

Oponentský posudek disertační práce

Parallel multilevel algebraic preconditioners

předložené studentkou

Ing. Pavlou Fraňkovou, M.Sc.

Disertační práce se věnuje teoretickému odvození i praktickému použití multigradní metody pro numerické řešení parciálních diferenciálních rovnic eliptického typu. Speciálně je zde uvedena metoda zhlazených agregací pro předpokmínění typu BPX. Spojení těchto dvou metod bylo poprvé publikováno v roce 2015 autory P. Fraňkovou, J. Mandelem a P. Vaňkem (citace [25]).

Disertační práce je přehledně rozdělena do pěti hlavních částí. V první části jsou uvedeny potřebné pojmy a vlastnosti prostorů funkcí. Ve druhé části je připomenuta klasická geometrická multigradní metoda a její hlavní vlastnosti. Třetí část je věnována algebraické multigradní metodě s využitím zhlazených agregací a jejímu uplatnění v předpokmínění typu BPX. Je uvedeno klasické tvrzení (Věta 19) o konvergenci BPX předpokmínovače a jeho důkaz. Předpoklady tohoto tvrzení (zejména vztah (3.19)) jsou potom v části 3.6 dokázány pro modelovou situaci: pro Poissonovu úlohu na dvourozměrné oblasti řešenou metodou konečných prvků s lineárními prvky, s agregováním 3×3 uzlů a s prolongátorem tvořeným pomocí polynomu

$$S = I - \frac{4}{3} \frac{1}{\rho(A)} A.$$

Ve čtvrté části jsou uvedeny numerické experimenty pro Poissonovu úlohu a pro anizotropní diferenciální operátor. V páté části je v hlavních rysech odvozena úloha transportu neutronů v jaderném reaktoru vedoucí na zobecněnou úlohu o vlastních číslech. Pro její předpokmínění je využita algebraická multigradní metoda. Jsou uvedeny výsledky numerických výpočtů a jejich porovnání s předchozími výsledky.

Téma předložené práce je velmi aktuální a užitečné z několika důvodů: (a) bylo dosaženo nového teoretického výsledku, (b) tento výsledek má přímý vliv na konstrukci a odhad konvergence numerických metod využívajících paralelní výpočty, (c) autorka úspěšně použila výsledek pro výpočet aktuální a náročné úlohy průmyslové praxe.

Teoretické výsledky, na jejichž odvození se autorka podílela, jsou pěkným netriviálním doplněním stávajících poznatků o víceúrovňových metodách. Autorka je navíc ověřila pomocí vlastních programů dokonce s využitím paralelních výpočtů. Numerické pokusy diskutovala z různých úhlů pohledu: vhodnost paralelizace různých částí algoritmu, způsob agregování pro anizotropní úlohu, apod. Odhaduji, že za nový výsledek lze považovat také předpokmínění výpočtu toku neutronů při uvažování více než dvou energetických skupin neutronů.

Oceňuji, že přes rozsah témat, která disertační práce zahrnuje, je text stručný a současně srozumitelný, čtenář se v něm dobře orientuje. Uvedená tvrzení vyžadují pokročilou znalost funkcionální analýzy. Vedle precizních důkazů autorka také uvádí jiné (vysvětlující) pohledy na odvozenou teorii. Např. to, že metoda zhlazených agregací minimalizuje chybu získanou po zhlazení (nikoliv po iteraci na hrubé úrovni jako klasický multigrid).

Práce je napsána v anglickém jazyce a má vysokou stylistickou, formální i jazykovou úroveň. V textu lze nalézt pouze malé množství překlepů nebo (jazykových) nepřesností.

Tato práce a celkový počet autorčiných publikací (19 technických zpráv, 4 publikované články a jeden odeslaný) dokládají autorčin přehled v teorii výpočetních metod, zkušenosti s praktickou implementací a schopnost samostatné odborné práce.

Předloženou disertační práci doporučuji k obhajobě.

Navrhuji v průběhu obhajoby zodpovědět následující otázky:

1. V práci je dokázáno, že BPX předpokmínění se zhlazenými agregacemi vede na číslo podmíněnosti řádově jako L^2 , kde L je počet vrstev. Jak s tímto výsledkem souvisí tempo růstu počtu kroků CG v tabulce 4.2?
2. Byl testován také agregační algoritmus dle článku Y. Notay, An aggregation-based algebraic multigrid method, ETNA, 2010?
3. Je potřeba ukládat matice A_l do paměti? (Část 4.3.)
4. Matice L ve vztahu (5.9) není symetrická. Jsou symetrické její diagonální bloky?
5. Jsou na obrázcích 5.6 - 5.9 relativní nebo absolutní rozdíly?
6. Kolik energetických skupin G bylo použito při výpočtech v části 5.3?



doc. RNDr. Ivana Pultarová, Ph.D.

Katedra matematiky, Fakulta stavební ČVUT v Praze

V Praze, dne 27. května 2019



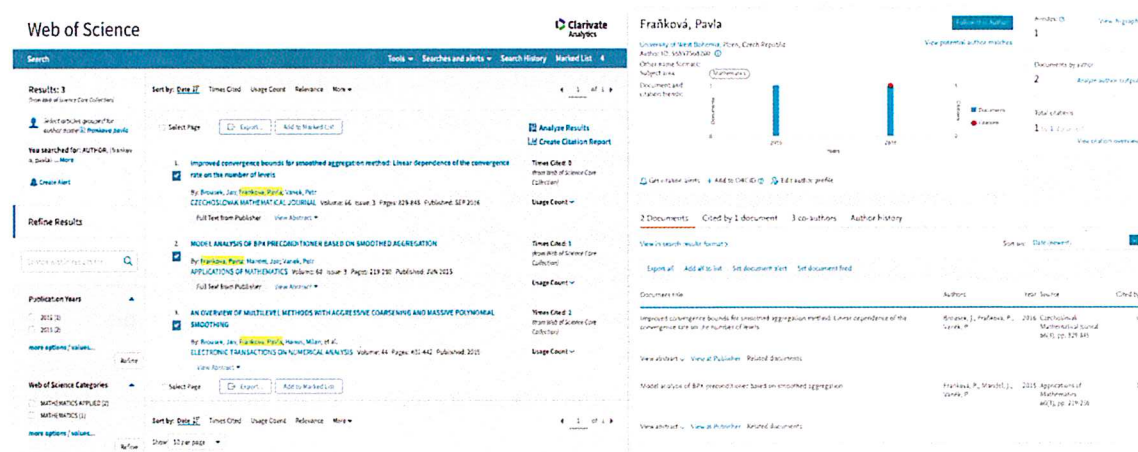
Posudek disertační práce Pavly Fraňkové:

„Paralelní víceúrovňové algebraické předpokmiňovače“

Předložená práce je věnována studiu víceúrovňových předpokmiňovačů a aplikaci při řešení difúzní rovnice neutronů v jaderném reaktoru.

Toto téma je vysoce aktuální, neboť výpočty vsázek reaktorů jsou časově náročné a nezbytné pro bezpečný provoz těchto zařízení.

Zrychlení výpočtů, při dané přesnosti, je cíl doktorandky a lze říci, že ho bylo dosaženo. Ing. Fraňková dle otevřených databází publikovala své výsledky v těchto pramenech dle WoS a SCOPUS:



V disertaci jsou uvedené i jiné výsledky a při obhajobě bude třeba, aby toto doktorandka objasnila.

Práce je psána slušnou angličtinou (i když spellchecker by jistě odhalil některé překlepy), má 128 stran, formálně, přehledností i graficky odpovídá standardu LaTeX.

Disertační práce je logicky dělena do 5 kapitol, kde první tři se zabývají matematickou teorií, čtvrtá její aplikací a numerickým výsledkům a poslední přímo problému jaderného reaktoru. Cítím se kvalifikovaný odborně posoudit práci od kapitoly 4.4, zbytek vděčně přenechám matematikům.

K předložené práci mám četné připomínky; především k její fyzikální a numerické stránce.

- V Symbols na straně ii úplně chybí některé symboly (např. v), jiné jsou popsány nesprávně (např. účinný průřez pro rozptyl z grupy g do grupy h).
- V Shortcuts na straně iii chybí velké množství zkratk (např. FVM, CG, PCG, MDS, JDGZ, MCNP...), což mě jako čtenáře v průběhu četby při hledání irituje (tj. musel jsem si tento seznam vytvořit sám).

- Tabulka 4.1 – bylo by dobré uvést, jaká veličina je uvedena (asi sekundy, že?) a všechny hodnoty uvést na stejný počet platných číslic. Takto to vypadá, že někdy měříme na milisekundy, ale 17,09771 na mikrosekundy... Celkově by nebylo od věci tabulky 4.1 a 4.2 spojit. Zejména, když zde je vidět zrychlení při PCG, což je vlastně jeden z cílů celé práce.
- Tabulky 4.3 - 4.6 – přesnost na milisekundy je zde dobrá, ale že jde o sekundy musí opět čtenář hádat.
- Tabulka 4.7 – stejné jako 4.1.
- Tabulky 4.8 – 4.9 – opět sekundy? Možná by nebylo od věci uvést typ CPU a kompilery pro danou rychlost a přesnost 10^{-5}
- Tabulky 4.10-4.18. Zde je najednou přesnost 10^{-10} , což nekoresponduje s 4.1-4.9. V kapitole 5 se pak skrytě v textu objevuje 10^{-8} . Nešlo by celé vyjádřit lépe graficky a přesnosti prezentovat naráz?
- Kapitola 5 vychází z literatury minulého století. Např. Lewis a Reuss mají novější a lepší učebnice.
- Strana 99 – psáno jako popularizace pro gymnazisty s mnoha chybami, snad v každé větě:
 - Při štěpení **nemusejí** vznikat neutrony.
 - Rychlé neutrony **mohou** štěpit jádra.
 - Rozptyl není moderace, tj. jen pouze rozptylem (např. na U238) energii neutronů příliš snížím.
 - Věta „The energy is not conserved and escapes.“ popírá zákon zachování energie.
 - Při pružném rozptylu nemusí rychlost neutronů klesat, existuje i upscattering.
 - Při absorpci nemusí dojít k emisi částice.
 - Při štěpení nemusejí vznikat 3 neutrony; v realitě to je 0, 1, 2, 3, 4, 5, či 6.
 - „Sufficient scattering“ není moderace (jak je vidět třeba na Li6).
- Při odvozování transportní a difúzní rovnice je nesprávně vynecháván externí zdroj (či toto zjednodušení není uvedeno). Např. ve vztahu 5.3 či 5.4 to vypadá, že autorka ho tam po posledním „+“ původně chtěla napsat.
- Ve vztahu 5.6 se najednou nesprávně objeví mikroskopický účinný průřez pro absorpci a definice D chybí.
- Vztah 5.7. - obecně by bylo asi lépe než ∇^2 použít Laplaceův operátor a grupy značit jako levý dolní (nebo třeba i horní) index, aby se nepletly s mocninami. Pak by nevznikaly nesmysly typu $D^g \nabla^g \phi^g$. A vzniklo by mnohem přehlednější $gD \Delta_g \phi$
- Strana 103 - při podkritickém stavu **nemusí** počet neutronů klesat.
- Vztah 5.8. byl i s „mocninovou“ chybou převzat z 5.7.
- Strana 105– definice v chybí.
- Strana 106 – copak je Σ_r^g ?
- Strana 107 - gradient se běžně nedefinuje jako „direction of least density“.
- Obr. 5.4. ukazuje nepochopení spojitosti hustoty proudu neutronů – na uvedeném grafu právě spojitost j_s nebude.
- Vztah 5.22 - copak je $\Sigma_{r,i}$?
- Strana 111 - co je MCNM ?
- Část 5.3 – zde by měly být demonstrovány výsledky na reálném reaktoru VVER440, kvůli kterým celá práce vznikla. Bohužel:
 - obrázky lze výrazně zpřehlednit:
 - Nemají uvedeny jednotky.

- Nejsou vysvětleny barvy v 5.5.
 - Používají bídné rozlišení (či jsou obrázky příliš malé).
- Tabulky 5.1-5.5:
 - Používají jinou přesnost než kapitola 4, a ta je navíc skryta v textu.
 - Zasloužily by si grafické znázornění.
- Protože i přiložené publikace svědčí o tom, že se jedná vždy o práci širšího kolektivu, prosím o vyjádření, které výpočty prováděla doktorandka sama.

Celkově konstatuji, že práce přináší řadu originálních výsledků, které mohou nalézt bezprostřední uplatnění v technické praxi. Z tohoto důvodu doporučuji předloženou práci uznat jako disertační a po úspěšné obhajobě, kde vysvětlí a uspokojivě vysvětlí všechny mé připomínky, udělit autorce vědecký titul PhD.

Ve Fukušimě, dne 21. 5. 2019


Doc. Ing. Radek Skoda, MBA MSc PhD

