

# Posudek práce

předložené na Ústavu aplikované informatiky Přírodovědecké fakulty JU

posudek vedoucího  
 bakalářské práce

posudek oponenta  
 diplomové práce

**Autor/ka:** Bc. Tomáš Krejsa

**Název práce:** Využití GPU v programu Gromacs

Studijní obor: Aplikovaná informatika

Datum odevzdání:

**Jméno a tituly vedoucího/oponenta:** Ing. Jan Fesl

Pracoviště: Ústav aplikované informatiky

Kontaktní e-mail: jfesl@prf.jcu.cz

## Odborná úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předkládaná diplomová práce je v základní myšlence koncipována jako snaha autora o zrychlení běhu programu Gromacs pomocí aditivní grafické karty s polem GPU procesorů.

Práce je členěna logicky a obsahuje návrh kompletního řešení počínaje výběrem hardwaru a konče finálním nasazením a otestováním programu Gromacs, který je autory odladěn pro využití na GPU kartách. V závěru práce autor srovnává výhody užití klasických procesorů vs. GPU procesorů a dochází k závěrům, kdy má využití GPU procesorů smysl.

Zásadním problémem této diplomové práce je její nevyhovující infromatická úroveň, což ovšem není jen vina studenta. Výběr hardwaru, stažení zdrojových kódů z konkrétní url adresy, instalace programů či ovladačů karty tvoří více než 60% textu. Toto osobně považuji za zásadní nedostatek, neboť se jedná o naprosto elementární věci a po odborné stránce práci nikam neposouvají. Dalších 20% obsahu práce tvoří přehledové tabulky, obsah, testovací výpisy programu a zdrojový kód programu pro čtení "xtc trajektorií". Zbylých 20% práce obsahuje velmi stručný popis vlastního způsobu paralelizace, který byl autory použit v programu Gromacs, výběru oné konkrétní grafické karty a zhodnocení naměřených výsledků.

Po vědecké stánce lze konstatovat to, že autor nikterak nepopisuje úvod do zkoumané problematiky, program Gromacs víceméně používá jen jako benchmark, nikterak jej nemění ani principiálně neoptimalizuje. Přidaná hodnota práce (a sice ono praktické otestování) je navíc degradováno tím, že samotná společnost INVIDIA podobné otestování provedla (GROMACS 4.6 Pre-Beta Benchmark Report v roce 2012) a autor víceméně potvrdil předem známé výsledky.

Úroveň programu pro čtení XTC trajektorií z programátorského hlediska je velmi nízká, složitostí odpovídá semestrální práci na úrovni 1.ročníku vysoké školy. Autor ovšem v práci sám uvádí, že tuto pasáž nemohl díky nedostatku času více rozvinout.

Rozhodujícím faktorem při hodnocení studenta pro mne v bylo v tomto případě zejména splnění hlavního cíle práce a tento z větší části splněn byl.

### Práci

doporučuji

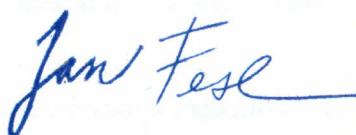
nedoporučuji

uznat jako diplomovou/~~bakalářskou~~.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: České Budějovice 10. ledna 2016



# Posudek práce

předložené na Ústavu aplikované informatiky Přírodovědecké fakulty JU

- posudek vedoucího  
 bakalářské práce
- posudek oponenta  
 diplomové práce

**Autor/ka:** Bc. Tomáš Krejsa  
**Název práce:** Využití GPU v programu Gromacs  
**Studijní obor:** Aplikovaná informatika  
**Datum odevzdání:** 14. 12. 2015

**Jméno a tituly vedoucího/opponenta:** ing. František Drdák, CSc.  
**Pracoviště:** ÚAI PřF JU  
**Kontaktní e-mail:** fdrdak@prf.jcu.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

- originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

- veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předkládaná diplomová práce se zabývá problematikou využití grafického procesoru pro výpočty v oblasti simulace molekulární dynamiky. Cílem práce je pro vybraný grafický procesor navrhnout a implementovat výpočetní systém s vhodnou hw a sw konfigurací a formou srovnávacích testů ověřit jeho efektivnost.

Konkrétně se jedná o kartu GeForce GTX 780, která byla umístěna do modifikované hw sestavy doporučené prodejcem. Z hlediska sw konfigurace byl systém vytvořen instalací os Linux Open SUSE 13.2, GPU driveru, prostředí CUDA 7.0 a Open MPI 1.8.5 včetně ICC kompilátoru a nástroje CMake. K provádění simulačních testů byl do tohoto prostředí zkompileován sw balík Gromacs 5.0.5.

Toto řešení je následně podrobena celé řadě srovnávacích experimentů. Jejich výsledky jsou komentovány závěru práce.

Lze konstatovat, že předložená diplomová práce splňuje zadání v požadovaném rozsahu až na bod týkající se vývoje aplikace pro čtení trajektorií. Tento bod byl splněn pouze částečně.

Práci hodnotím stupněm **velmi dobře**.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

V závěru je konstatováno, že vzhledem k vyšší rychlosti výpočtů se nákup a použití systému při výpočtech pomocí Gromacs vyplatí. Vychází toto tvrzení z nějaké hlubší ekonomické analýzy?

## Námět do diskuze:

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:  
České Budějovice, 8/1/16

