретических обоснований. Это, в частности относится к процедуре коррекции внутренней энергии или длины вектора скорости, основанной на локальном значении плотности — не может ли она вводить возмущения вблизи тех мест, где происходит переключение от коррекции одной физической величины к коррекции другой? Почему в качестве индикатора нужно использовать значение именно плотности, переменной, которая одна не определяет относительную величину внутренней и кинетической энергий?

Определенные сомнения у меня вызывает процедура осреднения скоростей на лагранжевом этапе. Она призвана уменьшить нежелательные эффекты, связанные с нарушением изотропности пространства при введении декартовой прямоугольной сетки. Однако, как и любое осреднение, данная процедура означает отфильтровывание коротковолновых компонент решения, и может привести к его нефизическому сглаживанию.

Упомяну также модификацию вычисления «средних по ρ_{0j} », используемую при определении величин на гранях между ячейками. Исходные формулы, предложенные ρ_{0j} , вытекают из требования, чтобы разность консервативных переменных, умноженная на матрицу Якоби, вычисленную в «среднем по ρ_{0j} » состоянии, точно равнялась разности потоков. Используемая же автором модификация кажется в значительной степени произвольной.

4. При исследовании эффективности параллельной реализации, автор, в частности, определяет как изменяется время счета при использовании различного числа ядер ускорителя (SingleGPU или SingleMIC Performance). Мне непонятно, почему эта величина имеет какое-либо значение, поскольку на практике всегда будут использоваться все ядра (нити) графической карты или другого ускорителя. Отмечу еще, что хотя замечание автора об отсутствии редуцирующей операции (конкретно, вычисления минимума) в технологии CUDA справедливо, такая процедура может быть совсем просто разработана самостоятельно, в частности прямо следуя указаниям в известной книге А.В. Борескова и А.А. Харламова. Вызывает вопросы и явно требует пояснения очень большая доля (80% общего времени), приходящаяся на лагранжев этап вычислений.

5. При изложении материала автор уделил большое внимание представлению численных алгоритмов и вопросам их программной реализации. В то же время интереснейшие результаты численного моделирования конкретных астрономических объектов описаны в главе 4 зачастую слишком кратко и калейдоскопично. Хотя автор периодически упоминает, что результаты того или иного моделирования соответствуют имеющимся астрономическим данным, в целом соотношение между различными сценариями, рассматриваемыми в численном моделировании, и данными наблюдательной астрономии остается скрытым от читателя (особенно не являющегося специалистом по астрономии и астрофизике). Думаю, что здесь большую пользу могло бы принести включение в диссертацию фотографий реальных астрономических объектов, аналогичных моделируемым автором.

6. К сожалению, диссертация включает довольно большое число опечаток, несогласованных фраз и т. п. Меня удивило систематическое использование слово «терм» вместо обычного русского «член уравнения». В главе 3, перейдя к двумерным тестовым примерам, автор во многих случаях начинает забывать о необходимости указывать число точек расчетной сетки, на которой проведено моделирование. Еще более неприятным является отсутствие подобной информации во многих расчетах эволюции астрономических объектов в главе 4.

Выписав 27-точечную схему для уравнения Пуассона, автор забывает указать порядок, с которым она аппроксимирует уравнение.

Высказанные замечания не снижают существенно моей оценки диссертационной работы. В диссертации получено много важных интересных новых результатов. При ее выполнении И. М. Куликов показал себя высококвалифицированным специалистом в области математического моделирования и вычислительной гидродинамики.

Представленная диссертация обладает несомненной научной новизной и актуальностью. Достоверность полученных научных результатов обеспечивается предварительным тестированием используемых вычислительных алгоритмов и разработанных на их основе программ, сравнением с доступными аналитическими решениями, применением достаточно подробных расчетных сеток, сравнением с данными астрономических наблюдений. Диссертация хорошо апробирована, ее основные результаты опубликованы в большом числе статей, включая и статьи в таких высокорейтинговых зарубежных журналах как Journal of Computational Physics и Computer Physics Communications. Автореферат работы правильно отражает содержание диссертации. Считаю, что представленная работа полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым действующим Положением о порядке присуждения ученых степеней, к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических работ по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а ее автор, Игорь Михайлович Куликов, несомненно заслуживает присуждения искомой ученой степени.

Официальный оппонент,
д.ф.-м.н., с. н. с. ИТПМ СО РАН
18 января 2017 г.

Кудрявцев
Алексей Николаевич

Собственноручную подпись А.Н. Кудрявцев
удостоверяю А.С. Яркова
Зав. канцелярией Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича Сибирского отделения
Российской академии наук 18.01.2017



Кудрявцев Алексей Николаевич
доктор физико-математических наук, специальность ВАК 01.02.05 –
механика жидкости, газа и плазмы, старший научный сотрудник Лаборатории
вычислительной аэродинамики Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН. Сайт: www.itam.nsc.ru
Адрес: 630090, Российская федерация, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1
Рабочий телефон: +7 (383) 354-30-44
Электронный адрес: alex@itam.nsc.ru
Личная страница: <http://www.itam.nsc.ru/users/alex>