

Prof. dr hab. inż. Jacek Kitowski
Katedra Informatyki
Akademia Górniczo-Hutnicza
Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
kito@agh.edu.pl

Kraków, 25 maja 2017

**Recenzja rozprawy doktorskiej
pana mgra inż. Kazimierza Michalika, pt.
„Zarządzanie rozproszoną siatką obliczeniową w
równoległych symulacjach adaptacyjną metodą elementów
skończonych”**

Promotor: dr hab. inż. Krzysztof Banaś, prof. AGH

Niniejsza recenzja przygotowana została na zlecenie Sekretarza Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN, Pana Dra hab. inż. Zbigniewa Ranachowskiego, prof. IPPT PAN (pismo z dnia 7 kwietnia 2017), działającego na podstawie uchwały Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN z dnia 30 marca 2017.

I. Ocena wyboru tematu i tez rozprawy

Najbardziej interesujący kierunek badań w okresie ostatnich kilkunastu lat stanowią badania interdyscyplinarne, ulokowane na pograniczu kilku dziedzin naukowych. Rozwijając się gwałtownie stanowią niezwykle istotny wkład do coraz szerszych i ważnych zastosowań, istotnych ze względów ekonomicznych i społecznych. Jednym z podstawowych paradygmatów badawczych jest symulacja z wykorzystaniem obliczeń równoległych, a ostatnio zwłaszcza rozproszonych. Rozwój w tym zakresie problemowym informatyki stymulowany jest wielkim zapotrzebowaniem na zróżnicowane usługi w zakresie przetwarzania, przechowywania, przesyłania, dostępu do informacji i jej interpretacji.

Wynika to z licznych potencjalnych zalet takiego modelu przetwarzania, spośród których do najważniejszych zaliczyć można dużą zagregowaną moc obliczeniową, wysoką efektywność wykorzystania zróżnicowanych zasobów i niezawodność związaną z możliwością użycia zasobów zastępczych, korzystny wskaźnik wydajności do ceny, elastyczność w zakresie implementacji nowych rodzajów usług oraz modułarną budowę. Obecny rozwój różnorodnych

środowisk i usług gridowych, a tym bardziej chmurowych (obliczeniowych, wizualizacyjnych, archiwizacyjnych) stanowi naturalne następstwo rozwoju obliczeń równoległych bądź rozproszonych.

Do cech utrudniających wykorzystanie przetwarzania rozproszonego zaliczyć można stosunkowo ciągle jeszcze niewielką szybkość transmisji danych między elementami infrastruktury, trudną do minimalizacji i kosztowną w praktyce. Mimo to rozwój w zakresie współczesnych architektur komputerowych, równoległych i rozproszonych, skutkuje instalacjami o wielu setkach lub tysiącach procesorów, o rozbudowanej, hierarchicznej warstwie komunikacyjnej o wielu poziomach i zróżnicowanych modelach programowania powodując w praktyce kłopoty implementacyjne.

Dynamika rozwoju optymalizowanych algorytmów przeznaczonych na nowoczesne architektury komputerowe o wielu procesorach jest zdecydowanie mniejsza. Wynika to, jak się wydaje, po części z trudności związanych z interdyscyplinarnym charakterem tego typu badań, po części zaś z pewnego pozytywnego konserwatyzmu związanego z wykorzystywaniem opracowanych wcześniej i wnikliwie przetestowanych pakietów programowych.

Z drugiej strony, potrzeba realizacji nowych, nietypowych usług wymusza konieczność tworzenia pakietów o zróżnicowanej, heterogenicznej strukturze, w których poszczególne jednostki obliczeniowe o odmiennym charakterze, przeznaczeniu i modelu obliczeniowym będą efektywnie koordynowane. Charakterystyczną cechą tego rozwoju jest silnie zaznaczająca się tendencja do szerokiego wykorzystania środków i narzędzi informatyki, jako głównej metodyki badań, znanymi występującym w niej niezbędnym związkiem synergicznym między problemem, algorytmem numerycznym i środkami informatyki służącym potrzebom implementacji (w skład których wchodzi modele obliczeniowe, język programowania i architektura systemu komputerowego).

Użytkownik klastra stacji roboczych lub komputera wieloprocessorowego staje przed trudnym problemem wyboru odpowiedniego algorytmu numerycznego i modelu obliczeniowego, metod dekompozycji oraz stosowania zaawansowanych technik i narzędzi przetwarzania rozproszonego. Kryteria wyboru powinny uwzględniać tak zróżnicowane zagadnienia jak: specyfikę problemu obliczeniowego, cechy charakterystyczne architektury komputerowej oraz optymalizację algorytmu pod kątem wybranej architektury. Cechy te sprawiają, że wymagana jest szeroka wiedza i doświadczenie w wielu dziedzinach, których tematyka dotyczy.

Mechanika obliczeniowa, która stanowi obszar zastosowań algorytmów opracowanych w rozprawie, jest tematyką intensywnie rozwijaną od wielu lat. Jest to bardzo bogata dyscyplina, o dużym znaczeniu poznawczym i aplikacyjnym, jak również obszernej literaturze przedmiotu. Wiele elementów mechaniki obliczeniowej stanowi oddzielne zagadnienia badawcze, nad którymi pracują niezależnie duże grupy w świecie. Do typowych samodzielnych problemów badawczych zaliczyć można: zagadnienia modelowania matematycznego zjawisk mechanicznych, badania podstawowe w zakresie metody elementów skończonych (MES) i brzegowych, metody generacji, adaptacji i modyfikacji siatek obliczeniowych, metody i algorytmy rozwiązywania bardzo dużych układów równań z macierzami rzadkimi i wiele innych.

W nakreślonym powyżej zakresie problemowym korzystnie lokuje się recenzowana rozprawa pana mgr inż. Kazimierza Michalika. Jest ona poświęcona (ogólnie) zagadnieniu zarządzania siatką obliczeniową, a bardziej szczegółowo identyfikacji elementów zarządzania rozproszoną siatką obliczeniową oraz ich wpływu na realizację obliczeń z wykorzystaniem

architektur wieloprocesorowych i rozproszonych. Do istotnego dorobku należy też opracowanie nowych rozwiązań w zakresie wybranych problemów zarządzania.

Zatem, kierunek badań, wybór problematyki rozprawy oraz jej celów zaproponowany i zrealizowany przez p. mgra inż. Kazimierza Michalika oceniam zdecydowanie pozytywnie.

II. Ocena zawartości rozprawy

Przedstawiona do recenzji rozprawa liczy 139 stron tekstu i składa się z 9 rozdziałów, spisu 127 pozycji bibliograficznych (uszeregowanych alfabetycznie) oraz spisu rysunków i tabel. Całość zredagowana jest starannie pod względem edytorskim, z dbałością o przejrzystość zapisu i szatę graficzną. Dołączone zostały streszczenia w języku polskim i angielskim.

We wprowadzającym Rozdziale 1 przedstawiono szeroko problematykę współczesnych komputerów i środowisk programistycznych odpowiednich dla realizacji badań w obszarze nauk obliczeniowych oraz stan badań w zakresie zarządzania adaptacyjną siatką obliczeniową. Na tym tle sformułowano trafnie cele i zakres pracy. Do celów Autor zaliczył definicję procesu zarządzania rozproszoną siatką obliczeniową, identyfikację elementów zarządzania o największym wpływie na realizację modelowania numerycznego oraz zaproponowanie nowych rozwiązań wybranych elementów. Zwrócono (i słusznie) uwagę na zagadnienie dostępności danych dla poszczególnych strumieni instrukcji, który to problem staje się coraz ważniejszy w obliczeniach wykorzystujących wiele elementów przetwarzających. Ponadto, na podkreślenie zasługuje dojrzałość stwierdzeń, przejawiająca się, między innymi, zwróceniem uwagi na konieczność synergicznego podejścia biorącego pod uwagę problem obliczeniowy, algorytm wraz z implementacją wynikającą z wyboru paradygmatu obliczeniowego oraz zależność od architektury docelowego systemu obliczeniowego. Rozdział świadczy o dobrym rozeznaniu Autora we współczesnej problematyce obliczeń, w tym w zakresie mechaniki obliczeniowej.

Kolejne rozdziały, Rozdział 2 i 3 poświęcone są zagadnieniom adaptacji w metodzie elementów skończonych, ze szczególnym uwzględnieniem oszacowań błędu rozwiązania oraz rodzajom elementów skończonych wraz z problemem adaptacji siatki obliczeniowej z szerszym uwzględnieniem H-adaptacji istotnej dla dalszych wywodów. Omówiono szeroko modele reprezentacji siatki obliczeniowej, zwracając uwagę na cechy decydujące o przydatności struktury siatki w obliczeniach, wyróżniając złożoność pamięciową i złożoność obliczeniową. Wprowadzono model złożoności obliczeniowej uwzględniający struktury danych i koszt operacji na elementach tych struktur oraz model zapotrzebowania na pamięć. Oba modele rozwinięte są następnie w Rozdziale 4. Omówiono pełne i zredukowane reprezentacje siatki. Rozdział trzeci kończy przedstawienie dwóch algorytmów adaptacji siatki, pierwszego – dotyczącego podziału elementu i drugiego – aglomeracyjnego (nazywanego de-adaptacyjnym), polegającego na łączeniu mniejszych elementów w jeden większy. Rozdziały 2 i 3, mimo dość ogólnego charakteru, stanowią istotny element rozprawy, dobrze wprowadzający do kolejnych, podstawowych jej treści.

Formalne postawienie problemu stanowi Rozdział 4, wykorzystujący rozważania i definicje wprowadzone we poprzednich rozdziałach. Jest to podstawowy rozdział o charakterze teoretycznym, wprowadzający operatory łączności topologicznej wraz z koniecznymi rozszerzeniami wynikającymi z wykorzystania architektury rozproszonych. Przedstawiono

teoretyczne podejście do wcześniej zdefiniowanych modeli złożoności obliczeniowej i pamięciowej, wykorzystujące zdefiniowane formalnie operatory zarządzania siatką obliczeniową. Podsumowując Rozdział 4 stwierdzić należy, że reprezentuje on cenny formalizm w zakresie zarządzania siatką obliczeniową pozwalający na formalne określenie zapotrzebowania na wydajność obliczeniową i pamięć operacyjną.

Kolejne rozdziały rozprawy poświęcone są zagadnieniom implementacyjnym, ze szczególnym uwzględnieniem odwzorowania na architekturę docelowego systemu obliczeniowego. W Rozdziale 5 omówiono trudności i wymagania stawiane przed implementacją korzystającą z rozszerzonego zbioru instrukcji (AVX) procesora typu Core i7. Przedstawiono modyfikację algorytmu wykonaną na podstawie własnych testów, przy zastosowaniu znanych wymagań dotyczących tworzenia algorytmów przeznaczonych na architektury wektorowe (długie pętle bez zależności między danymi, eliminacja instrukcji warunkowych, wprowadzenie pomocniczych struktur celem eliminacji indeksacji pośredniej). Ciekawym pomysłem jest wprowadzenie tablic decyzyjnych podnoszących udział obliczeń realizowanych w trybie wektorowym.

Kolejny – Rozdział 6 – odnosi się do zbadania możliwości realizacji obliczeń w trybie wielowątkowym, poprzedzonych etapem profilowania obliczeń dla trzech przypadków użycia. Na podstawie syntetycznych testów z wykorzystaniem własnej aplikacji sformułowano wnioski dotyczące podstawowego znaczenia struktur danych, które w obliczeniach wielowątkowych powinny być podobne do stosowanych w obliczeniach wektorowych. Wniosek ten potwierdza dane literaturowe. Ciekawym postulatem wyływającym z analizy wyników jest możliwość rezygnacji z synchronizacji obliczeń przy spełnieniu warunku wynikającego z odpowiedniej granulacji obliczeń. Wniosek ten, sformułowany przez analogię do systemów rozproszonych, w których czasem stosuje się tzw. weak (eventual) consistency, godny jest przeprowadzenia szerszych badań. Kolejnym nowatorskim pomysłem jest zaproponowanie oryginalnego algorytmu kompresji współrzędnych geometrycznych siatki i ich reprezentacji całkowitoliczbowej. Udowodniono korzystne własności tak pod względem pamięciowym jak i wydajnościowym proponowanej transformacji, porównano z rozwiązaniami znanymi z literatury (w postaci krzywych Z implementowanych w postaci kodu Mortona) oraz przedyskutowano wady i ograniczenia. Zawartość Rozdziału 6 stanowi kolejny istotny wkład w rozwój dziedziny, w której ulokowana jest rozprawa.

W Rozdziale 7 zawarto zagadnienia identyfikowalności obiektów w przetwarzaniu rozproszonym dla potrzeb unikania synchronizacji na poziomie globalnym bądź lokalnym. Przedyskutowano kilka rozwiązań, z których wybrano identyfikację wykorzystującą podejście wcześniej użyte do algorytmu kompresji współrzędnych siatki, ze wskazaniem na zalety i wady takiego rozwiązania. W dalszym ciągu rozdziału dokonano analizy skalowalności przy realizacji obliczeń z użyciem rozszerzonego przez Autora programu ModFEM w modelu z wymianą komunikatów (MPI) przy ustalonym rozmiarze problemu, uzyskując dla dużej liczby procesorów (1024) przyspieszenie superliniowe. Wyniki są interesujące i dobrze przedyskutowane.

Ostatni rozdział rozprawy – Rozdział 8 – ukazuje krótko praktyczne zastosowania systemu ModFEM, w których brał udział Autor. Do najbardziej interesujących, zdaniem recenzenta, należy modelowanie polskiego sztucznego serca (czy stosowano opis Cassona?) oraz modelowanie jeziorka spawalniczego. Pokazują one znaczenie prac w zakresie modelowania komputerowego, a w szczególności tematyki recenzowanej rozprawy.

Pracę kończy Podsumowanie, w którym ujęto najważniejsze nowatorskie elementy rozprawy wraz ze wskazaniem kierunków dalszych badań.

Podsumowując stwierdzam, że recenzowana rozprawa p. mgra inż. Kazimierza Michalika wnosi istotny wkład o charakterze zarówno teoretycznym, jak i praktycznym do zarządzania rozproszoną siatką obliczeniową w obliczeniach równoległych metodą elementów skończonych, a w konsekwencji także do zagadnień mechaniki obliczeniowej. Rozprawa jest dobrze ułożona w obszarze intensywnych badań prowadzonych na świecie w zakresie złożonych zjawisk i systemów.

III. Zasadnicze osiągnięcia Autora rozprawy

Rozprawa doktorska p. mgra inż. Kazimierza Michalika zawiera wiele wartościowych koncepcji, z których część przedyskutowano powyżej, dokonano ich implementacji oraz uzyskano wartościowe wyniki, wzbogacające wiedzę w tym obszarze. Podkreślić należy wysoki poziom erudycji Autora, a przede wszystkim jego bardzo dobry warsztat naukowy pozwalający na zaawansowany teoretyczny sposób przedstawienia problematyki i rozwiązań szczegółowych, świadczący o dobrym przygotowaniu Autora do prowadzenia badań naukowych.

Do najważniejszych osiągnięć Autora rozprawy zaliczyć należy następujące elementy:

- Formalny model zarządzania adaptacyjną siatką obliczeniową zdefiniowany jako zbiór operatorów siatki.
- Zdefiniowanie operatorów dla siatki adaptacyjnej oraz opracowanie algorytmów i implementacji zarządzania rozproszoną siatką adaptacyjną.
- Opracowanie algorytmu zapisu i kompresji współrzędnych siatki obliczeniowej z wykorzystaniem transformacji do przestrzeni liczb całkowitych, wraz z uzasadnieniem dotyczącym złożoności pamięciowej i obliczeniowej.
- Opracowanie metody jednoznacznej identyfikacji obiektów w modelu obliczeń równoległych z pamięcią rozproszoną dla niezależnej adaptacji siatki na każdym węźle obliczeniowym, minimalizującej problem globalnej synchronizacji.
- Eliminacja niekorzystnego efektu wynikającego z instrukcji warunkowych w przypadku wektoryzacji poprzez wprowadzenie tablic decyzyjnych.
- Postulat dotyczący możliwości rezygnacji ze ścisłej synchronizacji obliczeń przy spełnieniu pewnych warunków dotyczących granulacji procesów, z zyskiem dla wydajności obliczeń.

Wymienione osiągnięcia są oryginalne i znaczące, na nich więc opieram *ogólnie pozytywną ocenę pracy*. Stanowią one odpowiedź na postawione problemy badawcze i wspierają rozwój badań w zakresie e-Science. Dobrze wpisują się w aktualne trendy prac naukowych realizowanych w świecie. Ponownie należy podkreślić wysoki poziom teoretyczny prezentowanych badań, dobrze świadczący o dojrzałości Autora i jego przygotowaniu do pracy naukowej.

IV. Uwagi dyskusyjne i krytyczne

Oprócz niewątpliwych walorów, rozprawa zawiera pewną liczbę elementów, które mogą być przedmiotem dyskusji. Wydaje się celowe podanie następujących spostrzeżeń:

- Tok wykładu rozprawy mogłoby zyskać na zwartości gdyby w tym celu wykorzystać model PCAM Iana Fostera (Ian Foster, *Designing and Building Parallel Programs*, Addison-Wesley, 1995, również dostępny on-line).
- Czy powodem przyspieszenia superliniowego (Rys. 7.8, str. 114) jest tylko wzrost lokalności komunikacji? Czy nie może tu wystąpić efekt pamięci podręcznej (umieszczenia danych tylko w cache)?
- Stwierdzenie na str.12: „Ponadto, ze względu na brak rdzennego, rzetelnego wsparcia wbudowanego w języki programowania, zagadnienie przenoszenia implementacji na modele równoległe i rozproszone wymaga ręcznego rozwiązywania bardzo wielu kwestii technicznych i algorytmicznych.” nie jest prawdziwe w ogólności, gdyż wymienić można co najmniej kilka języków, które takie wsparcie oferują, jak np. Julia, Elixir, pFortran, pC (w modelu PGAS).
- Zagadnienia wektoryzacji powinny być przedstawione niezależnie od docelowej implementacji. W rozprawie odnosi się wrażenie, że wektoryzacja związana jest z realizacją instrukcji AVX, podczas gdy jest ona eksploatowana od ca. 30 lat i ciągle budowane są komputery wektorowe.
- Korzystnie byłoby szerzej przedyskutować „problem skali” dla zagadnienia obliczeniowego w kontekście zaniedbania synchronizacji obliczeń oraz zaproponowanej kompresji współrzędnych. Jakie warunki powinny być spełnione, aby z tych podejść można byłoby bezpiecznie korzystać?
- Pozostałe, drobne uwagi dotyczą:
 - uporządkowania listy dotyczącej pojęć charakterystycznych dla opisu siatki (str. 37),
 - użycie pojęcia „kontener” (str. 40), co mogłoby sugerować stosowanie „Docker technology”,
 - zaliczenia bez komentarza modelu wykorzystującego przetwarzanie sekwencyjne dla pamięci wspólnej do kategorii równoległości w modelu pamięci wspólnej (punkt 1.4.4, str. 21),
 - słabej skalowalności dotyczącej zagadnień o wzrastającej wielkości problemu obliczeniowego (a nie złożoności, jak wspomniano na str. 66),
 - planów dalszej pracy (umieszczonych w Podsumowaniu) odnoszących się do implementacji na GPGPU – czy nie lepiej/łatwiej jest wykorzystać Knights Landing, Knights Hill i następców?

Należy wyraźnie zaznaczyć, że podane uwagi nie kwestionują słuszności przyjętych koncepcji ani też nie wpływają w sposób istotny na poznawcze i utylitarne wartości zrealizowanych badań.

Ich uwzględnienie może okazać się korzystne w dalszej działalności naukowej dotyczącej zbliżonych zagadnień.

V. Wniosek końcowy

Wspomniane w recenzji uwagi polemiczne nie umniejszają zasług Autora ani nie kwestionują jego osiągnięć. W przedstawianej rozprawie postawiono ważny współcześnie problem i zaproponowano jego rozwiązanie w sposób świadczący o biegłości teoretycznej Autora rozprawy i jego dojrzałości naukowej. Stanowi ono odpowiedź na postawione problemy badawcze i wnosi istotny wkład w rozwój symulacyjnych obliczeń rozproszonych dużej skali. Podstawowe cele i zadania pracy zostały zrealizowane. Tematyka dobrze wpisuje się we współczesny nurt badań w tym zakresie.

Stwierdzam zatem z przekonaniem, że opiniowana rozprawa Pana mgra inż. Kazimierza Michalika spełnia wszystkie wymagania przewidziane dla rozpraw doktorskich w aktualnie obowiązującej Ustawie o Tytule Naukowym i Stopniach Naukowych i stawiam wniosek o dopuszczenie jej Autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

