

Recenzja rozprawy doktorskiej

mgr. inż. Bartosza Bosaka

zatytułowanej:

*Methods for modelling and assessing confidence of
heterogeneous multiscale simulations in high-performance computing environments*

1. Problem badawczy i jego znaczenie

Jaki jest najważniejszy problem rozważany w rozprawie?

Wieloskalowe symulacje obliczeniowe stanowią obecnie jedno z kluczowych narzędzi badań naukowych i inżynierskich, umożliwiając modelowanie złożonych zjawisk zachodzących jednocześnie w różnych skalach czasowych i przestrzennych. Wraz ze wzrostem złożoności takich modeli oraz rosnącymi wymaganiami dotyczącymi ich wiarygodności, coraz większego znaczenia nabierają zagadnienia związane z efektywnym wykorzystaniem do modelowania środowisk wysokowydajnych oraz systematyczną oceną niepewności (ang. uncertainty) i jakości uzyskiwanych wyników.

Najważniejszym problemem rozważanym w rozprawie jest opracowanie i udoskonalenie strategii obliczeniowych dla wieloskalowych symulacji oraz procedur weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (ang. Verification, Validation and Uncertainty Quantification, VVUQ), które pozwalają usprawnić ich przygotowanie i wykonanie w środowiskach HPC, a jednocześnie zwiększyć wiarygodność (zaufanie do) uzyskiwanych wyników.

Problem ten dotyczy w szczególności praktycznych aspektów integracji heterogenicznych modeli obliczeniowych, automatyzacji złożonych przepływów obliczeniowych oraz skalowalnego wykonywania kosztownych procedur VVUQ, które jak dotychczas stanowią istotną barierę w szerokim stosowaniu wieloskalowych symulacji w zastosowaniach naukowych i inżynierskich.

Czy ma on charakter naukowy?

Opracowanie strategii obliczeniowych dla wieloskalowych symulacji oraz towarzyszących im procedur weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) ma jednoznacznie charakter naukowy. Dotyczy ono badań nad metodami i strategiami obliczeniowymi o charakterze metodologicznym, wykraczającymi poza pojedyncze zastosowania czy konkretne implementacje.

Przedstawione w rozprawie podejście bazuje na analizie istniejącego stanu wiedzy, formułowaniu uogólnialnych koncepcji oraz ich weryfikacji w drodze systematycznych badań eksperymentalnych prowadzonych w środowiskach HPC. Wyniki mają charakter uniwersalny i mogą być stosowane w różnych dziedzinach nauki i inżynierii, co potwierdza naukowy charakter rozważanego problemu.

Czy ma on znaczenie praktyczne?

Wieloskalowe symulacje obliczeniowe oraz procedury weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) są coraz częściej wykorzystywane w rzeczywistych zastosowaniach naukowych i inżynierskich, jednak ich praktyczne wykorzystanie w środowiskach HPC jest ograniczane przez wysoką złożoność oraz duże koszty obliczeniowe, a także trudności w automatyzacji i skalowaniu obliczeń.

Przedstawione w rozprawie metody i strategie obliczeniowe, obejmujące w szczególności podejście oparte na orkiestracji złożonych przepływów obliczeniowych, automatyzację kampanii weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) oraz ich skalowalne wykonywanie w heterogenicznych środowiskach wieloskalowych, odpowiadają bezpośrednio na wskazane ograniczenia. Zaproponowane rozwiązania umożliwiają bardziej efektywne przygotowanie, uruchamianie i zarządzanie wieloskalowymi symulacjami złożonymi z wielu współpracujących modeli obliczeniowych.

Ich praktyczna użyteczność została potwierdzona poprzez implementację w postaci rzeczywistych narzędzi programowych oraz zastosowanie i ocenę w ramach konkretnych projektów badawczych, a także rzeczywistych aplikacji obliczeniowych je wspierających¹ oraz produkcyjnych infrastruktur obliczeniowych², co dowodzi możliwości ich wykorzystania poza środowiskiem eksperymentalnym.

2. Wkład autora

Jaki jest najważniejszy wkład autora opisywane w rozprawie?

Przedstawiona rozprawa stanowi wynik wieloletnich, spójnych badań autora prowadzonych na styku wieloskalowych symulacji obliczeniowych, metod oceny niepewności oraz wysokowydajnych środowisk obliczeniowych. Jej istotą nie jest pojedyncze, odizolowane rozwiązanie algorytmiczne, lecz całościowe podejście do problemu praktycznego wykonywania i oceny złożonych symulacji w warunkach rzeczywistych systemów HPC.

Przedstawiony przez autora zakres wkładu autora w rozwój metod i narzędzi obliczeniowych oraz sformułowane w rozprawie tezy dotyczące osiągniętych rezultatów należy uznać za trafne i adekwatne do zaprezentowanych wyników.

W ramach rozprawy autor zaproponował i zweryfikował metody oraz strategie obliczeniowe umożliwiające integrację heterogenicznych modeli wieloskalowych z zaawansowanymi procedurami analizy wyników, a następnie ich skalowalne i zautomatyzowane wykonywanie w środowiskach wieloskalowych. W szczególności praca obejmuje rozwiązania z zakresu orkiestracji złożonych przepływów obliczeniowych, automatyzacji kampanii obliczeniowych oraz efektywnego wykorzystania zasobów w heterogenicznych infrastrukturach obliczeniowych. Wkład ten ma charakter systemowy i metodologiczny, a jego oryginalność polega na świadomej integracji oraz metodycznym zastosowaniu istniejących koncepcji naukowych w nowym, złożonym kontekście obliczeń wieloskalowych.

Szczególnie istotnym elementem pracy jest zaprojektowanie i implementacja mechanizmów automatyzacji oraz zarządzania złożonymi przepływami obliczeniowymi, obejmującymi zarówno wieloskalowe symulacje, jak i kosztowne obliczeniowo analizy niepewności. Zaproponowane rozwiązania zostały zweryfikowane w praktyce poprzez implementację w postaci dojrzałych narzędzi programowych oraz ich zastosowanie i ocenę w ramach rzeczywistych aplikacji obliczeniowych¹, realizowanych na produkcyjnych systemach superkomputerowych².

¹ W rozprawie omówiono m.in. następujące przykłady aplikacji wieloskalowych: *Cell-Based Blood Flow*, *Binding Affinity Calculator*, *Fusion*, *Air Pollution*, *Epidemiology*, *Renewable Energy Sources*.

² W rozprawie przedstawiono badania realizowane z wykorzystaniem produkcyjnych systemów superkomputerowych, takich jak *Eagle*, *SuperMUC*, *ARCHER2* oraz *Cartesius*.

Na podkreślenie zasługuje również fakt, że przedstawione wyniki znalazły odzwierciedlenie w bogatym dorobku publikacyjnym autora, obejmującym prace opublikowane w wiodących międzynarodowych czasopiśmie i materiałach konferencyjnych. Świadczy to nie tylko o wysokiej jakości merytorycznej rozprawy, lecz także o jej istotnym wkładzie w rozwój metod i narzędzi wspierających wieloskalowe symulacje obliczeniowe w środowiskach HPC.

3. Poprawność

Przedstawione w rozprawie tezy i wyniki badań są godne zaufania i znajdują właściwe uzasadnienie w zaprezentowanym materiale badawczym. Autor konsekwentnie opiera swoje wnioski na przeprowadzonych analizach oraz wynikach eksperymentów, które zostały zaplanowane i wykonane w sposób rzetelny oraz adekwatny do charakteru rozważanych problemów. Na szczególne podkreślenie zasługuje jakość zaprojektowanych eksperymentów, analiza uzyskanych danych empirycznych oraz dojrzałość opracowanego oprogramowania prototypowego.

Z punktu widzenia poprawności merytorycznej nie stwierdzono błędów, które podważałyby przedstawione wyniki lub wnioski rozprawy. Pewnym ograniczeniem jest fakt, że szczegółowa ocena zaproponowanych metod została przeprowadzona dla wybranych heterogenicznych modeli wieloskalowych oraz scenariuszy obliczeniowych obejmujących złożone, sprzężone przepływy obliczeniowe, co jednak jest naturalne przy tego typu złożonych badaniach i nie wpływa na ogólną wiarygodność uzyskanych rezultatów.

4. Wiedza kandydata

Istniejący stan wiedzy oraz jego odniesienie do prowadzonych badań zostały omówione w kilku kluczowych rozdziałach rozprawy, w szczególności w rozdziałach poświęconych podstawom wieloskalowego modelowania, metodom weryfikacji, walidacji i kwantyfikacji niepewności (VVUQ) oraz zagadnieniom związanym z wykonywaniem złożonych przepływów obliczeniowych w środowiskach wysokowydajnych. Rozdziały te w sposób uporządkowany wprowadzają podstawowe pojęcia, klasyfikacje i podejścia badawcze, stanowiąc solidne tło teoretyczne dla dalszej części pracy.

W omawianych częściach rozprawy poruszone zostały zagadnienia z zakresu informatyki technicznej, obejmujące m.in. modelowanie i symulację komputerową, obliczenia wieloskalowe i wieloskalowe, systemy i środowiska HPC, zarządzanie przepływami obliczeniowymi, a także metody analizy niepewności i jakości wyników obliczeń. Zakres ten potwierdza szeroką i aktualną wiedzę kandydata w obszarze informatyki technicznej i telekomunikacji, ze szczególnym uwzględnieniem systemów i środowisk HPC.

Jakość rozdziałów przedstawiających stan wiedzy kandydata należy ocenić wysoko. Są one spójne, poprawne merytorycznie i dobrze osadzone w aktualnym dorobku naukowym, a ich zakres jest adekwatny do charakteru i celów rozprawy. Autor nie ogranicza się tylko do prostego przeglądu literatury, lecz umiejętnie wykorzystuje omawiane koncepcje jako punkt wyjścia do dalszych badań własnych.

Bibliografia rozprawy jest obszerna i obejmuje prace opublikowane w renomowanych międzynarodowych czasopiśmie oraz materiałach konferencyjnych, w tym pozycje uznawane za fundamentalne dla omawianej tematyki, jak również prace najnowsze. Dobór literatury należy uznać za trafny i w dużej mierze kompletny; nie stwierdzono istotnych braków, które mogłyby wpływać na ocenę stanu wiedzy przedstawionego w rozprawie.

Całość przedstawionego materiału, zarówno w części przeglądowej, jak i w dalszych rozdziałach pracy, stanowi przekonujący argument potwierdzający, że kandydat posiada ugruntowaną ogólną wiedzę w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja oraz sprawnie porusza się w jej kluczowych obszarach badawczych.

5. Inne uwagi

1. Pojęcie „zaufania” do wyników symulacji, będące jednym z kluczowych elementów rozprawy, nie zostało sformułowane w postaci jednoznacznej, formalnej definicji ani bezpośrednio powiązane z mierzalną wielkością. W pracy zaufanie jest w naturalny sposób utożsamiane z poprawnością i kompletnością procedur VVUQ, stopniem automatyzacji oraz powtarzalnością obliczeń, jednak bardziej formalne ujęcie tego pojęcia mogłoby wzmocnić warstwę konceptualną rozprawy oraz ułatwić interpretację i porównywanie uzyskiwanych wyników.
2. W rozprawie procedury VVUQ obejmują różne źródła niepewności związane z modelem i jego parametrami, jednak brak jest wyraźnego, systematycznego rozróżnienia pomiędzy niepewnością epistemiczną a niepewnością o charakterze losowym (aleatorycznym). Bardziej jednoznaczne rozgraniczenie tych kategorii mogłoby wzmocnić warstwę metodologiczną pracy oraz ułatwić interpretację wyników w kontekście tego, które aspekty niepewności mogą być zredukowane poprzez dodatkowe informacje lub modelowanie, a które z nich mają charakter nieredukowalny.
3. W rozprawie przyjęto założenie porównywalności i stabilności wyników uzyskiwanych w powtarzalnych przebiegach symulacji oraz kampanii VVUQ, co jest typowym założeniem w analizach wielkoskalowych. Nie poświęcono jednak większej uwagi potencjalnemu wpływowi niedeterministycznego charakteru współczesnych środowisk HPC, wynikającego m.in. zakłóceń systemowych, współdzielenia zasobów czy zmienności harmonogramowania, na powtarzalność wyników oraz ich agregację w ramach procedur VVUQ.

6. Podsumowanie

Biorąc pod uwagę opinie zaprezentowane w poprzednich punktach i wymagania zdefiniowane przez art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (z późniejszymi zmianami)³ moja ocena rozprawy pod względem trzech podstawowych kryteriów jest następująca:

A. Czy rozprawa zawiera oryginalne rozwiązanie problemu naukowego? (wybierz jedną opcję stawiając znak X)

<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

B. Czy po przeczytaniu rozprawy zgadzasz się, że kandydat posiada ogólną wiedzę teoretyczną w dyscyplinie Informatyka techniczna i telekomunikacja?

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

C. Czy kandydat posiada umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej?

³ <http://isap.sejm.gov.pl/isap.nsf/DocDetails.xsp?id=WDU20190000276>

<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Zdecydowanie TAK	Raczej TAK	Trudno powiedzieć	Raczej NIE	Zdecydowanie NIE

Przedstawiona rozprawa doktorska stanowi spójne i dojrzałe opracowanie naukowe, podejmujące istotny i aktualny problem związany z wykonywaniem oraz oceną wiarygodności wieloskalowych symulacji obliczeniowych w środowiskach wysokowydajnych. Pomimo wskazanych uwag o charakterze konceptualnym i metodologicznym, które nie podważają poprawności ani wartości merytorycznej pracy, rozprawa w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja.

Autor wykazał się bardzo dobrą znajomością stanu wiedzy, umiejętnością samodzielnego prowadzenia badań naukowych oraz zdolnością do formułowania i weryfikowania złożonych koncepcji badawczych w wymagającym środowisku obliczeniowym. Na szczególne podkreślenie zasługuje wysoki poziom dorobku publikacyjnego autora, obejmujący prace opublikowane w wiodących międzynarodowych czasopismach, takich jak *Future Generation Computer Systems* (IF: 6.1, 140 pkt ministerialnych) oraz *Journal of Computational Science* (IF: 3.7, 100 pkt ministerialnych), a także w materiałach renomowanych konferencji naukowych, m.in. cztery publikacje zaprezentowane na konferencji *International Conference on Computational Science* (140 pkt ministerialnych), co świadczy o istotnym wkładzie uzyskanych wyników w rozwój omawianej dziedziny.

W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie rozprawy do publicznej obrony oraz rekomenduję jej wyróżnienie.

Jerzy Proficz

