

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

СТРУЧНОМ ВЕЋУ ЗА ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКЕ НАУКЕ
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

*Извештај саставио
Др. Ђорђевић*

ИЗВЕШТАЈ КОМИСИЈЕ О ОЦЕНИ УРАЂЕНЕ
ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу одржаној 18. 11. 2015. године, одлуком број 1110/XIII-1, а на предлог Института за математику и информатику Факултета, одређени смо у Комисију за оцену и одбрану докторске дисертације под насловом

„Развој и анализа метода паралелизације вишескалних модела мишића“

Кандидата **Ане Капларевић-Малишић**, магистра информатичких наука, асистента Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу.

На основу приложене документације, као и личног увида у рад кандидата, подносимо Наставно-научном већу следећи

ИЗВЕШТАЈ

Докторска дисертација „Развој и анализа метода паралелизације вишескалних модела мишића“ написана је на 114 страна и садржи следеће делове:

- 1) Сажетак у коме је дат кратак приказ читаве докторске дисертације
- 2) Сажетак (*Summary*) докторске дисертације на енглеском језику
- 3) Садржај
- 4) Списак слика
- 5) Списак табела
- 6) Листа скраћеница
- 7) Увод
- 8) Главу под насловом „Вишескално моделирање у биолошким системима“
- 9) Главу под насловом „Математичке основе рачунарског моделирања мишића“
- 10) Главу под насловом „Биомеханички модели мишића“
- 11) Главу под насловом „Методи паралелизације програмског кода“
- 12) Главу под насловом „Систем за дистрибуирано и паралелно извршавање двоскалних симулација мишића“
- 13) Главу под насловом „Употреба феноменолошког модела у оптимизацији распоређивања“
- 14) Главу под насловом „Резултати и дискусија“
- 15) Закључна разматрања о употребним вредностима и могућим побољшањима

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПР. АМЛ. БР.	11.01.2016
Орг. јед.	01
05	40/8 - -

- 16) Библиографију
 - 17) Биографију кандидата
 - 18) Прве стране научних радова у којима су објављени резултати из дисертације
- Дисертација садржи 52 слике, 6 табела и 83 библиографске јединице.

1. Преглед садржаја урађене дисертације

У уводу је изложена мотивација за израду дисертације, циљеви којима се тежило током њене израде, као и полазне хипотезе. Као циљ дисертације, кандидат је поставио дефинисање методологије за развој ефикасног вишескалног модела мишића, и, у складу са њом, развој софтверске платформе за дистрибуирано извршавање симулације мишића у хетерогеном рачунарском окружењу. Као кључне особине платформе кандидат је дефинисао преносивост и чврсто скалирање, који се обезбеђују:

- употребом, универзалних модела паралелизације, где год је то могуће;
- прилагођавањем хетерогеној природи ресурса са аспекта брзине рада и меморијских капацитета извршних јединица (процесорских језгара, графичких процесора, ...);
- издвајањем доменског знања о моделу и његовом употребом у циљу ефикаснијег искоришћења рачунарских ресурса.

Кандидат наглашава да се методологија развија и тестира у контексту конкретног двоскалног модела скелетних мишића, где је на макро скали мишић моделиран методом коначних елемената, а механичке карактеристике материјала у интеграционим тачкама се одређују молекуларним моделом мишићне контракције.

У уводу су постављене и следеће хипотезе:

1. Паралелизацијом се може достићи убрзање од, минимум, два реда величине и тиме постићи практична употребљивост модела,
2. Могуће је издвајање доменског знања о конкретном моделу који се израчунава, на основу којег је могуће постићи бољи степен искоришћења расположивих рачунарских ресурса.

На крају увода је дат преглед садржаја дисертације.

У другој глави је уведен појам и дата дефиниција вишескалних биолошких система. Представљени су главни аспекти вишескалног моделирања, употреба, предности и мане. Велика рачунска комплексност је представљена као главна препрека дефинисању употребљивог вишескалног модела. Затим је дат приказ различитих приступа у превазилажењу проблема сложености вишескалних модела. На крају главе је дат преглед постојећих универзалних софтверских оквира за развој вишескалних модела.

Трећа глава даје преглед нумеричких алата који су коришћени у касније дефинисаном симулационом алгоритму двоскалног модела мишића. Описани су метод коначних елемената, а затим и метод карактеристика као методи за приближно решавање парцијалних диференцијалних једначина, заједно са одговарајућим итеративним алгоритмима.

У четвртој глави су дате основне информације о скелетним мишићима, са акцентом на опису начина генерисања силе и пратећих биохемијских процеса. Затим је дат преглед основних врста модела скелетних мишића, праћен прегледом постојећих

вишескалних модела описаних у литератури. Остатак главе садржи детаљан опис двоскалног модела мишића коришћеног у развоју софтверске платформе. Појединачно су описани макромодел и микромодел, а затим је објашњен начин њиховог упаривања. На крају поглавља дат је детаљан опис двоскалног симулационог алгорита.

Пета глава садржи преглед основних појмова паралелног рачунарства, детаљније описе касније коришћених паралелних програмских модела, а затим и метрике које се користе у анализи перформанси паралелних решења. На крају поглавља, дат је преглед постојећих решења паралелизације вишескалних модела скелетних мишића са освртом на приказане резултате анализе перформанси.

Шеста глава садржи детаљан опис развијене софтверске платформе. На почетку су изнети принципи по којима је креирана методологија паралелизације и развијано програмско решење. Затим је дат опис програмског модела, где је као основа употребљена паралелна парадигма господар-слуга, са моделом порука као начином комуникације између процеса. Процес Руководилац извршава прорачуне макромодела. Прорачуни микромодела се дистрибуирају од стране Руководиоца на све учесничке процесе, Руководиоца и Раднике. Сваки процес има сопствени извршни контекст, реализован од стране једног процесирајућег елемента. Процесирајући елемент представља или једна централна процесорска јединица или пар централне и графичке јединице. У наставку је дат детаљни приказ трослојне архитектуре софтверског решења. Посебна пажња је посвећена специфичном алгоритму распоређивања послова. Дат је детаљан опис начина на који се расподела послова усклађује са перформансама сваког процесирајућег елемента, као и рачунским комплексностима сваког микромодела појединачно. На крају главе, дати су дијаграми секвенци процеса Руководиоца и процеса Радника.

У седмој глави је представљен начин стицања доменског знања о дефинисаном двоскалном моделу мишића. Дефинисана је методологија којом се врши процена рачунске комплексности микромодела задате двоскалне симулације, које представљају део улазних података алгоритма расподеле. Описан је принцип рада *PhenoTip*-а алата, као њене имплементације.

Осма глава садржи резултате анализе перформанси развијене платформе, као и алата за процену комплексности микромодела. У првом делу овог поглавља приказани су резултати емпиријске анализе којом су испитиване ефикасност и скалабилност развијеног решења у различитим конфигурацијама извршног окружења, при чему су тестови спроведени на вештачким моделима који имају хомогену структуру и готово униформно понашање елемената модела током симулације. Прецизност *PhenoTip* алата, као и ефекат употребе података који он даје на успешност софтверског решења, су анализирани и приказани у другом делу овог поглавља. Анализе су спроведене у оквиру студије случаја, где је као пример узета симулација деформације људског језика током гутања.

Девета глава садржи закључна разматрања о употребној вредности развијене платформе. Дат је и посебан осврт на простор за даљи развој како методологије, тако и самог софтверског решења.

2. Значај и допринос докторске дисертације са становишта актуелног стања у одређеној научној области

Употреба рачунарских симулација у истраживањима поремећаја у функционисању мишићно-скелетног система као последице повреда, као и карактеризацији и прогнозирању развоја обољења неуромишићног система захтева вишескалне моделе мишића. Како би вишескалне симулације мишића могле да пруже употребљиве резултате у прихватљивом временском оквиру неопходна је примена техника рачунарства високих перформанси. Постојећа решења за убрзавање вишескалних симулација мишића су ослоњена на универзалне софтверске оквири за паралелизацију вишескалних модела. Како ова постојећа решења подразумевају употребу скупе рачунарске опреме високих перформанси то су трошкови њихове експлоатације превисоки за потенцијалну примену у свакодневној клиничкој пракси. Такође, не употребљавају никакво доменско знање у сврху бољег искоришћења расположивих рачунарских ресурса. У овој дисертацији је представљена методологија којом се дају решења за превазилажење наведених недостатака. Методологија је развијана у контексту двоскалног модела скелетних мишића, у којем је модел коначних елемената на макроскали упарен са Хакслијевим моделом кинетике попречних мостова на микро скали. Представљена је софтверска платформа која омогућава извршавање двоскалне симулације у хетерогеном рачунарском окружењу, које подразумева произвољан број процесорских језгара и графичких процесорских јединица. Програмски модел, заснован на статичкој домен декомпозицији, омогућава паралелизацију прорачуна микромодела. Алгоритам расподеле оптимизује оптерећења према брзинама и меморијским ограничењима извршних јединица. Оптерећења се одређују на основу рачунских сложености микромодела, која процењују оригинално осмишљеном методологијом употребе једноставнијег и рачунски ефикаснијег феноменолошког модела. Кључне новине представљене платформе у односу на постојећа решења паралелизације вишескалних модела мишића су:

1. Употреба графичких процесорских јединица у прорачунима микромодела и дефинисање хибридног програмског модела за ефикасно извођење симулација у окружењу са произвољним бројем централних процесора и графичких процесорских јединица;
2. Оптимизован алгоритам статичке расподеле задатака прилагођен за примену на хетерогеним извршним окружењима и двоскалним моделима нехомогене структуре, који узима у обзир процењене појединачне комплексности израчунавања микромодела.

Експериментима је утврђено да развијено програмско решење чврсто скалира и даје убрзања од два реда величине у односу на време секвенцијалног извршења. Преносивост, ефикасност и однос цена/перформансе, ово програмско решење етаблирају као први значајан корак у смеру употребе вишескалних модела мишића у будућој клиничкој пракси.

3. Оцена да је урађена докторска дисертација резултат оригиналног научног рада кандидата у одговарајућој научној области

Имајући у виду актуелно стање у области паралелних вишескалних модела мишића, можемо констатовати да докторска дисертација кандидата мр Ане Капларевић-

Малишић садржи оригиналне научне резултате који нису били предмет ниједног до сада објављеног истраживања.

4. Преглед остварених резултата кандидата у одређеној научној области

Кандидат мр Ана Капларевић-Малишић се бави научним радом у области паралелних вишескалних модела мишића и до сада има објављене следеће научне радове:

- М. Ivanović, B. Stojanović, A. Kaplarević-Mališić, 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, 92(1) 19-31, 2016. ISSN: 0037-5497 (M23)
- A. Kaplarević-Mališić, M. Ivanović, B. Stojanović, M. Svičević, D. Antonijević, *Employing Phenomenological Model in Load-balancing Optimization of Parallel Multi-scale Muscle Simulations*, 15th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering, Nov 02--04, 2015, Belgrade, Serbia, ISBN: 978-1-4673-7982-3 (M34)
- B. Stojanović, M. Svičević, A. Kaplarević-Mališić, M. Ivanović, Đorđe M. Nedić, Nenad D. Filipovic and Srboљub M. Mijailovich, *Coupling Finite Element and Huxley Models in Multiscale Muscle Modeling*, 15th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering, Nov 02-04, 2015, Belgrade, Serbia ISBN: 978-1-4673-7982-3 (M34)
- M. Ivanović, V. Simić, B. Stojanović, A. Kaplarević-Mališić, B. Marović, *Elastic grid resource provisioning with WoBinGO: A parallel framework for genetic algorithm based optimization*, Future Generation Computer Systems, 42(0):44 – 54, 2015. ISSN: 0167-739X (M21)
- M. Ivanović, A. Kaplarevic-Mališić, V. Simić, B. Stojanović, *Design and comparison of two web service based frameworks for parallel evaluation of the population in genetic algorithms*, Facta Universitatis, Series: Mathematics and Informatics, 29(2):155–171, 2014. ISSN: 0352-9665 (M51)
- B. Stojanović, V. Simić, M. Ivanović, A. Kaplarević-Mališić, A. Stanojević, *WCF Platform for Distributed Evaluation in Evolutionary Algorithms*, Proceedings of the 4th International Conference "Science and Higher Education in Function of Sustainable Development" SED 2011, Uzice, Serbia, 7-8 October 2011, pp. 2:8-13, ISBN 978-86-83573-22-6 (M33)

5. Оцена о испуњености обима и квалитета у односу на пријављену тему

Приложена докторска дисертација у погледу обима и квалитета испуњава све захтеве који су постављени пријавом теме докторске дисертације. Циљеви докторске дисертације су у потпуности испуњени и добијени су очекивани резултати.

6. Научни резултати докторске дисертације

Дисертација приказује методологију развоја програмске платформе за дистрибуирано и паралелно извршавање двоскалних модела мишића у хетерогеном извршном окружењу са произвољним бројем централних процесора и графичких процесорских јединица. Главни исход дисертације је софтверска платформа која представља прошириво софтверско решење изграђено на MPI и CUDA програмским моделима. Емпиријска анализа развијеног решења спроведена на идеализованим

вештачким моделима, који имају хомогену структуру и готово униформно понашање елемената модела током симулације, је показала да примењена методологија статичке декомпозиције домена микромодела омогућава достизање убрзања од два реда величине у односу на секвенцијално извођење двоскалне симулације. Такође, анализа перформанси решења употребљеног у различитим конфигурацијама извршног окружења показује чврсто скалирање. Анализа је затим спроведена у оквиру студије случаја. У студији су извођене симулације деформације људског језика током гутања, где сам модел нема хомогену структуру нити уједначену рачунску комплексност микромодела на целом домену. Овим анализама је показано да за добро искоришћење расположивих ресурса неопходно знање о домену микромодела. Спроведена је анализа прецизности *PhenoTip* алата, као и ефекат употребе података који он даје на успешност платформе. Потврђено је да је употребом алата могуће извести издвајање већих група микромодела приближно истих комплексности. Таква информација о релативним односима комплексности микромодела се показала као довољна да се постигне значајно уравнотеженије оптерећење употребљених рачунарских ресурса. То је резултирало 40% увећаним убрзањем у односу на убрзања која се постижу униформном расподелом која, подразумева подједнаке рачунске комплексности микромодела.

7. Применљивост и корисност резултата у теорији и пракси

Приказани резултати недвосмислено показују да је време извршења комплексног мишићног модела могуће свести у оквиру који га чине употребљивим за реално корисне анализе. Софтверска платформа је у тестовима показала чврсто скалирање и убрзања од чак два реда величине. Са таквим карактеристикама представља добру основу и окружење за даљи развој вишескалних модела мишића, као и истраживања у области физиологије мишића. Упошљавањем графичких процесорских јеединица је обезбеђено веће убрзање, али и драстично поправљање односа цена/перформансе, као и односа утрошена енергија/перформансе, чиме је остварен услов за развој софтвера намењених свакодневној клиничкој пракси.

8. Начин презентовања резултата научној јавности

Део резултата из докторске дисертације је презентован научној јавности излагањем на научним семинарима Института за математику и информатику Природно-математичког факултета у Крагујевцу, затим на међународној конференцији:

- А. Kaplarević-Mališić, М. Ivanović, В. Stojanović, М. Svičević, D. Antonijević, *Employing Phenomenological Model in Load-balancing Optimization of Parallel Multi-scale Muscle Simulations*, 15th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering, Nov 02--04, 2015, Belgrade, Serbia, ISBN: 978-1-4673-7982-3 (M34),

и публикувањем следећих радова у часописима:

- М. Ivanović, В. Stojanović, А. Kaplarevic-Mališić, 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, 92(1) 19-31, 2016. ISSN: 0037-5497 (M23)

ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ


Из изложених података Комисија закључује:

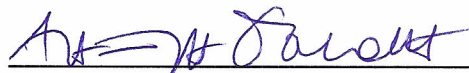
- кандидат мр Ана Капларевић-Малишић испуњава све суштинске и формалне захтеве који се траже од кандидата за одбрану докторске дисертације;
- урађена докторска дисертација је значајна и са теоријског и са практичног становишта и представља битан научни допринос у области рачунарства.

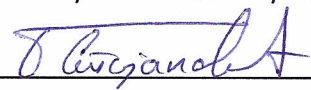
Комисија предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу и Стручном већу за природно-математичке науке Универзитета у Крагујевцу да позитивно оцени урађену докторску дисертацију кандидата мр Ане Капларевић-Малишић, под насловом „Развој и анализа метода паралелизације вишескалних модела мишића“ и одобри њену одбрану.

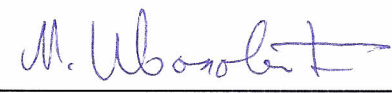
Крагујевац,
11.01.2016.

ЧЛАНОВИ КОМИСИЈЕ


др **Ненад Филиповић**, редовни професор
Факултет инжењерских наука Универзитета у Крагујевцу
ужа научна област: Примењена механика, Примењена
информатика и Рачунарско инжењерство


др **Антун Балаж**, научни саветник
Институт за физику, Београд
ужа научна област: Нумеричке симулације у физици


др **Бобан Стојановић**, ванредни професор
Природно-математички факултет у Крагујевцу
ужа научна област: Програмирање


др **Милош Ивановић**, доцент (ментор)
Природно-математички факултет у Крагујевцу
ужа научна област: Рачунарске комуникације