

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ИЗВЕШТАЈ О ОЦЕНИ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

-обавезна садржина- свака рубрика мора бити попуњена

(сви подаци уписују се у одговарајућу рубрику, а назив и место рубрике не могу се мењати или изоставити)

I ПОДАЦИ О КОМИСИЈИ
<p>1. Датум и орган који је именовео комисију 8.9.2020., Наставно-научно веће Природно-математичког факултета у Новом Саду</p> <p>2. Састав комисије са назнаком имена и презимена сваког члана, звања, назива уже научне области за коју је изабран у звање, датума избора у звање и назив факултета, установе у којој је члан комисије запослен:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. др Милош Рацковић, звање: редовни професор, ужа научна област: рачунарске науке, датум избора у звање: 2.3.2006., Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду. 2. др Срђан Шкрбић, звање: редовни професор, ужа научна област: рачунарске науке, датум избора у звање: 15.10.2019., Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду. 3. др Ненад Вукмировић, звање: научни саветник, ужа научна област: природно-математичке науке – физика, датум избора у звање: 6.7.2016., Институт за физику у Београду. 4. др Антун Балаж, звање: научни саветник, ужа научна област: природно-математичке науке – физика, датум избора у звање: 25.2.2015., Институт за физику у Београду. 5. др Милош Радовановић, звање: ванредни професор, ужа научна област: рачунарске науке, датум избора у звање: 12.12.2016., Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду.
II ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ
<p>1. Име, име једног родитеља, презиме: Жарко, Рада, Бодрошки</p> <p>2. Датум рођења, општина, држава: 24.01.1982. године, Београд, Србија.</p> <p>3. Назив факултета, назив студијског програма дипломских академских студија – мастер и</p>

стечени стручни назив
Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Дипломирани информатичар – мастер,
Дипломирани информатичар – мастер.

4. Година уписа на докторске студије и назив студијског програма докторских студија
2015., Докторске академске студије – Информатика.

5. Назив факултета, назив магистарске тезе, научна област и датум одбране:

-

6. Научна област из које је стечено академско звање магистра наука:

-

III НАСЛОВ ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ:

Развој серијског и паралелног алгоритма за рачунање електронске структуре материјала методом склапања наелектрисања

ПРЕГЛЕД ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ:

Навести кратак садржај са назнаком броја страна, поглавља, слика, шема, графикона и сл.

Докторска дисертација **Развој серијског и паралелног алгоритма за рачунање електронске структуре материјала методом склапања наелектрисања** кандидата Жарка Бодрошки је написана на српском језику, латиничним писмом, на 134 стране текста А4 формата. Подељена је у 6 поглавља: Увод, Методе за рачунање електронске структуре материјала, Имплементација у базису Гаусијана, Софтверска имплементација, Перформансе и валидација резултата и Закључак. Рад садржи 16 слика, 14 графикона, 10 табела и 114 литературних навода. На почетку дисертације налазе се Захвалница и Садржај, а на крају Библиографија и Биографија.

ВРЕДНОВАЊЕ ПОЈЕДИНИХ ДЕЛОВА ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ:

Увод

У уводу је концизно и јасно описан значај теме истраживања, приказан преглед постојећих резултата и дефинисани су циљеви истраживања. Увод садржи опште информације о рачунарству високих перформанси и примену у науци о материјалима. У кратким цртама је описана теорија функционала густине (DFT) и метод за склапање наелектрисања (CPM), као и преглед литературе и постојећих софтверских имплементација. Дат је преглед метода које су досад примењиване у важним корацима у CPM алгоритму, као што су дискретизација Kohn-Sham једначине и дијагонализација Хамилтонијана. На крају су наведени циљеви и доприноси, као и преглед садржаја тезе.

Методе за рачунање електронске структуре материјала

Развој алгоритма за рачунање електронске структуре материјала описан у тези се базира на DFT и CPM методама. У другом поглављу је дат теоријски увод поменутих метода, као и дијаграм са прегледом CPM алгоритма, који уједно најављује фазе имплементације.

Имплементација у базису Гаусијана

Имплементација у базису Гаусијана, подразумева имплементацију DFT и CPM где се таласна функција приказује као линеарна комбинација предефинисаних базисних функција, чију основу чине Гаусијани. Да би се добила густина наелектрисања потребна за екстраховање мотива најпре се дефинишу алгоритми за решавање свих потребних интеграла за рачунање матрице којом се представља Хамилтонијан система. Даље се описује како се алгоритамски унапређује конвергенција при решавању својственог проблема DFT алгоритма. Последња секција имплементације DFT-а даје пример употребе Гаусијана за проналажење енергије основног стања атома водоника. Други део овог поглавља описује CPM имплементацију, тако што најпре уводи CPM алгоритам а затим описује екстраховање мотива на основу густине наелектрисања добијеног из DFT прорачуна. Описана је оптимизација алгоритма уз помоћ одсецања при рачунању интеграла. На крају поглавља је описана дијагонализација Хамилтонијана.

Софтверска имплементација

У овом поглављу је дат опис имплементације софтверских решења на основу алгоритама уведених

у претходном поглављу. Најпре је дат опис глобалних структуре кода, дефиниција софтверских компонената које су садржане у коначној верзији програмске имплементације, као и начин алокације меморије. Централно место тезе је имплементација програмских решења која је дата кроз опис имплементације серијских алгоритама и паралелизације CPM. Како је главни допринос из аспекта имплементације кода онај који се односи на паралелизацију CPM, тако је мања пажња посвећена имплементацији серијских алгоритама, док је примат стављен на имплементацију која се односи на процесе паралелизације CPM.

Перформансе и валидација резултата

У овом поглављу је дата анализа перформанси и резултата програма који су развијени – серијског DFT и CPM програма, као и паралелне верзије CPM програма. Обе секције најпре уводе класе система који су тестирани, затим анализирају резултате тестова и приказују захтевност извршавања. У делу који се бави тестирањем паралелне верзије CPM-а је посебна пажња посвећена перформансама извршавања и то кроз две групе тестова: зависност времена извршавања CPM програма у односу на величину улазног система и јако скалирање (strong scaling). На крају су уз анализу ефикасности дате смернице како одабирати оптимални сценарио употребе програма, у зависности од улазних система и расположивих ресурса.

Закључак

У закључку је експлицитно наведено који су главни резултати овога рада и који је његов оригиналан допринос науци.

VI СПИСАК НАУЧНИХ И СТРУЧНИХ РАДОВА КОЈИ СУ ОБЈАВЉЕНИ ИЛИ ПРИХВАЋЕНИ ЗА ОБЈАВЉИВАЊЕ НА ОСНОВУ РЕЗУЛТАТА ИСТРАЖИВАЊА У ОКВИРУ РАДА НА ДОКТОРСКОЈ ДИСЕРТАЦИЈИ

Таксативно навести називе радова, где и када су објављени. Прво навести најмање један рад објављен или прихваћен за објављивање у часопису са ISI листе односно са листе министарства надлежног за науку када су у питању друштвено-хуманистичке науке или радове који могу заменити овај услов до 01.јануара 2012. године. У случају радова прихваћених за објављивање, таксативно навести називе радова, где и када ће бити објављени и приложити потврду о томе.

Кандидат је објавио два научна рада који представљају резултат ове докторске дисертације и пет научних радова који представљају резултат других истраживачких активности у току и пре докторских студија.

1. Z. Bodroski, N. Vukmirovic, and S. Skrbic,
Gaussian Basis Implementation of the Charge Patching Method,
J. Comp. Phys. 368, 196 (2018),
DOI: 10.1016/j.jcp.2018.04.032.
Категорија: M21a

2. Z. Bodroski., N. Vukmirovic, and S. Skrbic,
Towards the High Performance Method for Large-Scale Electronic Structure Calculations, Chapter in High Performance Computing and Applications, Springer, Volume 9576 of the series Lecture Notes in Computer Science, 9576, 90 (2016)
DOI: 10.1007/978-3-319-32557-6_9
Категорија: M33

3. Bodroški, Ž., Škrbić, S., Komlenov, Ž., Ivanović, M.,
Software System for E-publishing in Medical Domain.
Proceedings of the 12th International Conference on Computer Systems and Technologies - CompSysTech'11, Austria, 2011, pp 602-607
Категорија: M33

4. Mikalački, S., Bodroški, Ž., Škrbić, S.,
Wireless Services in Faculty Information System.
Proceedings of the Software, Services & Semantic Technologies (First International Conference), Sofia, Bulgaria, 2009, pp 260-267.
Категорија: M33
5. Bodroški, Ž., Škrbić, S.,
Academic Information System - Vision and Development.
Proceedings of the 4rth Balkan Conference in Informatics (BCI 09), Thessaloniki, Greece, 2009, pp 140-143.
Категорија: M33
6. Rakić, M., Bodroški, Ž., Škrbić, S.
An Application of the GWT in Faculty Information System.
Proceedings of the 52nd ETRAN Conference, Palić, 2008. (CD).
Категорија: M63
7. Škrbić, S., Bodroški, Ž., Pupovac, B., Racković, M.,
Faculty Information System Based On Open Source Tehnologies.
Novi Sad Journal of Mathematics. Vol. 37, No. 2, 2007, pp 181-192.
Категорија: M51

<p>VII ЗАКЉУЧЦИ ОДНОСНО РЕЗУЛТАТИ ИСТРАЖИВАЊА</p>
<p>У тези је представљена имплементација методе за склапање наелектрисања (CPM) у базису Гаусијана, која се користи за рачунање електронске структуре материјала. Имплементације описане у тези обухватају четири софверска решења: серијски DFT програм за мали прототип систем, серијски програм за екстраховање мотива, серијски CPM програм и паралелни MPI CPM програм. Овим се успешно покрива целокупан поступак који укључује учитавање кориснички дефинисаних улазних система, решавање малог прототип система уз помоћ DFT-а, генерисање мотива и решавање електронске структуре материјала за велике системе уз помоћ CPM-а.</p> <p>Показало се да се имплементирани серијски програм извршава типично око 100 пута брже него претходна имплементација CPM-а у базису равних таласа. Паралелна верзија програма користећи MPI за рачунарске системе високих перформанси, омогућава прорачуне физичких система са десетинама хиљада атома, док највећи тестирани систем садржи 20000 атома.</p> <p>Вредности израчунатих електронских стања у свим анализираним случајевима показује добро слагање са референтним вредностима. Показано је да су разлике вредности између серијске и паралелне верзије мање од 1 μH, док су одступања вредности паралелне и серијске верзије CPM програма у односу на вредност DFT мања од 1 mH.</p>
<p>VIII ОЦЕНА НАЧИНА ПРИКАЗА И ТУМАЧЕЊА РЕЗУЛТАТА ИСТРАЖИВАЊА</p>
<p>Експлицитно навести позитивну или негативну оцену начина приказа и тумачења резултата истраживања.</p>
<p>Комисија сматра да је текст докторске дисертације написан у складу са опште прихваћеним принципима писања овакве врсте рада. Кандидат је квалитетно приступио анализи проблема и одабиру одговарајућих метода за њихово решавање. Резултати добијени у овој докторској дисертацији изложени су јасно и систематично, графички и табеларно добро интерпретирани, правилно дискутовани и упоређивани са резултатима доступним из релевантне научне литературе. Изведени закључци дају одговарајуће одговоре на све постављене циљеве и проблематику задату на почетку израде тезе. Стога је начин приказа и тумачења резултата истраживања од стране Комисије позитивно оцењен.</p>
<p>IX КОНАЧНА ОЦЕНА ДОКТОРСKE ДИСЕРТАЦИЈЕ:</p>
<p>Експлицитно навести да ли дисертација јесте или није написана у складу са наведеним образложењем, као и да ли она садржи или не садржи све битне елементе. Дати јасне, прецизне и концизне одговоре на 3. и 4. питање:</p>
<p>1. Да ли је дисертација написана у складу са образложењем наведеним у пријави теме Према оцени Комисије докторска дисертација је у потпуности написана у складу са образложењем наведеним у пријави теме.</p>
<p>2. Да ли дисертација садржи све битне елементе Докторска дисертација је написана у складу са принципима научно-истраживачког рада и садржи све релевантне елементе неопходне за овакву врсту рада: дефинисану тему истраживања, преглед постојећег стања у актуелној области, детаљан опис нумеричких експеримената, јасан и систематизован приказ резултата и њихове дискусије, списак коришћене литературе, и закључак.</p>
<p>3. По чему је дисертација оригиналан допринос науци Проблем развоја ефикасних метода за прорачун електронских особина материјала је важан научни проблем на граници рачунарске науке, примењене математике, физике, науке о материјалима и физичке хемије. CPM је пре рада на овој тези био метод који је имао потенцијал да се примењује и на веће системе који садрже неколико хиљада атома. Ипак, са тада постојећом имплементацијом CPM-а која је користила репрезентацију равних таласа, за такве примене су били неопходни суперрачунари са хиљадама процесорских језгара. Очекивало се да би имплементација CPM-а у базису Гаусијана могла имати знатно боље перформансе, али постојао је низ проблема које је било потребно решити да би се до тога дошло. У овој тези је представљена изазовна рачунарска имплементација CPM-а у базису Гаусијана. Најпре је представљена серијска имплементација, а затим и паралелна имплементација са посебним нагласком на нетривијалне кораке где је требало наћи оптималан начин за расподелу података по меморији, организацију комуникације између</p>

процеса и минимизовање понољених рачунања на различитим процесима. Тиме је решен низ проблема који су досад онемогућавали да се СРМ примењује на веће системе, што је резултовало тиме да се на релативно скромним кластерским ресурсима са неколико стотина процесорских језгара може вршити израчунавање система од неколико десетина хиљада атома. Развој и имплементација алгоритма који је то омогућио представља несумњиво оригиналан допринос науци, а очекује се да ће даља примена развијених рачунарских програма омогућити нова научна сазнања о конкретним полупроводничким материјалима.

4. Недостаци дисертације и њихов утицај на резултат истраживања
Комисија није уочила недостатке у докторској дисертацији који би имали утицај на изложене резултате истраживања и извођење закључака.

X ПРЕДЛОГ:

На основу укупне оцене дисертације, комисија предлаже:

На основу укупне оцене дисертације, увида у истраживачки рад кандидата, и сагласно свим претходно изнетим чињеницама, Комисија предлаже да се докторска дисертација прихвати, а кандидату одобри и закаже одбрана.

др Милош Рацковић,
редовни професор,
Природно-математички факултет,
Универзитет у Новом Саду,
Председник

др Срђан Шкрбић,
редовни професор,
Природно-математички факултет,
Универзитет у Новом Саду,
ментор

др Антун Балаж,
научни саветник,
Институт за физику у Београду,
Члан

др Ненад Вукмировић,
научни саветник,
Институт за физику у Београду,
ментор

др Милош Радовановић,
ванредни професор,
Природно-математички факултет,
Универзитет у Новом Саду,
Члан

НАПОМЕНА: Члан комисије који не жели да потпише извештај јер се не слаже са мишљењем већине чланова комисије, дужан је да унесе у извештај образложење односно разлоге због којих не жели да потпише извештај.