

*24.01.2017 № 4-25/65*

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе  
Университета ИТМО  
д.т.н., профессор

*[Signature]*  
В.О. Никифоров

*12* 2016 г.



### ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертацию Марченко Михаила Александровича «Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений», представленную на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

#### Актуальность темы исследований

Диссертационная работа Марченко Михаила Александровича посвящена развитию актуального для приложений научного направления – параллельным методам численного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц. Большое практическое значение имеет задача разработки методики распределённого численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем и параллельных генераторов псевдослучайных чисел, пригодных для проведения параметрического анализа. Весьма актуальны также вопросы создания пакетов программ для решения поставленных задач и стандартных библиотек для реализации распределённого численного статистического моделирования.

Отметим, что уровень производительности современных суперкомпьютеров делает применение вероятностных моделей кинетических процессов чрезвычайно актуальным, поскольку, с одной стороны, такие модели адекватно описывают физические явления, в частности, позволяют учесть влияние маловероятных событий, что практически невозможно для других подходов; с другой стороны, они могут быть эффективно реализованы в виде параллельных программ.

В различных приложениях (финансы, телекоммуникационные системы, экология и др.) часто применяются вероятностные диффузионные модели, связанные с оценкой функционалов, определяемых маловероятными событиями, состоящими в достижении траекториями диффузионного процесса заданных областей фазового пространства. Такие задачи традиционно сложны для численного анализа, так как методы, основанные на прямом моделировании траекторий, как правило, требуют значительных вычислительных затрат.

Для численного анализа процессов коагуляции в дисперсных системах, например, при образовании атмосферных аэрозолей, пламенном синтезе наноразмерных частиц и др., успешно применяются вероятностные модели, основанные на рассмотрении эволюции многочастичных ансамблей. В целях достижения удовлетворительной погрешности оценок функционалов число частиц в ансамбле предполагается достаточно большим, что влечет необходимость использования хорошо сбалансированных методов распараллеливания. В этой связи возникает задача оценки эффекта от распараллеливания при одновременном увеличении числа процессоров и числа частиц. В настоящее время только начинают ставиться вопросы разработки экономичных численных методов для решения нелинейного уравнения коагуляции с учетом внешнего поля скоростей, зависящего от пространственной переменной и размера (массы) частиц, и пространственно неоднородного ядра коагуляции.

С развитием компьютерной техники возросла потребность в экономичных алгоритмах и параллельных программах, позволяющих учитывать влияние маловероятных событий, эффективно моделировать разные стадии развития пробоя, например, образование высокоэнергетичных (убегающих) электронов. Как правило, число частиц в лавине достаточно, поэтому необходимо разрабатывать и апробировать эффективные технологии распараллеливания.

В приложениях численного статистического моделирования необходимо использовать параллельные генераторы псевдослучайных чисел, эффективно реализуемые на многопроцессорных компьютерах, и применять методологию распределенных вычислений, позволяющую осуществлять параметрический анализ вероятностных моделей (т.е. исследовать их характеристики, такие как погрешность оценки и трудоемкость вычислений, в зависимости от параметров задачи и алгоритма); требуется также наличие стандартных распараллеленных программных инструментов.

### **Соответствие темы диссертации научной специальности**

Содержание диссертации соответствует формуле специальности 05.13.18 «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по отрасли «физико-математические науки» и пунктам 1, 3, 4 областей исследований, а именно:

- пункту 1 «разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений» соответствуют новые вероятностные модели для численного моделирования: а) маловероятных событий на траекториях диффузионных процессов; б) процесса пространственно неоднородной коагуляции; в) процесса развития электронных лавин в газе, а также новая имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах;

- пункту 3 «разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий» соответствуют разработка, обоснование и тестирование с использованием методики распределенного численного статистического моделирования: а) эффективных алгоритмов численного статистического моделирования, основанных на методе расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности для прецизионной оценки ряда функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов; б) экономичного параллельного алгоритма метода прямого статистического моделирования пространственно неоднородной коагуляции, основанного на пространственной регуляризации ядра коагуляции и методе мажорантной частоты; в) эффективного параллельного алгоритма численного статистического моделирования электронных лавин в газе, основанного на использовании ветвящихся случайных процессах; а также создание и апробация: г) новых быстродействующих длиннопериодных параллельных генераторов базовых псевдослучайных чисел и методики

распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающих возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа вероятностных моделей; д) методов имитационного моделирования поведения программ численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах;

- пункту 4 «реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента» соответствуют разработанные новые универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC, MONC для реализации алгоритмов распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, программный комплекс параллельных генераторов псевдослучайных чисел PARGENER-MC, параллельные прикладные программы BOUNDARY-MC, CONCENTRATION-MC, COAGULATION-MC, ELSHOW для решения задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов.

### **Общая характеристика работы**

В диссертации разработаны новые постановки вероятностных моделей диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, нацеленные на параллельную реализацию, предложены методы реализации моделей с помощью распределённых вычислений, пригодные для проведения параметрического анализа.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и трех приложений. Общий объем диссертации – 281 страница. Список литературы включает 312 наименований на 31 странице. Диссертация содержит 36 рисунков, 27 таблиц.

В главе 1 делается обзор методов численного статистического моделирования кинетических процессов, параллельных и распределенных вычислений.

В главе 2 представлены результаты, касающиеся разработки численных методов прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов, таких как вероятность недостижения границы области за заданное время и полная концентрация траекторий в точке за заданное время.

В главе 3 представлены результаты по разработке и исследованию вероятностной модели для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции и реализующего ее экономичного параллельного алгоритма метода прямого статистического моделирования.

В главе 4 приводятся результаты, касающиеся разработки и исследования вероятностной модели для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе и реализующего ее параллельного алгоритма численного статистического моделирования.

В главе 5 описывается распределительный способ получения псевдослучайных чисел для базового длиннопериодного конгруэнтного генератора, приводятся результаты его тестирования. Представлена методика распределенного численного статистического моделирования, пригодная для реализации на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах.

В главе 6 представлены универсальные библиотеки программ PARMONC, PARMONC-PC и MONC для реализации распределенного статистического моделирования на многопроцессорных высокопроизводительных вычислительных системах (грид-системах и кластерах с массивно-параллельной и гибридной архитектурами); параллельная программа AMIKS для численного анализа стохастических осцилляторов.

В Заключении формулируются положения, выносимые на защиту, предлагаются направления дальнейших исследований по материалам и результатам диссертации.

В Приложении 1 приводится описание разработанных параллельных вычислительных программ и библиотек. В Приложении 2 дается описание полученных свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ. В Приложении 3 приводятся копии актов о внедрении научных и практических результатов диссертации, диплома лауреата конкурса прикладных разработок и исследований в области компьютерных технологий.

### **Научная новизна исследований**

В работе разработаны и исследованы новые параллельные алгоритмы и программные средства суперкомпьютерного статистического моделирования кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц, а именно:

- алгоритмы численного статистического моделирования на основе метода расщепления и весового моделирования с использованием приближения к функции ценности для прецизионной оценки функционалов, определяемых маловероятными событиями, на траекториях диффузионных процессов;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса пространственно неоднородной коагуляции, основанная на пространственной регуляризации ядра коагуляции и методе мажорантной частоты, и реализующий ее экономичный параллельный алгоритм;
- вероятностная модель для численного моделирования процесса развития электронных лавин в газе на основе ветвящихся случайных процессов и реализующий ее параллельный алгоритм для вычислительных систем с массивно-параллельной и гибридной архитектурами;
- распределительный способ получения базовых псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования для высокопроизводительных вычислительных систем, обеспечивающие возможность проведения коррелированных расчетов и параметрического анализа реализуемых вероятностных моделей;
- имитационная модель исполнения программ распределенного численного статистического моделирования на многопроцессорных вычислительных системах с учетом их архитектуры;
- универсальные библиотеки PARMONC, PARMONC-PC и MONC для реализации распределенного численного статистического моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах, а также программный комплекс параллельных генераторов PARGENER-MC;
- пакет параллельных прикладных программ BOUNDARY-MC, COAGULATION-MC, CONCENTRATION-MC, ELSHOW и AMIKS для решения задач диффузии, коагуляции, переноса заряженных частиц и численного анализа стохастических осцилляторов.

### **Значимость проведенного исследования для науки и практики**

В диссертации развито новое научное направление - параллельное статистическое моделирование кинетических процессов на современных высокопроизводительных вычислительных системах, в рамках которого разработаны и исследованы теоретически и численно на высокопроизводительных вычислительных системах.

Разработанные вероятностные модели и параллельные алгоритмы могут служить теоретической базой при решении практических задач диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц; созданные библиотеки и программы также могут быть использованы в этих целях.

Предложенная имитационная модель исполнения программ распределённого численного статистического моделирования может применяться для оценки масштабируемости прикладных программ и настройки необходимых параметров параллельных расчётов на современных вычислительных системах.

У автора имеются акты о внедрении научных и практических результатов диссертации, в частности, библиотека PARMONC внедрена в Центре коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» СО РАН.

Отметим, что имеются свидетельства на авторские программы на ЭВМ, зарегистрированные в установленном порядке.

### **Форма изложения материала, публикации, апробация**

Диссертационная работа Марченко Михаила Александровича выполнена с соблюдением основных рекомендаций, установленных ВАК при Минобрнауки России. Приведенный в диссертации библиографический список полно характеризует выбранное автором научное направление.

Результаты работы достаточно полно отражены в 63 научных публикациях, в том числе в 19 статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России. Автором также получено 9 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Результаты работы прошли апробацию и обсуждение на достаточном числе международных и всероссийских конференций и научных семинаров.

Текст диссертации написан грамотным научным языком и сопровождается качественным иллюстративным материалом.

Автореферат адекватно и полно отражает текст диссертации.

### **Недостатки, замечания и рекомендации к диссертационной работе**

1) Приведенные рекомендации по реализации алгоритма метода ПСМ в грид-системе являются неполными, поскольку учитывают только пропускную способность коммуникационных каналов и не учитывают принципиальное свойство грид-систем - стохастическую латентность вычислительных узлов, связанную со спецификой работы промежуточного программного обеспечения, стр. 84-85. Диссертантом не указано, для каких видов грид-систем достаточно ограничиться критерием в форме (3.29), а для каких характеристики латентности начинают играть определяющую роль.

2) Несмотря на то, что в диссертации анонсируется потребность в экзафлопсных вычислителях для реализации задач статистического моделирования в общем случае, методика, рассмотренная в 5.3, не является в полной мере масштабируемой, поскольку ориентирована на сборку результатов только на один центральный процессор. В разделе 5.5 рассматривается решение этой проблемы за счет иерархии процессоров-сборщиков, однако отсутствует количественный критерий оценки преимущества одной схемы перед другой, что делает невозможным осуществление данного выбора на уровне методики.

3) Выводы к главе 6 декларируют возможность использования разработанных программных библиотек как для современных, так и для перспективных суперкомпьютеров. Данное заключение представляется сомнительным, поскольку переход к экзафлопсным компьютерам в перспективе приведет к смене не только самой аппаратной платформы, но и переходу на новые технологии параллельных вычислений, обеспечивающих соответствующий уровень отказоустойчивости (и MPI к ним не относится). В явном виде в диссертации отсутствуют указания, для каких классов суперкомпьютерных систем в перспективе это утверждение является верным.

4) Таблицы и рисунки в диссертации оформлены с нарушением требований рекомендованного ГОСТ Р 7.0.11-2011.


## Заключение

Диссертация Марченко Михаила Александровича «Численное статистическое моделирование кинетических процессов диффузии, коагуляции и переноса заряженных частиц с использованием распределённых вычислений» представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, является самостоятельной квалификационной научной работой, раскрывающей сформулированную автором цель исследования. В диссертации получен ряд научных положений, совокупность которых можно квалифицировать как вклад в выбранное научное направление. Работа содержит научно обоснованные алгоритмические и программные решения, внедрение которых в виде программного обеспечения способно внести значительный вклад в теорию и практику математического моделирования кинетических процессов в практически важных приложениях. Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, и свидетельствует о личном вкладе автора в науку. Диссертация имеет научную и практическую значимость, в ней содержатся рекомендации по практическому использованию научных выводов.

На основании изложенного можно сделать вывод, что представленная диссертация является законченным научным исследованием и удовлетворяет п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842. Диссертация Марченко Михаила Александровича отвечает требованиям, предъявляемым ВАК при Минобрнауки России к докторским диссертациям, а автор диссертации заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 - «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Диссертационная работа Марченко Михаила Александровича и отзыв на неё обсуждены и одобрены на заседании Кафедры высокопроизводительных вычислений Факультета информационных технологий и программирования Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики», которое состоялось 29 ноября 2016 г., протокол № 13. Отзыв составил заведующий кафедрой д.т.н. Бухановский Александр Валерьевич.

Председатель семинара,  
заведующий кафедрой  
высокопроизводительных вычислений,  
д.т.н.,  
05.11.16 - Информационно-  
измерительные и управляющие системы  
(по отраслям)

 А.В. Бухановский

Секретарь семинара,  
доцент, к.т.н.,  
05.13.18 - Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

 С.В. Иванов