

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor/ka: Bc. Tomáš Krejsa
Název práce: Využití GPU v programu Gromacs
Studijní program a obor: Aplikovaná informatika
Rok odevzdání: 2015

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.
Pracoviště: Ústav fyziky a biofyziky PŘF JU
Kontaktní e-mail: predota@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:

Počítačové simulace prováděné v programu Gromacs trvají dny až týdny při paralelizaci na CPU. Poslední verze programu podporují výpočty na GPU a otevírají možnost simulace zrychlit. Cílem magisterské práce bylo:

- 1) Navrhnout PC s výpočetní grafickou kartou, nainstalovat linuxový operační systém, program Gromacs, knihovny OpenCL pro podporu výpočtů na GPU a MPI pro paralelizaci na CPU, kompilátor jazyka C pro sériové, paralelní MPI i OpenCL výpočty. GPU verzi programu Gromacs doinstalovat i na stávající počítač s GPU kartou.
- 2) Otestovat efektivitu výpočtů na GPU vs. na CPU na nově sestaveném a starším stroji i klastru gram Metacentra pro odlišné a různě velké systémy.
- 3) Otestovat rozdíly v chování programu v GPU a CPU verzi, připravit utilitu pro GPU paralelní analýzy konfigurací, kterou by vedoucí práce mohl upravovat dle potřeby.

V bodě 1) vedoucí fungoval jako klient stanovující požadovaný cíl (bez detailních znalostí možných řešení) a student samostatně splnil zadané. Student narazil na obtíže s instalací operačního systému spolupracujícího s grafickou kartou, ale úspěšně obtíže překonal. Funkční PC rozšiřující stávající klastr je významným praktickým přínosem DP.

V části věnované testování efektivity oceňují bohatost testovaných kombinací. Způsob výpočtu a efektivita program Gromacs totiž závisí na kombinaci nastavení počtu CPU jader a GPU, lze i volit, zda se některé části výpočtu interakčních sil mají počítat na CPU nebo GPU. Student se musel do potřebné hloubky seznámit s programem Gromacs, aby mohl specifikovat různé parametry výpočtu a spouštění simulací. Výsledky této části jsou zásadní pro rozhodování o nákupu dalšího HW pro zvyšování výkonu výpočetního klastru vedoucího práce a spouštění simulací s optimálními parametry.

Rozdíly v chování GPU a CPU verze zjistil v průběhu řešení této DP doktorand vedoucího. Tento cíl byl tedy z DP vypuštěn.

Závěrečným úkolem studenta bylo a) vytvořit program na čtení konfigurací v .xtc formátu a b) rozšířit jej na program využívající GPU pro analýzu konfigurací, který by vedoucí mohl následně jednoduše upravovat ke konkrétním účelům. Z časových důvodů student splnil pouze první část. Ta je samostatně také přínosná, umožňuje okamžité vytvoření paralelní CPU verze a řeší problém analýzy trajektorií bez nutnosti konverze do řádově objemnějšího .gro formátu, ale část b) měla potenciál nejen vytvořit nástroj pro ještě rychlejší zpracování trajektorií, ale i složitější vlastní GPU program.

Souhrn: DP se skládá z několika částí, motivovaných potřebou vědeckého týmu. Některé části byly splněny k plné spokojenosti, jiné s výhradami.

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:
V Českých Budějovicích, 11. 1. 2016