

Процедура № ФЕД 56-НС1-028



РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационен труд
за придобиване на образователната и научна степен "доктор" в
област на висше образование – **5. Технически науки**
професионално направление – **5.3. Комуникационна и компютърна
техника**

Автор: **маг. Емилия Хаим Пардо**

Тема: „РАЗПАРАЛЕЛЯВАНЕ НА АЛГОРИТЪМ NEEDLEMAN-
WUNSCH ВЪРХУ ГРАФИЧНИ УСКОРИТЕЛИ”

Рецензент: **доц. д-р инж. Иван Стефанов Станков,**
катедра Киберсигурност, Технически университет София

Настоящата рецензия представям в качеството ми на член на научното жури, назначено със Заповед № ОЖ-5.3-17 от 16.04.2025 г. на Ректора на Технически университет - София.

1. Актуалност на разработвания в дисертационния труд проблем

Дисертационният труд на маг. Емилия Хаим Пардо на тема „Разпаралеляване на алгоритъм Needleman-Wunsch върху графични ускорители” е представен в 4 глави с обем 134 страници, разгледани са 91 литературни източници.

Характерна особеност на биоинформатиката е способността ѝ да обработва и интерпретира големи обеми биологични данни чрез създаването на алгоритми и специализирани софтуерни инструменти. Тези инструменти намират приложение в области като геномното сглобяване, идентифицирането на кодиращи последователности, предсказването на структурата на протеини, молекулното докиране и анализа на мрежи от биологични взаимодействия. Чрез интеграцията на изкуствен интелект (AI), биостатистика и изчислителни методи, биоинформатиката не само подпомага разбирането на сложни биологични системи, но и допринася значително за напредъка на персонализираната медицина и биомедицинските науки. Алгоритмите за обработка на големи биологични данни се нуждаят от специализиран хардуер за ускоряване времето на обработката им. CUDA технологията, създадена от NVIDIA, представлява паралелна изчислителна платформа, която използва графични процесори (GPU) за изпълнение на задачи извън типичната графична обработка – подход, известен като GPGPU (General-Purpose computing on Graphics Processing Units).

Благодарение на способността си да изпълнява множество операции едновременно, CUDA се използва широко в биоинформатиката за ускоряване на изчисленията, като анализ на геномни данни, молекулно моделиране и симулации на биологични системи. Технологията поддържа езика за програмиране като C и C++, и предлага набор от абстракции за управление на нишки, памет и синхронизация, което улеснява разработването на такъв тип приложения. Чрез ефективно използване на различни видове памет – глобална, споделена, локална и текстурна – програмистите могат да оптимизират своите алгоритми в съответствие с изискванията на съвременните биоинформатични изследвания.

2. Степен на познаване състоянието на проблема и творческа интерпретация на литературния материал

Целта на настоящия дисертационен труд е да се разгледа и анализира възможността за оптимизиране на алгоритъма Needleman-Wunsch чрез неговото изпълнение върху графичен ускорител (GPU) от типа nVIDIA, използвайки програмния модел CUDA C.

Задачите за постигане на тази цел са поставени по следния начин: да се анализира специфичната архитектура на CUDA и възможностите за едновременно изчисление на множество операции от различни нишки; да се изследва прилагането на този подход към алгоритмите за динамично програмиране, където всяка клетка в матрицата зависи от предходните съседни клетки; да се представят методи за паралелизация на алгоритъма Needleman-Wunsch; да се демонстрира как използването на GPU може да подобри производителността на алгоритъма Needleman-Wunsch чрез паралелна обработка; да се проведат експерименти с последващ анализ на получените резултати и да се формулират изводи и заключения за ефективността на изследваните подходи.

Извършен е подробен анализ на парадигмите на паралелното програмиране и обзор и анализ на CUDA архитектурата, GPU концепцията, видовете ядра в структурите, възможностите на графичните устройства. Следват глави, посветени на софтуерния инструмент BioPoolSelect и алгоритъма Needleman-Wunsch. Изследванията са насочени към функционалностите, процеса на работа и приложението на софтуера BioPoolSelect, като са представени сравнителни геномни анализи на различни дегенеративни заболявания. Тези резултати са важни за развитието на нови терапевтични подходи. Наред със запознаване с различните възможности на алгоритъма Needleman-Wunsch в дисертацията се търсят подходи за неговото разпаралеляване със средствата на разглежданата CUDA архитектура - използване на графичен ускорител NVIDIA и CUDA C и антидиагонален достъп в матрицата. Описват се експерименти в средата

BioPoolSelect и с разпаралеляването на алгоритъма Needleman-Wunsch, като резултатите от експериментите са анализирани и включени в приносите към дисертацията.



В работата са използвани голям брой литературни източници - 91, като преобладаващата част са от водещи специалисти в областта. Литературните източници са предимно нови, около 70% са публикувани след 2020 г. Застъпени са също така и основополагащите в тази област автори от недалечното минало. От списъкът и цитиранията в текста се вижда, че авторът е много добре запознат със съвременните постижения на водещи учени в областта.

Въз основа на извършения анализ и направените изводи е формулирана целта на дисертационната работа – „Разпаралеляване на алгоритъм Needleman-Wunsch върху графични ускорители“.

Коректно са дефинирани и основните задачи за постигането ѝ:

- Да се разгледа и анализира възможността за оптимизиране на алгоритъма Needleman-Wunsch чрез неговото изпълнение върху графичен ускорител (GPU) с карта nVIDIA, съдържаща архитектура CUDA.
- Да се проучи специфичната архитектура на CUDA(използвано от графичното устройство) и как е организирано едновременното изчисление на множество операции от множеството нишки.
- Да се изследва и подчертае трудността от прилагането на този подход към алгоритмите за динамично програмиране, при които всеки елемент от матрицата зависи от предходните съседни такива.
- Да се проучи техника за разпаралеляване на алгоритъма Needleman-Wunsch, като методите за нея преодоляват тази трудност, като например метода с антидиагонален достъп до елементите на матрицата.
- Да се проведе експеримент как използването на графичен ускорител значително да подобри производителността на алгоритъма Needleman-Wunsch чрез използване на множество нишки.

3. Съответствие на избраната методика на изследване с поставената цел и задачи на дисертационния труд

Представените в работата изследвания са осъществени със съвременни и адекватни за решаване на поставените задачи методи и хардуерни средства. Приложени са методи за моделиране, статистическа обработка и анализ на експерименталните резултати, планиране на експериментите и оптимизиране, посредством изследвания.

Доказана е технологичната възможност за реализиране на алгоритъма с паралелна оптимизация. Обоснован е нов вариант на Needleman-Wunsch, при който разпаралеляването става с антидиагонали и този метод е обоснован в дисертацията. Предложен е работещ метод за ефективна паралелна реализация на алгоритъма на Needleman-Wunsch върху графичен процесор. Налага се прилагането на антидиагонален (Wavefront) подход, поради присъщите на алгоритъма зависимости между матричните елементи, които създават предпоставки за многонишково изпълнение. Алгоритъмът изисква за изчисляването на стойността на дадена клетка в матрицата наличието на резултатите от три съседни клетки – горна, лява и горна ляво-диагонална. Тези зависимости възпрепятстват прилагането на класически редово или колонно ориентирани стратегии за обход, тъй като те не позволяват едновременна обработка без конфликти при четене и запис на данни. С нарастването на дължината на антидиагоналите към централната част на матрицата се увеличава и броят на независимите задачи, което позволява използване на все по-голяма част от наличните CUDA ядра. Това води до висока степен на паралелизъм и оптимално използване на изчислителния капацитет на GPU. Тъй като графичните процесори са специализирани за изпълнение на голям брой операции с плаваща запетая, антидиагоналният подход се явява оптимална стратегия за постигане на максимална производителност при паралелна реализация на алгоритъма Needleman-Wunsch. Тези заключения многократно са посочвани в дисертационния труд.

4. Кратка аналитична характеристика и оценка на достоверността на алгоритъма

Усвоените и използвани от автора методи и средства за аналитични и експериментални изследвания свидетелстват за постигнатите изисквания в образователен аспект и гарантират качество и достоверност на получените резултати.

5. Приноси на дисертационния труд

Работата е с ясно изразен научно-приложен характер.

Представени са 5 приноси, 3 научно-приложни и 2 приложни приноси.

Научно – приложни:

Принос 1

Създадена е оптимизация на паралелна версия на алгоритъма на Needleman-Wunsch за графични процесори (GPU) с въвеждане и обосновка на използването

на антидиагоналния подход (Wavefront) за ефективно паралелизиране на изчисленията.



Принос 2

Въведен е индекс на изравняване на последователности. Дефинира нова метрика, която измерва разликата между коефициентите на сходство преди и след подравняването, което може да помогне за по-доброто разбиране на връзката между сходството на последователностите и ефективността на подравняването.

Принос 3

Разработено е ръководство по дисциплината "Програмиране на съвременни хетерогенни архитектури", което запознава студентите с архитектурните характеристики на хетерогенните изчислителни системи, модели за паралелно програмиране върху различни архитектурни компоненти, техники за разпределяне на натоварването и ефективно управление на памет и ресурси.

Приложни:

Принос 4

Разработено е ръководство по дисциплината "Програмиране на съвременни хетерогенни архитектури", което запознава студентите с архитектурните характеристики на хетерогенните изчислителни системи, модели за паралелно програмиране върху различни архитектурни компоненти, техники за разпределяне на натоварването и ефективно управление на памет и ресурси.

Принос 5

Представен е сравнителен анализ на геноми. Софтуерът BioPoolSelect автоматизира процеса на обработка на големи геномни файлове, като прави възможно по-бързо и ефективно сравнение на геномни данни.

6. Оценка за степента на личното участие на дисертанта в приносите

Считам, че постигнатите резултати са дело на докторанта под научното и методическото ръководство на неговия ръководител. Личното участие в разработката и провеждането на експерименталните изследвания е несъмнено. Доказателство за това са публикациите на докторанта.

7. Преценка на публикациите по дисертационния труд

Във връзка с дисертационния труд са представени 4 публикации, от които 3 са в съавторство с научния ръководител на докторанта а 1 е самостоятелна. Списъкът с публикации като брой, съдържание и качество, удовлетворява изискванията, посочени в Правилника за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в Технически университет – София. Публикациите са в международни научни конференции индексирани в Scopus и Web of Science. Цитирания на публикации по дисертационния труд не са представени.

8. Оценка на съответствието на автореферата с изискванията за изготвянето му

Авторефератът е разработен в обем от 41 страници, според изискванията за изготвянето му. Той отразява адекватно основните акценти и резултати, постигнати в дисертационния труд.

9. Забележки по дисертационния труд

Хубаво е приносите да бъдат формулирани по-кратко в рамките на едно изречение. Докторантът маг. Емилия Пардо е спазила изискванията за написването на дисертационния си труд.

10. Заключение

Считам, че представеният дисертационен труд отговаря на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България.

Постигнатите резултати ми дават основание да дам **положителна** оценка и да предложа на уважаемото Научно жури да присъди образователната и научна степен „**доктор**” на маг. Емилия Хаим Пардо в: област на висше образование - **5. Технически науки** ; професионално направление - **5.3 Комуникационна и компютърна техника**.

05.08.2025 г.

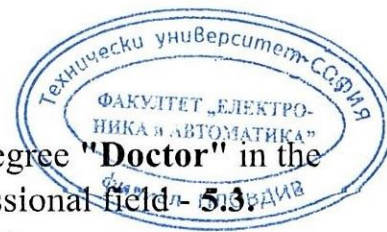
Подпис:

/доц.

д-р инж. И. Станков



REVIEW



of dissertation for obtaining the educational and scientific degree **"Doctor"** in the field of higher education - **5. Technical Sciences** professional field - **5.3. Communication and computer engineering**

Author: **Emilia Haim Pardo**

Subject: "A PARALLELIZATION OF THE NEEDLEMAN-WUNSCH ALGORITHM ON GRAPHICS ACCELERATORS"

Reviewer: **Assoc. Prof. Dr. Eng. Ivan Stefanov Stankov**,
Department of Cyber Security, Technical University of Sofia

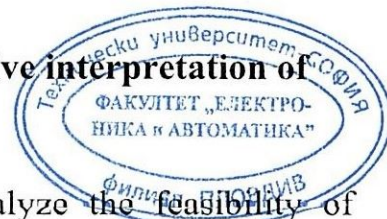
I submit this review as a member of the scientific jury appointed by Order No. OJ-5.3-17 of 16.04.2025 of the Rector of the Technical University - Sofia.

1. Relevance of the problem developed in the dissertation

The dissertation thesis at mag. Emilia Haim Pardo at topic "Parallelization of the Needleman-Wunsch algorithm on graphics accelerators" is presented in 4 chapters of 134 pages.

A characteristic feature of bioinformatics is its ability to process and interpret large volumes of biological data through the creation of algorithms and specialized software tools. These tools have applications in areas such as genome assembly, coding sequence identification, protein structure prediction, molecular docking and the analysis of biological interaction networks. Through the integration of artificial intelligence (AI), biostatistics, and computational methods, bioinformatics not only aids the understanding of complex biological systems, but also contributes significantly to the advancement of personalized medicine and biomedical sciences. Algorithms for processing big biological data need specialized hardware to speed up their processing time. CUDA technology, created by NVIDIA, is a parallel computing platform that uses graphics processing units (GPUs) to perform tasks beyond typical graphics processing - an approach known as GPGPU (General-Purpose computing on Graphics Processing Units). Due to its ability to perform multiple Operations simultaneously, CUDA is widely used in bioinformatics to speed up computations such as genomic data analysis, molecular modeling, and biological systems simulations. The technology supports programming languages such as C and C++, and offers a set of abstractions for thread management, memory and synchronization, making it easy to develop these types of applications. By efficiently using different types of memory - global, shared, local and texture - programmers can optimize their algorithms according to the requirements of modern bioinformatics research.

2. Knowledge State degree of the problem and creative interpretation of literary material



The aim of this dissertation is to examine and analyze the feasibility of optimizing the Needleman-Wunsch algorithm by executing it on an nVIDIA type graphics accelerator (GPU) using the CUDA C programming model.

The tasks to achieve this goal are set as follows: to analyze the specific architecture of CUDA and the possibilities of simultaneous computation of multiple operations from different threads; to investigate the application of this approach to dynamic programming algorithms, where each cell in the matrix depends on the preceding neighboring cells; to present methods for parallelization of the Needleman-Wunsch algorithm; to demonstrate how the use of GPUs can improve the performance of the Needleman-Wunsch algorithm through parallel processing; to conduct a detailed analysis of parallel programming paradigms and a review and analysis of the CUDA architecture, GPU concept, types of cores in the architectures, capabilities of graphics devices. Chapters on the BioPoolSelect software tool and the Needleman-Wunsch algorithm follow. Research is focused on the functionalities, workflow and application of the BioPoolSelect software, and comparative genomic analyses of different degenerative diseases are presented. These results are important for the development of new therapeutic approaches. Along with introducing the different capabilities of the Needleman-Wunsch algorithm, the thesis seeks approaches to its parallelization with the means of the CUDA architecture under consideration – using NVIDIA graphics accelerator and CUDA C and anti-diagonal access in the matrix. Experiments in the BioPoolSelect environment and with the Needleman-Wunsch algorithm parallelization are described, with the results of the experiments are analyzed and included in the contributions to this dissertation.

A large number of references, 91, have been used in this work, with the vast majority from leading experts in the field. The literature sources are mostly new, about 70% were published after 2020. The seminal authors in the field from the recent past are also covered. It is evident from the list and in-text citations that the author is very familiar with the current achievements of leading scholars in the field. Based on the analysis and conclusions drawn, the aim of the thesis, "Parallelization of Needleman-Wunsch algorithm on graphics accelerators", is formulated.

The main tasks for its achievement are also correctly defined:

- To consider and analyze the possibility of optimizing the Needleman-Wunsch algorithm by running it on a graphics accelerator (GPU) with an nVIDIA card containing CUDA architecture.
- To investigate the specific CUDA architecture(used by the GPU) and how the concurrent computation of multiple operations from multiple threads is organized.

- Explore and highlight the difficulty of applying this approach to dynamic programming algorithms, where each element of the matrix depends on the previous adjacent ones.
- To investigate a parallelization technique for the Needleman-Wunsch algorithm, with methods to overcome this difficulty, such as the method with antidiagonal access to matrix elements.
- Conduct an experiment on how the use of a graphics accelerator can significantly improve the performance of the Needleman-Wunsch algorithm by using multiple threads.

3. Relevance of the chosen research methodology to the stated aim and objectives of the thesis

The research presented in this thesis has been carried out using state-of-the-art methods and hardware adequate for the tasks at hand. Methods of modeling, statistical processing and analysis of experimental results, planning of experiments and optimization through researches have been applied.

The technological feasibility of implementing the algorithm with parallel optimization is demonstrated. A new variant of Needleman-Wunsch is justified, in which parallelization is done with antidiagonals and this method is justified in the thesis. A workable method for efficient parallel implementation of the Needleman-Wunsch algorithm on a GPU is proposed. An antidiagonal (Wavefront) approach is imposed due to the inherent dependencies between the matrix elements of the algorithm, which create prerequisites for multi-threaded execution. The algorithm requires the presence of the results of three adjacent cells - top, left and top-left-diagonal - to calculate the value of a cell in the matrix. These dependencies preclude the application of classical row- or column-oriented traversal strategies, as they do not allow simultaneous processing without read and write data conflicts. As the length of the antidiagonals to the central part of the matrix increases, so does the number of independent tasks, allowing the use of an increasing fraction of the available CUDA cores. This leads to a high degree of parallelism and optimal utilization of the GPU computational capacity. Since GPUs are specialized to perform a large number of floating-point operations, the antidiagonal approach appears to be an optimal strategy to maximize performance in a parallel implementation of the Needleman-Wunsch algorithm. These conclusions are repeatedly pointed out in the dissertation.

4. Brief analytical characterization and evaluation of the algorithm's reliability

The analytical and experimental research methods and tools mastered and used by the author testify to the educational requirements achieved and guarantee the quality and reliability of the results obtained.

5. Contributions of the dissertation



The dissertation work has a clearly expressed scientific and applied character. There are 5 contributions, 3 scientific and 2 applied contributions. Scientific and applied:

Scientific:

Contribution 1

An optimization of a parallel version of the Needleman-Wunsch algorithm for graphics processing units (GPUs) with an introduction and justification of the use of 5 of the antidiagonal approach (Wavefront) for efficient parallelization of computations.

Contribution 2

An index of sequence alignment is introduced. It defines a new metric that measures the difference between pre- and post-alignment similarity coefficients, which can help to better understand the relationship between sequence similarity and alignment performance.

Contribution 3

It is developed a tutorial on "Programming Modern Heterogeneous Architectures" that introduces students to architectural characteristics of heterogeneous computing systems, models for parallel programming on different architectural components, workload allocation techniques, and efficient memory and resource management.

Applied:

Contribution 4

It is developed a tutorial for the course Programming Modern Heterogeneous Architectures that introduces students to the architectural characteristics of heterogeneous computing systems, models for parallel programming on different architectural components, workload allocation techniques, and efficient memory and resource management.

Contribution 5

A Comparative genome analysis is presented. The BioPoolSelect software automates the process of processing large genome files, enabling faster and more efficient comparison of genomic data.

6. Assessment of the degree of personal involvement of the dissertant in the contributions

I believe that the results achieved are the work of the PhD student under the scientific and methodological guidance of his supervisor. Personal involvement in the design and conduct of the experimental studies is unquestionable. The doctoral student's publications are proof of this.

7. Assessment of the publications on the thesis

Related with the dissertation work, 4 publications have been submitted in connection with the dissertation, 3 of which are co-authored with the PhD student's supervisor and 1 is independent. The list of publications in terms of number, content and quality satisfies requirements specified in the Regulations for the Acquisition of Scientific Degrees and Academic Positions at the Technical University of Sofia. The publications are in international scientific conferences indexed in Scopus and Web of Science. Citations of publications on the thesis are not presented.

8. Assessment of the compliance of the abstract with the requirements for its preparation

The abstract has been developed in 41 pages according to the requirements for its preparation. It adequately reflects the main points and results achieved in the thesis.

9. Comments on the thesis

It would be good to formulate the contributions more concisely within one sentence. I believe that the PhD student, Mag. Emilia Pardo, has complied with the requirements for writing her dissertation.

10. Conclusion

I believe that the submitted dissertation meets the requirements of the Law on the Development of Academic Staff in the Republic of Bulgaria. The achieved results give me the grounds to give a **positive evaluation** and to propose to the esteemed Scientific Jury to award the degree of Doctor of Education and Science to Emilia Haim Pardo in the field of higher education - **5. Technical sciences; professional field - 5.3 Communication and computer engineering.**

05.08.2025 г.

Signature:
/Assoc. Prof. Dr. Eng. Ivan Stankov/

