

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Марченко Михаила Александровича «Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределенных вычислений», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

1. Актуальность темы исследований

В свете стремительного развития многопроцессорной вычислительной техники, перспективности методов численного статистического моделирования, хорошо адаптируемых к организации параллельных вычислений, круга решаемых задач математической физики, характеризуемого использованием вероятностных моделей при их численном моделировании (при моделировании кинетических процессов, диффузионных процессов, процессов коагуляции в дисперсных системах, электрических разрядов в газах и т.п.) тема диссертационной работы, несомненно, является актуальной.

Естественно, настолько же актуальными являются разработка параллельного генератора псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования, создание параллельных прикладных программ для решения вышеуказанных задач и стандартных библиотек для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах с различной архитектурой.

Содержание и область исследований диссертации соответствует паспорту специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. В ней присутствуют оригинальные результаты из областей математического моделирования, численных методов и комплексов программ.

2. Научная новизна исследований и полученных результатов

Результаты, полученные в диссертационной работе, являются новыми, опубликованы в 63 печатных работах автора, среди которых 19 статей в журналах из списка, рекомендованного ВАК, 1 монография, 4 статьи в изданиях, индексируемых SCOPUS и Web of Science, 9 свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ, 18 статей в сборниках трудов конференций, 8 публикаций в прочих рецензируемых журналах и изданиях.

Диссертация объемом 281 страница включает введение, 6 глав основного содержания, заключение, приложение, список использованных источников из 312 наименований, включая публикации автора по теме диссертации.

Первая глава диссертации (12 стр.) посвящена обзору методов численного статистического моделирования кинетических процессов и способов их распараллеливания.

В п.1.1 обсуждаются работы, посвященные численному статистическому моделированию при решении диффузионных задач, связанных с оценкой функционалов от маловероятных событий для случайной величины. Отмечается сфера, где такие задачи весьма актуальны, трудности при оценке таких функционалов методом численного статистического моделирования, важность теоретических результатов при исследовании объектов и используемых вероятностных моделей, методы, используемые для повышения эффективности расчетов. Обсуждаются математические модели в виде систем стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) с осциллирующими решениями и область их применения.

В п.1.2 анализируются работы, связанные с численным статистическим моделированием кинетических процессов коагуляции и переноса заряженных частиц.

В п.1.3 обсуждаются направления исследований и работы, ориентированные на параллельную реализацию численного статистического моделирования, на реализацию генераторов псевдослучайных чисел и на оценку масштабируемости параллельных алгоритмов. Подчеркивается актуальность разработки адекватных вероятностных моделей кинетических процессов, принципиально рассчитанных на использование суперкомпьютеров.

Во **второй главе** диссертации (32 стр.) рассматриваются вопросы, связанные с численным статистическим моделированием при решении диффузионных задач с использованием распределенных вычислений.

П. 2.1 посвящён задачам оценки функционалов на траекториях диффузионных процессов с применением распределенных вычислений. Подчеркивается, что для статистического моделирования траекторий системы СДУ используется метод Эйлера. Определяются понятия аналоговой оценки, дискретной и непрерывной постановок задачи вычисления функционалов от траекторий диффузионных процессов. Подчеркивается, что повысить эффективность оценивания можно за счёт использования специальных способов уменьшения дисперсии (методов расщепления и весового моделирования по ценности) и применения распределенных вычислений на многопроцессорных вычислительных системах (МВС).

В п. 2.2 рассматриваются вопросы оценки вероятности недостижения границы области траекториями диффузионного процесса за заданное время. Определяются аналоговая оценка вероятности, расщепленная оценка вероятности, весовая оценка вероятности с использованием приближения к функции ценности. Доказывается теорема, из которой следует, что трудоёмкость весовой оценки возрастает медленнее, чем аналоговой. Приводятся результаты численных экспериментов с использованием распределённых вычислений, подтверждающие преимущество весовой оценки.

В п. 2.3 рассматривается задача оценки полной концентрации траекторий диффузионного процесса в точке за заданное время. Рассматривается аналоговая оценка концентрации, весовая с приближением к функции ценности, доказываемая теорема, подтверждающая преимущество последней. Рассматривается комбинирование аналоговой, расщепленной и весовой оценок. Приводятся результаты численных экспериментов с использованием распределённых вычислений.

В выводах даются рекомендации по использованию результатов для решения практических диффузионных задач, связанных с моделированием маловероятных событий.

В **третьей главе** (24 стр.) рассматриваются вопросы численного статистического моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции с использованием распределённых вычислений.

В п. 3.1 рассмотрена вероятностная модель для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции. Для этой задачи впервые предложено использовать метод прямого статистического моделирования.

В п. 3.2 рассматривается интегральное уравнение для плотности столкновений.

В п. 3.3–3.5 рассматривается параллельный алгоритм, реализующий вероятностную модель, исследуется его эффективность, приводятся рекомендации по выбору МВС, результаты расчетов с использованием распределённых вычислений.

Четвёртая глава (24 стр.) посвящена статистическому моделированию процесса переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений.

В п. 4.1 рассматривается вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе, алгоритм статистического моделирования.

В п. 4.2 обсуждаются особенности моделирования элементов траектории и выбора параметров алгоритма.

В п. 4.3 рассматриваются технологии распараллеливания алгоритма (крупноблочное, мелкоблочное и комбинированное распараллеливание), оценивается ускорение от распараллеливания.

В п. 4.4 приводятся результаты расчетов при использовании распределённых вычислений.

Пятая глава (45 стр.) посвящена распределительному способу получения псевдослучайных чисел и методике распределённого численного статистического моделирования. Эта глава является ключевой, так её идеи и результаты использованы при численном моделировании задач, описанных в главах 2–4, реализованы в программном обеспечении, описываемом в главе 6 и в приложении.

В п. 5.1 рассматриваются варианты распределительного способа получения псевдослучайных чисел в зависимости от архитектуры МВС и специфики решаемых задач.

Результаты тестирования и сравнительного анализа генераторов приводятся в п. 5.2.

Предлагаемая методика распределённого статистического моделирования для высокопроизводительных систем рассматривается в п. 5.3.

В п. 5.4 рассматриваются типичные приложения, в которых востребовано использование распределённого моделирования.

Вопросы организации связи между процессорами обсуждаются в п. 5.5.

В п. 5.6 рассматривается имитационная модель для программ распределённого моделирования, построенная с использованием мультиагентного подхода, позволяющая делать оценки масштабируемости.

Шестая глава (24 стр.) посвящена разработанным библиотекам программных средств, предназначенным для реализации распределённых вычислений, и некоторым примерам решения соответствующих задач.

В **заключении** формулируются основные результаты, полученные в работе.

В трёх **приложениях** приводятся: краткое описание разработанных параллельных программ, библиотек, программного комплекса параллельных генераторов; описания свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ; акты о внедрении научных и практических результатов диссертации.

3. Обоснованность и достоверность полученных результатов

Результаты автора опираются на корректное применение численных методов, статистического моделирования, на фундаментальные закономерности теории вероятностей и методов статистического анализа.

Достоверность полученных соискателем результатов подтверждается согласованностью выводов, формируемых на основании моделирования исследуемых процессов и оцениваемых функционалов с использованием разработанных распределённых алгоритмов моделирования и созданных программ и универсальных библиотек, с результатами других авторов, получаемых при решении аналогичных или близких задач, и не противоречат последним.

4. Научная и практическая ценность основных положений диссертации

Научная и практическая ценность диссертации заключается:

– в разработке и исследовании эффективных алгоритмов распределённого статистического моделирования на основе методов расщепления и весового моделирования для оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов;

– в разработке и исследовании вероятностной модели для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции с применением пространственной регуляризации ядра коагуляции и метода

мажорантной частоты, в реализации алгоритма, использующего распределённые вычисления;

– в разработке и исследовании вероятностной модели для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе, опирающейся на использование ветвящихся процессов, в реализации алгоритма, ориентированного на распределённые вычисления;

– в разработке и исследовании длиннопериодных параллельных генераторов псевдослучайных чисел, в методике распределённого статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, в разработке универсальных библиотек и прикладных программ, ориентированных на организацию распределённых вычислений;

– в разработке имитационной модели исполнения программ распределённого статистического моделирования для оценки их масштабируемости на большое число процессоров.

5. Рекомендации по возможности использования результатов и выводов диссертации

Результаты диссертационной работы Марченко М.А., построенные вероятностные модели, методика распределённого статистического моделирования, параллельные программы численного статистического моделирования и универсальные библиотеки могут применяться при моделировании различных физических процессов и решении задач математической физики, исследование которых требуют значительных ресурсов высокопроизводительных вычислительных систем.

В качестве конкретных мест возможного внедрения можно рекомендовать: Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Главную геофизическую обсерваторию имени А.И. Воейкова, Гидрометцентр России, Межведомственный Суперкомпьютерный Центр РАН и другие суперкомпьютерные центры.

6. Замечания по диссертационной работе

По представленной диссертации Марченко М.А. могут быть сделаны следующие замечания.

1. На стр. 10 озвучено ограничение “При построении вероятностной модели необходимо показать существование математического ожидания $E\zeta$ и дисперсии $D\zeta$ ”. А как быть в случае использования модели распределения Коши (Брейта–Вигнера), появление которого связано именно с физическими задачами? У него математическое распределение не существует, а дисперсия расходится?

2. На стр. 41 отмечено, что принадлежность времени τ первого выхода из области экспоненциальному закону (2.3) было проверено многочисленными экспериментами. Осталось за рамками, как было проверено?

3. В диссертации делается акцент на прецизионном оценивании функцио-

налов, определяемых маловероятными событиями, но никак не обосновывается правомерность использования этого метрологического термина.

4. В тексте диссертации неоднократно упоминаются “функция ценности” и “моделирование по ценности”, но определения этих понятий остались за рамками работы. То же самое можно сказать об используемом в работе “принципе выборки по важности”.

5. При решении задач имитационного моделирования, связанных с исследованием вероятностных закономерностей, распараллеливание вычислительных процессов реализуется достаточно просто, обеспечивая идентичность результатов при распределённых вычислениях с результатами, полученными при моделировании на локальном компьютере. При решении рассматриваемых в диссертации задач трудно спрогнозировать количество требуемых (необходимых) статистических экспериментов на отдельном процессоре. Насколько в таких ситуациях (с использованием разработанных параллельных генераторов псевдослучайных чисел) удастся обеспечить коррелированность результатов при различной степени распределённости вычислений?

6. В диссертации не рассматриваются вопросы робастности решений рассматриваемых задач к тем или иным отклонениям от предполагаемых вероятностных характеристик анализируемых (исследуемых) процессов или/и устойчивости решений к случайным отклонениям значений детерминированных параметров систем уравнений от заданных. А такие перспективы открываются с ростом возможностей МВС.

7. То же самое можно сказать относительно проверки адекватности рассматриваемых вероятностных моделей и решений задач математической физики, полученных методами численного статистического моделирования, данным физических экспериментов.

8. Можно отметить наличие в тексте некоторого числа опечаток, связанных с несогласованностью окончаний или повторами.

Сделанные замечания имеют характер пожеланий или носят редакционный характер, не снижают научной и практической ценности диссертации и не влияют на общую положительную оценку результатов исследований.

7. Заключение о работе

Представленная диссертация является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, в которой на основании выполненных исследований разработаны теоретические положения и предложены новые научно обоснованные подходы к решению важных научных задач, имеющих большую практическую значимость.

Результаты исследований обладают научной новизной и достоверностью, все полученные выводы научно обоснованы.

Основные положения диссертационной работы достаточно полно освещены в научных публикациях автора, прошли апробацию на ряде меж-

