ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Рыбакова Алексея Анатольевича
«Методы и средства повышения производительности программ для моделирования объектов со сложной геометрией»,
представленную на соискание ученой степени доктора технических наук по специальности 2.3.5 – Математическое и программное обеспечение вычислительных систем, комплексов и компьютерных сетей

1. Актуальность темы исследований

В современных условиях компьютерное моделирование физических процессов в трёхмерном пространстве относится к наиболее ресурсоёмким научно-техническим задачам, связанным с высокопроизводительными вычислениями. Развитие отечественного суперкомпьютерного моделирования является одним из приоритетов научно-технологического развития Российской Федерации и соответствует национальным целям обеспечения технологического лидерства в области передовых технологий проектирования высокотехнологичной продукции.

Численное моделирование объектов со сложной геометрией в таких областях науки, как газовая динамика, обледенение летательных аппаратов, мультифизические процессы требует колоссальных вычислительных ресурсов. В условиях импортозамещения существующие зарубежные программные пакеты (ANSYS, Star-CCM+, FlowVision) требуют адекватной замены. Поэтому исключительно важно создать отечественные аналоги, использующие, в частности, актуальные подходы к построению расчетных пространственных сеток и современные параллельные архитектуры, включая векторные инструкции.

Общая эффективность использования суперкомпьютерных систем очевидным образом зависит от эффективности применения вычислительных ресурсов на всех уровнях распараллеливания: на распределённой памяти, на

общей памяти и на уровне отдельных инструкций. Постоянное усложнение архитектуры суперкомпьютеров, применение новейших технических решений, увеличение числа процессорных узлов и ядер обуславливают актуальность развития существующих и создания новых методов и средств повышения производительности программ для моделирования объектов со сложной геометрией.

При этом важно не только достигнуть эффективного распределения вычислительной работы по имеющимся ресурсам, но и обеспечить надёжность параллельных вычислений, поскольку возникновение дефектов расчётной сетки (самопересечений, острых пиков и впадин) ведёт как к снижению точности вычислений, так и к аварийным завершениям расчётов и необходимости осуществлять повторный запуск задачи, что существенно снижает общую эффективность математического моделирования.

Необходимость сохранения компетенций и научно-технологического паритета в области суперкомпьютерного моделирования обуславливает актуальность исследований и разработок по созданию отечественных программных комплексов, обладающих набором функциональных возможностей, соответствующим сложившимся в мировой практике стандартам к точности и надёжности вычислений.

2. Цели работы, методы

В работе чётко определены цели, объект и предмет исследования.

Цель диссертационной работы состоит в разработке комплекса математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией на современных параллельных вычислительных системах. Объектом исследования являются параллельные вычислительные системы, а предметом – методы и средства повышения производительности программ при моделировании объектов со сложной геометрией на объёмных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках.

Для достижения поставленной цели ставятся следующие задачи:

1) разработка архитектуры и состава программного комплекса, реализующего математические методы и алгоритмы для моделирования объектов со сложной геометрией с использованием высокопроизводительных вычислительных систем;

2) разработка методов перестроения и коррекции поверхностной неструктурированной сетки, описывающей границы расчетных подобластей для увеличения моделируемого физического времени;

3) разработка решений по повышению производительности параллельных вычислений на объёмных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках;

4) разработка решения по повышению производительности параллельных вычислений на объемных блочно-структурированных и поверхностных неструктурированных сетках, проводимых при расчетах в подобластях со сложной геометрией и на их границах;

5) разработка методов векторизации программного кода для повышения производительности вычислений на современных параллельных вычислительных системах, применимых к широкому классу приложений.

Результаты диссертации были получены с привлечением моделей и методов вычислительной геометрии, теории графов, теории алгоритмов, теории комбинаторной оптимизации, теории эквивалентных преобразований программ. Для анализа и обоснования эффективности алгоритмов использовались модельные объекты, метод статистических испытаний и вычислительные эксперименты на суперкомпьютерных системах различных архитектур.

3. Научная новизна исследований и полученных результатов

Автор глубоко проанализировал вопросы организации высокопроизводительных вычислений при моделировании объектов со сложной

геометрией и жизненный цикл расчётной сетки в задачах с эволюционирующей геометрией. Проведённый анализ позволил автору разработать и протестировать ряд оригинальных методов перестроения сетки, алгоритмов распараллеливания и подходов к векторизации вычислений.

Автор диссертации получил следующие новые научные результаты:

1. Разработан и реализован в программных кодах комплекс математических методов и алгоритмов для повышения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией, объединяющий решения по перестроению и коррекции поверхностной неструктурированной сетки, а также по распараллеливанию вычислений на объёмных и поверхностных сетках,

2. Разработан метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки, основанный на поиске пересечения траектории смещения узла с границей окрестности инцидентных узлу ячеек и обладающий способностью сглаживания локальных дефектов (пиков и впадин) для предотвращения их накопления.

3. Разработан метод удаления самопересечений поверхностной неструктурированной сетки с треугольными ячейками, основанный на обходе её внешней поверхности, которая определяется направлениями внешних нормалей ячеек, с использованием рациональных координат для исключения ошибок плавающей точки.

4. Разработан трёхмерный метод погруженной границы с фиктивными ячейками, являющийся обобщением двумерного случая и основанный на аппроксимации физических величин в фиктивной ячейке по трём точкам пространства и направлению нормали в точке на границе.

5. Разработаны архитектура объёмной блочно-структурированной сетки с поддержкой дробления блоков и параметрический алгоритм распределения блоков сетки по вычислительным процессам с уменьшением количества дроблений, позволяющие преодолеть проблему дисбаланса из-за наличия крупных блоков.

6. Разработан метод сглаживания границ между доменами декомпозированной поверхностной неструктурированной сетки на основе динамического программирования, позволяющий из множества локальных шаблонов сглаживания выбрать подмножество, обеспечивающее максимальное сокращение длины границы при заданном изменении баланса ячеек.

7. Введено понятие плоского цикла с рядом ограничений на его структуру как удобного программного контекста для векторизации вычислений, разработаны методы векторизации плоских циклов с телом произвольного вида с использованием предикатных масок AVX-512.

8. Разработана методика повышения производительности программ путём представления вычислений в виде плоских циклов, обеспечивающая возможность объединения нескольких экземпляров подпрограммы для решения на одном процессорном ядре.

Считаю, что все полученные автором результаты важны с теоретической и практической точек зрения, обладают новизной, при этом она хорошо обоснована, апробирована в публикациях и выступлениях на конференциях, и все результаты признаны научным сообществом.

4. Достоверность и обоснованность полученных результатов

Теоретическая значимость работы заключается в разработке математических методов увеличения производительности вычислений при моделировании объектов со сложной геометрией на параллельных вычислительных системах. Метод окрестностей перестроения вносит теоретический вклад в вычислительную геометрию, алгоритмы распределения блоков — в решение задачи выбора наилучшего разбиения, алгоритм сглаживания границ — в задачу декомпозиции графов, а методы векторизации — в теорию эквивалентных преобразований программ.

Достоверность полученных результатов подтверждается реализацией разработанных решений в составе программного комплекса «Кристалл»,

программ «GridMaster» и «crys-gsu», а также положительным опытом их практического применения для моделирования обледенения элементов авиационных силовых установок, газодинамических процессов в элементах силовых установок летательных аппаратов, несущего и рулевого винта вертолёта.

Эффективность предложенных автором методов и средств подтверждается результатами вычислительных экспериментов на суперкомпьютерных системах различных архитектур Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и НИЦ «Курчатовский институт» (включая сегменты МВС-10П МП2 на базе Intel Xeon Phi 7290 KNL и МВС-10П ОП2 на базе Intel Xeon Gold 6248R), данными статистики увеличения моделируемого физического времени при использовании метода окрестностей, а также результатами масштабирования вычислений.

Основные результаты диссертационного исследования докладывались на многих представительных конференциях, симпозиумах и семинарах, включая Национальный суперкомпьютерный форум (НСКФ-2016, 2018, 2021), конференцию CFD Weekend (2022, 2023, 2025), ICAM-2025 и международные научные конференции.

5. Личный вклад диссертанта

В основных публикациях по теме диссертации автору принадлежат:

1) метод окрестностей перестроения поверхностной неструктурированной сетки в двумерной и трёхмерной постановках, аналитические оценки точности и эффективности сглаживания дефектов;

2) метод удаления самопересечений поверхностной сетки на основе обхода внешней поверхности с использованием рациональных координат и BVH-деревьев;

3) трёхмерный метод погруженной границы с фиктивными ячейками и методика сопряжения поверхностной и объёмной декартовой сеток;

4) архитектура блочно-структурированной сетки с поддержкой дробления блоков, интерфейсов касания, граничных и начальных условий, а также механизм межпроцессного обмена;

5) жадный и параметрический алгоритмы распределения блоков сетки по вычислительным процессам с использованием дробления, а также методики вычислительных экспериментов по исследованию их характеристик;

6) метод сглаживания границ между доменами поверхностной неструктурированной сетки на основе динамического программирования и методика экспериментального сравнения алгоритмов декомпозиции;

7) понятие плоского цикла, методы векторизации плоских циклов с телом произвольного вида, методика выноса маловероятных регионов, слияния путей исполнения и объединения векторных масок;

8) методика векторизации вычислений путём представления расчётов в виде плоских циклов и методика экспериментального сравнения производительности векторизованного кода на различных микропроцессорных архитектурах.

Все выносимые на защиту научные положения получены соискателем лично. Из совместных исследований в диссертацию включены только те результаты, которые принадлежат непосредственно автору.

6. Практическая ценность основных положений диссертации

Практическая значимость диссертации определяется тем, что разработанный и реализованный комплекс решений по повышению производительности программ для моделирования объектов со сложной геометрией в течение ряда лет обеспечивает проведение высокопроизводительных расчётов в интересах создания новых образцов авиационной техники.

Разработанные методы и алгоритмы реализованы в программных системах компьютерного моделирования физических процессов и обработки расчётных сеток: программном комплексе «Кристалл» моделирования процесса обледенения элементов авиационных силовых установок, программе «crys-gsu» подготовки неструктурированной поверхностной расчётной сетки, программе «GridMaster» подготовки блочно-структурированной расчётной сетки. На разработанные программные средства получено 8 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Теоретические положения и накопленный практический опыт, представленные в диссертации, могут служить основой дальнейшего развития методов и средств построения программ суперкомпьютерного моделирования и организации параллельных вычислений.

Основные результаты, выводы и рекомендации, изложенные в диссертации, получены и использовались при проведении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в ряде организаций: Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт», Федеральном автономном учреждении «Центральный институт авиационного моторостроения имени П.И. Баранова», Акционерном обществе «Национальный центр вертолетостроения имени М.Л. Миля и Н.И. Камова», что подтверждено актами внедрения.

7. Рекомендации по возможности использования результатов и выводов диссертации

Автор отмечает, что успешная эксплуатация разработанного программного комплекса «Кристалл» и сопутствующих программных средств позволяет говорить о сформировавшейся на их основе цифровой экосистеме для моделирования объектов со сложной геометрией в интересах авиационной промышленности.

В силу практической важности результатов работы, целесообразно на их основе продолжить развитие открытой методической базы по векторизации вычислений с использованием набора инструкций AVX-512. Предложенная

автором методика представления вычислений в виде плоских циклов может быть положена в основу учебных курсов по высокопроизводительным вычислениям и использована при подготовке специалистов в области математического и программного обеспечения вычислительных систем.

Также представляется целесообразным распространение разработанных методов декомпозиции и сглаживания границ между доменами на объёмный случай и на задачи с адаптивными расчётными сетками, что может стать направлением дальнейших исследований.

8. Замечания и вопросы по диссертационной работе

1) Во введении и в разделе 1.5 автор справедливо отмечает важность поддержки различных микропроцессорных архитектур, включая отечественные, например, «Эльбрус» и ARM-совместимые, в контексте задач импортозамещения. Однако все представленные в работе вычислительные эксперименты по оценке эффективности векторизации и масштабирования (главы 3, 4, 5) проведены исключительно на микропроцессорах архитектуры Intel (а именно, Intel Xeon Phi KNL и Intel Xeon Gold Cascade Lake). На наш взгляд, отсутствие тестов производительности предложенных методов (особенно методики «плоских циклов») на отечественных или альтернативных архитектурах несколько снижает полноту оценки универсальности разработанных средств.

2) В первой главе (раздел 1.6) автор подробно и обоснованно рассматривает современные тенденции применения искусственного интеллекта (в частности, графовых нейронных сетей и LLM) для задач генерации и коррекции расчетных сеток. Однако в предлагаемых автором новых методах и алгоритмах (главы 2-5) методы машинного обучения фактически не используются, а опираются исключительно на классические подходы вычислительной геометрии и эвристические алгоритмы. Было бы полезно увидеть в заключении диссертации конкретный план или гипотезу о том, как разработанные автором

классические методы (например, метод окрестностей или сглаживания границ) могут быть интегрированы с ИИ-подходами в будущих исследованиях.

3) В диссертационной работе теоретические исследования вычислительной погрешности при работе с сетками представлены преимущественно для двумерного случая (раздел 2.6, леммы 2.2–2.5), в то время как для трехмерного метода окрестностей перестроения поверхностной сетки, являющегося основным научным результатом работы, приведены лишь качественные экспериментальные результаты на тестовых сетках (раздел 2.5.5, рис. 2.15–2.17, табл. 2.1). На наш взгляд, в работе не хватает подробного теоретического анализа накопления вычислительной погрешности при многократном перестроении сетки в процессе длительного моделирования обледенения, что является критически важным для оценки надежности метода при практическом применении. Было бы полезно увидеть количественный анализ влияния погрешности вычислений на качество результирующей сетки при эволюции поверхности в течение длительного модельного времени.

4) В разделе 2.8 при описании метода удаления самопересечений отмечается, что использование рациональных координат позволяет избежать ошибок, связанных с точностью вычислений, но влияет на время вычислений. В таблице 2.2 приведена статистика применения алгоритма на тестовых примерах, однако не указано абсолютное время работы алгоритма в секундах и не приведена количественная оценка накладных расходов на рациональную арифметику по сравнению с вещественной на тестовых сетках. Каковы эти накладные расходы, и как вообще можно оценить выигрыш в вычислительной трудоемкости, которая показывает затраты машинного времени на достижение заданной вычислительной погрешности?

5) В диссертационной работе недостаточно освещен вопрос влияния предлагаемых методов на потребление оперативной памяти. В частности, использование рациональной арифметики для устранения

самопересечений (раздел 2.8.2) и массовое дробление блоков при балансировке нагрузки (раздел 3.3.5) неизбежно ведут к росту требований к памяти. В работе не приведены количественные оценки этого роста (memory overhead) и не обсуждается, как предложенные оптимизации поведут себя при моделировании сверхкрупных сеток (свыше 100 млн ячеек) на узлах с ограниченным объемом RAM. На наш взгляд, нужно прокомментировать этот недостаток.

6) В главе 5 рассматривается ручная векторизация с использованием интринсиков AVX-512. Однако современные оптимизирующие компиляторы (GCC 13+, LLVM/Clang 17+, Intel ICX) демонстрируют значительный прогресс в автоматической векторизации циклов со сложным управлением (auto-vectorization with predication). Было бы интересно увидеть сравнительный анализ производительности, а именно, сравнить предложенную автором методику «плоских циклов» с результатами работы современных компиляторов в режиме агрессивной оптимизации (а именно, -O3 -march=native или даже -O3 -march=native -ffast-math) на тех же задачах. Насколько ручная векторизация превосходит автоматическую на современных версиях компиляторов?

7) В разделе 3.3.5 предложен метод распределения блоков сетки по вычислительным процессам с использованием дробления блоков, основанный на параметрическом алгоритме распределения блоков по партициям с уменьшением количества дроблений. Однако в работе не рассматривается поведение алгоритма на сетках с экстремальной степенью адаптации, где количество и размеры блоков могут изменяться на каждой итерации по времени. Не приведет ли частое дробление и перераспределение блоков к существенному снижению производительности из-за перестроения структуры интерфейсов и буферов обмена?

8) В разделе 4.1.2 предлагается метод сглаживания границ между доменами на основе динамического программирования. Какова вычислительная сложность предложенного метода в худшем случае, например, когда граница между доменами представляет собой

фракталоподобную структуру с максимальным количеством «пилообразных» шаблонов? Не приведет ли это к слишком большому времени работы на крупных сетках?

9) Разработанная в главе 5 методика векторизации вычислений с помощью представления кода в виде «плоских циклов» демонстрирует высокую эффективность. Однако переход от традиционной объектно-ориентированной структуры данных (Array of Structures) к структуре «набор массивов» (Structure of Arrays), а также ручное расщепление циклов и работа с интринсиками требуют существенной перестройки исходного кода. В работе не приведена количественная или качественная оценка трудоемкости (в человеко-часах или процентах от объема кода) адаптации крупных промышленных CFD-решателей (таких как ЛОГОС, ПО «Лазурит» или «Кристалл») под предложенную методику. Насколько эта методика устойчива к частым изменениям в бизнес-логике решателя?

10) В разделе 5.2 предлагается новый метод векторизации перемножения малоразмерных матриц (8?8, 7?7, 6?6, 5?5) с использованием комбинированных операций FMA. Автор демонстрирует ускорение до 6 раз по сравнению с невекторизованной версией. Однако в работе не приведено сравнение предложенного метода с существующими высокооптимизированными библиотеками линейной алгебры (Intel MKL, OpenBLAS, BLIS), которые также содержат оптимизированные реализации для малоразмерных матриц. Насколько предложенный метод превосходит или уступает этим библиотекам на различных микропроцессорных архитектурах? Обоснована ли необходимость разработки собственного метода при наличии зрелых библиотечных решений?

11) Диссертация предлагает широкий спектр новых математических методов и алгоритмов: метод окрестностей перестроения сетки, метод удаления самопересечений, методы распределения блоков, метод сглаживания границ, методы векторизации плоских циклов и другие. Однако в работе не обсуждается вопрос о верификации корректности

реализации всех этих методов. Как автор обеспечивает корректность работы разработанных алгоритмов? Как считает автор, имеет смысл применять методы формальной верификации, модульное тестирование (unit testing), регрессионное тестирование или какие-либо другие? Как обеспечивается отсутствие ошибок в реализации сложных геометрических алгоритмов, например, в методе удаления самопересечений с использованием рациональных координат?

12) В диссертационной работе подробно описаны методы повышения производительности программ, однако не описана методология профилирования функционирования программного комплекса «Кристалл» с целью выяснения его работоспособности, быстродействия, выявления причин аварийных остановок при длительных расчётах обледенения. Что автор предлагает в этом направлении для промышленной эксплуатации комплекса?

В заключение отметим, что высказанные выше замечания не уменьшают научной значимости полученных автором результатов и носят дискуссионный характер.

9. Заключение о работе

Представленная диссертация является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, расширяющей область знаний о методах повышения производительности программ для моделирования объектов со сложной геометрией, в ней представлены 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.

Все выносимые на защиту научные положения получены соискателем лично. Из совместных исследований в диссертацию включены только те результаты, которые принадлежат непосредственно автору.

По теме диссертации автором опубликовано 42 печатные работы, из них 30 статей опубликовано в изданиях, рекомендованных ВАК, в том числе 20 работ — в журналах, индексируемых базой данных RSCI, 5 работ — в изданиях категории К-1 Перечня ВАК, 10 работ — в журналах, индексируемых международными базами данных Web of Science и Scopus. По теме диссертации получено 8 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и списка литературы. Общий объём диссертации — 337 страниц, в том числе 126 рисунков, 9 таблиц и 17 листингов. Список литературы состоит из 383 наименований.

Тема и основные результаты диссертации соответствуют следующим направлениям исследований паспорта специальности 2.3.5 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных систем, комплексов и компьютерных сетей»:

- модели, методы и алгоритмы проектирования, анализа, трансформации, верификации и тестирования программ и программных систем;
- модели, методы, архитектуры, алгоритмы, языки и программные инструменты организации взаимодействия программ и программных систем;
- модели и методы создания программ и программных систем для параллельной и распределённой обработки данных, языки и инструментальные средства параллельного программирования.

Совокупность полученных Алексеем Анатольевичем Рыбаковым результатов позволяет заключить, что он достоин присуждения учёной степени доктора технических наук по специальности 2.3.5 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных систем, комплексов и компьютерных сетей».

Официальный оппонент:

Марченко Михаил Александрович,

доктор физико-математических наук, профессор РАН,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН),

19 октября 2026 г.

Подпись Марченко М.А. заверяю,

ученый секретарь ИВМ

к.ф.-м.н. Л.В. Вшивкова