

ПРИДАЉЕНО: 09.12.2021	
Оп. јоз.	Б
05	6205-1 - -

Универзитет у Крагујевцу
Наставно-научном већу Природно-математичког факултета
Већу за природно-математичке науке

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној 27.10.2021. године, одлуком број 520/IX-1, и на седници Већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу одржаној 10.11.2021. године, одлуком број IV-01-886/9, одређени смо за чланове комисије за писање извештаја о оцени научне заснованости теме и испуњености услова кандидата Срђана Николића за израду докторске дисертације под насловом **“Оптимизација дистрибуираних честичних симулација Монте-Карло типа применом метода машинског учења”**.

ИЗВЕШТАЈ

1. Научни приступ проблему предложеног нацрта докторске дисертације и процена крајњег исхода рада

У предложеном нацрту докторске дисертације, кандидат је образложио предмете и циљеве рада, и истакао значај истраживања у области паралелизације рачунарских симулација кретања честица аеросоли у атмосфери. Кретање честица у ваздуху је хаотично и моделује се помоћу Лагранжеве методе, а може описати помоћу Брауновог кретања, применом директне симулације, где је потребно симулирати сваки судар честице. Овакав тип симулација је веома рачунарски захтеван и дуготрајан, па зато и не чуди да се у истраживањима углавном избегава овакав приступ. Паралелизација оваквих симулација представља једини начин повећања њихове употребљивости. Такође, у случају када животни век честица подлеже експоненцијалној расподели, паралелизација алгоритма се додатно компликује услед дисбаланса оптерећења процесора.

Кандидат је анализирао актуелне радове који се баве поменутим симулацијама и дефинисао недостатке актуелних декомпозиција. Издавају се два приступа: декомпозиција по честицама и декомпозиција по простору. Главни недостатак ових декомпозиција се огледа у ограниченој склабилности и неједнакој употреби процесора у случају када је расподела рачунарског времена потребна за симулацију честица експоненцијална. Анализом доступне литературе, кандидат је направио план истраживања који ће решити поменуте недостатке.

Централни део докторске дисертације представља имплементацију паралелног алгоритма који симулира кретање честица у атмосфери, увођењем иновативног начина декомпозиције. Алгоритам ће имати могућност извршавања како на стандардним, тако и на графичким процесорима. У раду ће бити представљени резултати тестирања алгоритма у хибридном дистрибуираном рачунарском окружењу, на примеру кретања Радона у дифузионој комори. Очекују се резултати убрзања који су блиски идејним.

2. Образложение предмета, метода и циља који уверљиво упућују да је предложена тема од значаја за развој науке

Предмет, циљеви и хипотезе дисертације

Директне рачунарске симулације кретања честица у атмосфери су веома захтевне. С обзиром на то да је потребно симулирати $\sim 10^9$ судара у току једне секунде, у досадашњим радовима су претежно имплементиране методе којима се избегава директна Лагранжева симулација за сваки судар честице са окolinом, из практичних разлога. Наиме, директна симулација само једне честице на савременим рачунарима може трајати данима, па и месецима, у зависности од дужине временског периода у којем се честица прати. Поређења ради, уколико је потребно креирати историју кретања само једне честице у току једног дана, потребно је више од 400 дана процесорског времена савременог рачунара. Будући да је потребно симулирати више хиљада честица како би се добила било каква корисна статистика, неопходна је употреба дистрибуираног рачунарства и масовне паралелизације алгоритма који симулира кретање честица. У супротном, директне симулације праћења честица су у пракси неупотребљиве.

Циљ је да се дефинише нови приступ у паралелизацији стохастичке Лагранжеве методе за праћење честица помоћу иновативне декомпозиције парцијалним путањама (енг. *Partial Trajectory Decomposition*, PTD). Паралелни алгоритам који се развија мора бити апсолутно скалабилан и прилагодљив, као и да има могућност масовне паралелизације у хибридном дистрибуираном систему који користи како стандардне, тако и графичке процесоре. Алгоритам је потребно имплементирати помоћу MPI програмског оквира и тестирати на кластеру који се састоји из рачунарских чворова од којих неки имају и графичке процесоре. Циљ је да се на примеру паралелизације кретања честица Радоновог потомства у дифузионој комори помоћу PTD приступа добију убрзања која су близка идеалним.

На први поглед, паралелизација стохастичке Лагранжеве методе представља тривијалан посао, јер је она концептуално једноставна нумеричка метода код које су све честице међусобно независне, па би се једноставном декомпозицијом честица по процесорима на тривијални начин дошло до убрзања. Међутим, постоји проблем уколико честице немају исти животни век, што је случај код радиоактивних честица, где расподела животног века честица подлеже експоненцијалној расподели. Додатно, постоји могућност таложења честица на чврстим површинама у току симулације, након чега престаје потреба за симулацијом кретања такве честице. Пример једне такве симулације јесте распадање честица радоновог потомства у дифузионој комори.

Уколико честице немају исто време рачунања, то ће сигурно утицати на неједанко оптерећење процесора током симулације, а то ће консеквентно утицати на смањену ефикасност паралелног алгоритма. Такође, скалабилност алгоритма који користи тривијалну декомпозицију по честицама није задовољавајућа, јер смо ограничени на употребу онолико процесора колико има честица које је потребно моделовати. У прошлости је објављено неколико радова и развијено неколико програмских оквира на тему паралелизације Лагранжеве методе праћења честица. Међутим, ниједан од њих није решио претходно наведене проблеме.

Методе истраживања

Главни део овог истраживања јесте паралелизација Лагранжеве методе за праћење честица које се могу описати Брауновим кретањем, а први га је математички формулисао Норберт Винер (Винеров процес). Симулација Брауновог кретања на рачунару захтева генерисање случајних бројева, па је употреба Монте-Карло (МК) методе логичан избор.

У овом раду се уводи иновативни начин декомпозиције паралелног алгоритма за праћење честица. Предлаже се PTD метод који уводи декомпозицију по парцијалним путањама и отклања недостатке актуелних декомпозиција. PTD метод даје могућност да у симулацији само једне честице може учествовати велики број како стандардних, тако и графичких процесора.

PTD приступ са собом уводи и неколико нових параметара чије је вредности потребно одредити пре покретања симулације. Оптималне вредности ових параметара није могуће одредити аналитички, па се користи математичка оптимизација у виду генетских алгоритма (ГА). ГА представљају најпопуларнију врсту еволуционих алгоритама. У процесу евалуације јединки, ГА ће користи сурогатни модел који је креиран помоћу алгоритама машинског учења. Конкретно, користи се модел неуронских мрежа и стабала одлучувања.

Алгоритам ће бити имплементиран у програмском језику “C” употребом интерфејса за размену порука (енг. Message Passing Interface, MPI) и CUDA (енг. Compute Unified Device Architecture) платформе. Главни део резултата ће бити представљен на примеру распадања радоновог потомства у дифузионој комори. Резултати убрзања PTD приступа ће бити упоређени са паралелним приступом који користи тренутно најбољу декомпозицију.

Оквирни садржај докторске дисертације

- Увод
 - Случани процеси
 - Симетрични случајни ход
 - Особине Брауновог кретања
 - Монте-Карло метод и генератори случајних бројева
- Особине радона и његовог потомства
 - Потомци радона
 - Радон и његови потомци у затвореном простору
- Радон у дифузионој комори
 - Моделирање кретања радона помоћу Брауновог кретања
 - Статистичка метода
 - Директна метода
- Паралелни алгоритми за симулацију кретања честица
 - Паралелни и дистрибуирани рачунарски системи
 - Класификација паралелних и дистрибуираних рачунарских система
 - Јединица за графичку обраду опште намене
 - Рачунарски кластер
 - Интерфејс за размену порука
 - Технике декомпозиције алгоритама за праћење честица
 - Паралелизација радоновиг потомства у дифузионој комори

- Теорија оптимизације
 - Једнокритеријумска оптимизација
 - Вишекритеријумска оптимизација
 - Генетски алгоритми
 - Представљање јединки
 - Евалуација
 - Селекција
 - Укрштање
 - Мутација
- Сурогатно моделирање
 - Вештачке неуронске мреже
 - Неурон
 - Мрежа неурона
 - Алгоритам учења ANN
 - Стабла одлучивања
- Преглед развијених софтверских решења
- Декомпозиција по парцијалним путањама
 - Параметри PTD приступа
 - MPI имплементација PTD приступа
 - Оптимизовани PTD приступ
 - Спречавање лажних минимума
 - Имплементација PTD приступа у хибридном CUDA/MPI окружењу
- Резултати и дискусија
- Закључак
- Литература

3. Образложење теме за израду докторске дисертације

Предложена тема докторске дисертације **Оптимизација дистрибуираних честичних симулација Монте-Карло типа применом метода машинског учења** је веома актуелна и занимљива са становишта паралелног и дистрибуираног рачунарства, јер ће увести потпуно иновативни приступ у паралелизацији стохастичке Лагранжеве методе за праћење честица. Идеја је да се дефинише нова PTD декомпозиција по парцијалним путањама која ће елиминисати недостатке досадашњих приступа декомпозиција. Паралелни алгоритам који се представља мора бити апсолутно скалабилан и прилагодљив, као и да има могућност масовне паралелизације у хибридном дистрибуираном систему, који користи како стандардне процесоре, тако и графичке процесоре. Циљ је да се на примеру паралелизације кретања честица Радоновог потомства у дифузионој комори помоћу PTD приступа добију убрзања која су близка идејним.

4. Усклађеност дефиниције предмета истраживања, основних појмова, предложених хипотеза, извора података, метода анализе са критеријумима науке и поштовање научних принципа у изради коначне верзије докторске дисертације

Кандидат је у пријави теме докторске дисертације испоштовао основне критеријуме науке, научне методе и циљеве, употребом постојећих и развијањем оригиналних идеја научног истраживања. Служио се одговарајућом терминологијом из научних области којима докторска дисертација припада. Кандидат је изабрао савремене доступне чланке из часописа, конференција и других извора и показао способност анализе научних радова и дефинисање хипотеза за даља теоријска и практична истраживања у области паралелизације рачунарских симулација кретања честица. На основу утврђених хипотеза, кандидат је предложио смерове истраживања који ће довести до конкретних научних резултата. Комисија истиче да постоји усклађеност дефиниције предмета истраживања, основних појмова, предложених хипотеза са критеријумима науке, уз поштовање научних принципа.

5. Научна област дисертације

Предложена тема докторске дисертације припада области **рачунарских наука**. Ужа научна област према правилнику Универзитета у Крагујевцу којој припада је **методологије рачунарства**, док према **ACM** (Association for Computing Machinery) класификацији припада областима: **методологије паралелног рачунарства, Монте-Карло методе засноване на Марковљевим ланцима, математичка оптимизација и надгледано машинско учење**.

6. Кратка биографија кандидата

Срђан Николић је рођен у Крагујевцу 1989. године где је завршио основну и средњу школу. Основне студије из области информатике на Природно-математичком факултету, Универзитета у Крагујевцу завршио је 2011. године као студент генерације. Мастер студије из области информатике завршио је 2013. године и стекао звање Мастер информатичар. Након завршених мастер студија, уписао је Докторске студије из области рачунарства. У звање сарадник у настави изабран је 2013. године, а у звање асистент 2014. године. У току студија био је стипендиста Министарства просвете, Фонда „Академик Драгослав Срејовић“, Фондације за стипендирање и подстицање најбољих студената, младих научника и уметника Универзитета у Крагујевцу и Фонда за младе таленте Републике Србије. Срђан Николић као асистент држао је вежбе из предмета Базе података 1, Структуре података и алгоритми 1, Објектно-оријентисано програмирање, Визуелно програмирање, Оперативни системи 1, Програмирање сложених софтверских система, Софтверски алати 1, Основе програмирања, Дизајнирање софтвера и Рачунарства у облаку. Добитник је плакете за најбоље оцењеног асистента 2016. године. Објавио је два научна рада, од чега је један у часопису са SCI листе. Учествовао је на једној међународној конференцији. Као истраживач био је ангажован на пројектима Института за водопривреду Јарослав Черни у периоду од 2009. до 2017. године. У току 2014. године био је ментор у Регионалном центру за таленте. Учествовао је на пројекту Развој система за решавање спрегнутих мултифизичких проблема, Министарства просвете, науке и технолошког развоја.

7. Преглед научно-истраживачког рада кандидата

Кандидат Срђан Николић се бави научно-истраживачким радом у области рачунарских наука. Објавио је два научна рада из у же научне области теме дисертације, од чега је један у међународном часопису врхунског значаја. Учествовао је на једној међународној конференцији из у же научне области теме дисертације.

- **Nikolić, Srđan**, Nenad Stevanović, and Miloš Ivanović. "Optimizing parallel particle tracking in Brownian motion using machine learning." *The International Journal of High Performance Computing Applications* (2020): 1094342020936019. (ISSN 1094-3420, IF(2019)=2,521 **M21**)
- Milos Ivanović, **Srdjan Nikolic**, Boban Stojanovic, Milivojevic Nikola, Nenad Filipovic, *Parallel Algorithms for Statistic Modeling of Dam Behavior*, IPSI BgD Transactions on Advanced Research, Vol. 10, No 1 (2014), 19-22. (ISSN 1820-4511, **M53**)
- M. Ivanović, S. Nikolić, *Optimizing Lagrangian Particle Tracking in Parallel Environment*, XIV SERBIAN MATHEMATICAL CONGRESS (14SMAK 2018), pp. 214 - 214, Kragujevac, 16. - 19. May, 2018 (ISBN 978-86-6009-055-5, **M34**)

8. Предложени ментор докторске дисертације

Веће Института за математику и информатику Природно-математичког факултета у Крагујевцу је предложило др Милоша Ивановића, ванредног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу, за ментора ове дисертације. У же научне области интересовања професора Ивановића су безмрежне нумеричке методе, паралелно и дистрибуирано рачунарство, као и рачунарство у облаку. Објавио је преко 20 научних радова у часописима од међународног значаја. Списак радова који припадају у жеј научној области теме дисертације је приказан у наставку.

Списак референци ментора

1. **Milos Ivanovic**, Visnja Simic, Boban Stojanovic, Ana Kaplarevic-Malisic, Branko Marovic, Elastic grid resource provisioning with WoBinGO: A parallel framework for genetic algorithm based optimization, *Future Generation Computer Systems*, Vol. 42, 44–54 (2015), DOI: 10.1016/j.future.2014.09.004, (ISSN 0167-739X, IF(2014)=2,464 **M21a**)
2. Simic, V., Stojanovic, B., **Ivanovic, M.** (2019). Optimizing the performance of optimization in the cloud environment—An intelligent auto-scaling approach. *Future Generation Computer Systems*. DOI: 10.1016/j.future.2014.09.004 (ISSN 0167-739X, IF(2020)=6,644 **M21a**)
3. **M. Ivanovic**, B. Stojanovic, A. Kaplarevic-Malisic, R. Gilbert, S. Mijailovich, Distributed multi-scale muscle simulation in a hybrid MPI-CUDA computational environment, *SIMULATION: Transactions of The Society for Modeling and Simulation International* 12/2015; DOI:10.1177/0037549715620299, (ISSN 0037-5497, IF(2014)=0,818 **M23**)
4. **Ivanović, M.**, Kaplarević-Mališić, A., Stojanović, B., Svićević, M., & Mijailovich, S. M. (2019). Machine learned domain decomposition scheme applied to parallel multi-scale muscle simulation. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, DOI: 10.1177/1094342019833151, (ISSN 1094-3420, IF(2019)=2,521 **M21**)

5. Nikolić, Srđan, Nenad Stevanović, and Miloš Ivanović. "Optimizing parallel particle tracking in Brownian motion using machine learning." *The International Journal of High Performance Computing Applications* (2020): 1094342020936019. (ISSN 1094-3420, IF(2019)=2,521 **M21**)

9. Научна област чланова комисије

Проф. др Бобан Стојановић, редовни професор, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, ужа научна област: Примењено рачунарство и Информационе технологије и системи.

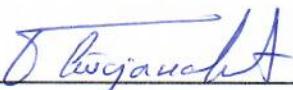
Проф. др Срђан Шкрбић, редовни професор, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, ужа научна област: Информациони системи.

Проф. др Милош Ивановић, ванредни професор, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, ужа научна област: Рачунарске комуникације.

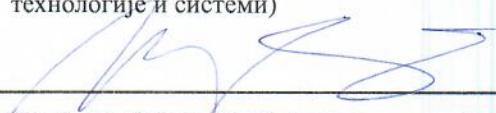
ЗАКЉУЧАК

Из свега наведеног, комисија констатује да је предложена тема докторске дисертације актуелна, садржајно квалитетна и да може дати конкретне научне резултате. Кандидат Срђан Николић, мастер информатичар, испуњава све предвиђене услове за одобрење израде докторске дисертације. Очекивани резултати докторске дисертације представљају оригинални научни допринос у праралелизацији прорачуна кретања честица аеросоли у атмосфери. Комисија предлаже да Наставно-научно веће Природно-математичког факултета у Крагујевцу одобри кандидату Срђану Николићу израду докторске дисертације под називом: **“Оптимизација дистрибуираних честичних симулација Монте-Карло типа применом метода машинског учења”**. За ментора дисертације се предлаже проф. др Милош Ивановић.

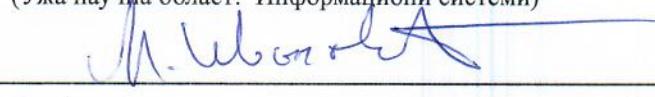
У Новом Саду и Крагујевцу 29.11.2021.



Проф. др. Бобан Стојановић, редовни професор (председник)
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
(Ужа научна област: Примењено рачунарство и Информационе
технологије и системи)



Проф. др. Срђан Шкрбић, редовни професор (члан)
Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду
(Ужа научна област: Информациони системи)



Проф. др. Милош Ивановић, ванредни професор (члан)
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
(Ужа научна област: Рачунарске комуникације)

Руководиоцу Института за математику и информатику

Поштована,

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној 27.10.2021. године, одлуком број 520/IX-1, и на седници Већа за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу одржаној 10.11.2021. године, одлуком број IV-01-886/9, проф. др Срђан Шкрбић, проф. др Бобан Стојановић и ја одређени смо за чланове комисије за писање извештаја о оцени научне заснованости теме и испуњености услова кандидата Срђана Николића за израду докторске дисертације под насловом *Оптимизација дистрибуираних честичних симулација Монте-Карло типа применом метода машинског учења.*

Комисија је доставила Извештај са којим сам сагласан, па Вам се обраћам са молбом да га упутите у даљу процедуру.

У Крагујевцу, 9. 12. 2021.

др Милош Ивановић
ванредни професор
Руководилац ДАС Рачунарских наука

