

Posudek na habilitační práci Ing. Tomáše Oberhubera, Ph.D.

Numerical solution of nonlinear PDEs and massively parallel numerical algorithms

Předložená habilitační práce je věnována numerickému řešení vybraných výpočetně náročných nelineárních problémů s důrazem na použití masivně paralelních počítačových architektur, zejména grafických karet (GPU). Jedná se o zajímavé, aktuální a komplikované téma. Práce shrnuje autorovy výsledky dosažené během posledních zhruba patnácti let uveřejněné v celkem šestnácti článcích publikovaných převážně v renomovaných mezinárodních časopisech. Šest z těchto článků, které byly všechny publikovány v impaktovaných časopisech, je součástí práce ve formě jejich kopií. Výsledky byly dosaženy v rámci řešení mnoha grantových projektů financovaných GAČR, ČVUT a ministerstvy školství a zdravotnictví.

V práci je na více než padesáti stranách přehledně a srozumitelně pojednáno o různých oblastech autorovy vědecké práce. Po krátké úvodní kapitole následují tři kapitoly (2–4), v nichž jsou popsány a diskutovány různé typy nelineárních úloh, které mají důležité aplikace a jejichž řešení je výpočetně velmi náročné. Následuje kapitola 5 věnovaná implementaci numerických metod na paralelních architekturách využívajících grafických karet a krátký závěr v kapitole 6. Každá z kapitol 2–5 obsahuje přehledné pojednání o hlavním přínosu autora k příslušné problematice.

Kapitola 2 je věnována modelům popisujícím vývoj křivek a ploch, které se používají v řadě aplikací, kde je potřeba zachytit pozici rozhraní mezi různými částmi uvažované části prostoru. Jsou zde zformulovány různé typy modelů a diskutovány jejich výhody a nevýhody. Autor se věnoval v řadě svých prací zejména numerické simulaci evoluce rovinných křivek podle Willmorova toku. K jeho hlavním výsledkům patří odvození anizotropní modifikace založené na grafové formulaci, pro kterou dokázal energetickou rovnost. Provedl řadu výpočtů srovnávajících různé modely a též různé numerické metody, mezi něž patří různé varianty metody konečných diferencí a metody konečných objemů.

Kapitola 3 se zabývá různými postupy používanými při zpracování digitálního obrazu, přičemž hlavní důraz je kladen na detekci jednotlivých objektů v obrazu (image segmentation) a na zpracování více obrazů téhož objektu (image registration), což má důležité aplikace při zpracování výsledků lékařských vyšetření získaných pomocí magnetické rezonance, výpočetní tomografie a ultrazvuku. Pro *image segmentation* je aplikována vrstevnicová metoda (level-set metoda), která je též jednou z metod uvažovaných v kapitole 2. Je zde prezentováno i vylepšení této metody publikované v jednom z autorových článků, které spočívá v zavedení omezení formulovaných pomocí variačních nerovností. V části věnované *image registration* jsou formulovány různé přístupy používané v této oblasti a je popsána nová metoda navržená v jednom z autorových článků, která je vhodná pro registraci obrazů s různými intenzitami získanými pomocí magnetické rezonance.

Kapitola 4 pojednává o metodách pro simulaci proudění tekutin. Je zde popsána diskretizace nestlačitelných Navierových–Stokesových rovnic pomocí nekonformního Crouzeixova–Raviartova konečného prvku a zhlazovač Vankova typu. Dále je zde zformulován model pro dvoufázové proudění v porézním prostředí a stručně popsána diskretizace pomocí smíšené metody konečných prvků.

Téma páté kapitoly se prolíná velkou částí autorových článků. Zde je diskutována problematika náročných vědecko–technických výpočtů a je zdůrazněna důležitost využití paralelních počítačů. Autor se věnoval zejména vývoji softwarových nástrojů pro implementaci numerických metod na grafických kartách, které umožňují výrazně zvýšit rychlost výpočtů. Jejich efektivní použití však vyžaduje hlubokou znalost používaného hardwaru, aby bylo možno použít odpovídající implementační postupy. Přínosem autora je vyvinutí vhodných postupů implementace na grafických kartách pro numerické řešení úloh z kapitol 3 a 4, ale i některých úloh z kapitoly 2. Mimo jiné vyvinul dva nové formáty pro uložení řídkých matic na grafických kartách a vypracoval nové postupy pro použití nestrukturovaných sítí při numerických simulacích na grafických kartách. Autorovy publikace jasně demonstrují efektivitu použitých postupů a aplikovatelnost grafických karet k numerickému řešení výpočetně náročných úloh v řadě oblastí vědy, techniky i lékařství.

Je potřeba též vyzdvihnout, že autor je vedoucím projektu vývoje softwarové knihovny Template Numerical Library (www.tnl-project.org) určené pro vývoj paralelních numerických algoritmů. Tato knihovna je vyvíjena na FJFI od roku 2004 a pod vedením autora se práce na ní účastnila řada studentů FJFI i FIT.

Habilitační práce je celkově na velmi vysoké úrovni, obsahuje mnoho původních výsledků, je napsána pěknou angličtinou a dobře se čte. Počet tiskových a věcných chyb je vzhledem k rozsahu práce malý. Text obsahuje řadu citací, které vhodným způsobem zachycují současný stav poznání ve studovaných oblastech. Autor se musel ve svých pracích vypořádat s řadou netriviálních problémů a prokázal své velmi dobré znalosti rozličných partií matematického modelování, numerické matematiky i programování. Své práce publikoval s různými spoluautory i sám, čímž jasně prokázal schopnost samostatné i týmové vědecké práce. O dosažených výsledcích autor referoval na řadě mezinárodních konferencích v ČR i v zahraničí, přičemž některé jeho přednášky jsem měl možnost osobně vyslechnout. Výsledky autora popsané v habilitační práci přispěly k rozvoji příslušných numerických metod i implementačních postupů pro grafické karty a najdou uplatnění při numerickém řešení náročných vědecko–technických problémů.

Na základě předložené habilitační práce vřele doporučuji, aby byl panu Ing. Tomáši Oberhuberovi, Ph.D., udělen titul docent.

V Praze dne 13. 10. 2021

doc. Mgr. Petr Knobloch, Dr., DSc.
Univerzita Karlova
Matematicko–fyzikální fakulta