

# Posudek oponenta závěrečné práce

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta informačních technologií

**Student:** Bc. Jakub Pekař  
**Oponent práce:** doc. Ing. Ivan Šimeček, Ph.D.  
**Název práce:** Parallel Simulation of Biomacromolecules using the DFTB method  
**Obor:** Počítačové systémy a sítě

**Datum vytvoření:** 31. 1. 2017

<b>Hodnotící kritérium:</b>	<b>Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 5:</b>
<b>1. Náročnost a další komentář k zadání</b>	<b>1=mimořádně náročné zadání, 2=náročnější zadání, 3=průměrně náročné zadání, 4=lehčí, ale ještě dostatečně náročné zadání, 5=nedostatečně náročné zadání</b>
<b>Popis kritéria:</b> Podrobněji charakterizujte diplomovou (bakalářskou) práci a její případné návaznosti na předchozí nebo běžící projekty. Dále posuďte, čím je zadání této ZP náročné. (U obtížnější ZP lze dále tolerovat některé nedostatky, které by u ZP standardní obtížnosti tolerovány nebyly; a naopak u jednoduché ZP mohou být zjištěné nedostatky hodnoceny přísněji.)	
<b>Komentář:</b> Autor měl nastudovat složité metody a poměrně rozsáhlé existující kódy, Ale metody neměl implementovat a změny v kódech neměly být zásadní proto hodnotím "jen" jako náročnější zadání.	
<b>Hodnotící kritérium:</b>	<b>Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4:</b>
<b>2. Splnění zadání</b>	<b>1=zadání splněno, 2=zadání splněno s menšími výhradami, 3=zadání splněno s většími výhradami, 4=zadání nesplněno</b>
<b>Popis kritéria:</b> Posuďte, zda předložená ZP splňuje zadání. V komentáři uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, případně rozšíření ZP oproti původnímu zadání. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.	
<b>Komentář:</b> Zadání splněno.	
<b>Hodnotící kritérium:</b>	<b>Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4:</b>
<b>3. Rozsah písemné zprávy</b>	<b>1=splňuje požadavky, 2=splňuje požadavky s menšími výhradami, 3=splňuje požadavky s většími výhradami, 4=nesplňuje požadavky</b>
<b>Popis kritéria:</b> Zhodnoťte přiměřenost rozsahu předložené ZP vzhledem k obsahu, tj. zda všechny části ZP jsou informačně bohaté a ZP neobsahuje zbytečné části.	
<b>Komentář:</b> Rozsah písemné zprávy splňuje požadavky.	
<b>Hodnotící kritérium:</b>	<b>Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):</b>
<b>4. Věcná a logická úroveň práce</b>	<b>85 (B)</b>
<b>Popis kritéria:</b> Posuďte, zda předložená ZP je po věcné stránce v pořádku, případně vyskytují-li se v práci věcné chyby nebo nepřesnosti. Zhodnoťte dále logickou strukturu ZP, návaznosti jednotlivých kapitol a pochopitelnost textu pro čtenáře.	

**Komentář:**

Některé grafy jsou zbytečně "roztahané" (např. 3.2 by šlo vyjádřit jedním grafem).

Prakticky chybí jakýkoliv úvod do OpenMP, tato technologie je rovnou použita.

Výsledky paralelizace navržené v 5.1 a změřené v 6.2 jsou špatné. Proč autor zparalelizoval všechny vhodné cykly místo aby aby pro každý cyklus změřil, zda se vyplatí paralelizovat (vůbec případně odhadnout za jakých podmínek) ?

Není vysvětleno podivné chování knihoven:

např. knihovna ATLAS by měla dosahovat podobné výkonnosti jako MKL: to se děje, ale pouze pro jedno vlákno! ATLAS tedy využívá jen jedno vlákno ?!

Knihovna MAGMA, která využívá MKL je rychlejší než MAGMA s ATLAS (to je očekávatelné), ale pokud je využíváno GPU, je situace obrácená, proč?

Chápu, že jsou to složité knihovny, ale byl by vhodný aspoň autorův odhad možných důvodů.

Použitá grafická karta řady Geforce není příliš vhodná pro výpočty v dvojité přesnosti. Autor mohl otestovat výkonnost na školních GPU serverech.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

**5. Formální úroveň práce**

95 (A)

Popis kritéria:

Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku ZP, viz Směrnice děkana č. 14/2015, článek 3.

**Komentář:**

Bez zjevných chyb

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

**6. Práce se zdroji**

90 (A)

Popis kritéria:

Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení ZP. Charakterizujte výběr studijních pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje nebo zda se pokoušel řešit již vyřešené problémy. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.

**Komentář:**

Bez zjevných chyb, ale 12 z 20 není z oboru IT

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

**7. Hodnocení výsledků, publikační výstupy a ocenění**

80 (B)

Popis kritéria:

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků ZP, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, apod. Případně také zhodnoťte, zda software nebo zdrojové texty, které nevytvořil sám student, byly v ZP použity v souladu s licenčními podmínkami a autorským právem. Popište případnou publikační činnost a získaná ocenění související s řešením této ZP.

**Komentář:**

Autorovi se podařilo zrychlit provádění balíku GROMACS pomocí volby vhodných knihoven, po rozšíření měření (viz 4) a vysvětlení některých podivných jevů (viz 4), je toto dobře publikovatelné zlepšení.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - nehodnotí se

**8. Komentář o využitelnosti výsledků**

Popis kritéria:

Uvedte, zda hlavní výsledky ZP rozšiřují již publikované známé výsledky a/nebo přinášející zcela nové poznatky. Uvedte možnosti využití výsledků ZP v praxi.

**Komentář:**

viz 7)

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - nehodnotí se

**9. Otázky k obhajobě**

Popis kritéria:

Uvedte případné dotazy, které by měl student zodpovědět při obhajobě ZP před komisí (body oddělte odřázkami).

**Otázky:**

viz 4)

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

**10. Celkové hodnocení**

85 (B)

Popis kritéria:

Shrňte stránky ZP studenta, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Celkové hodnocení **nesmí** být aritmetickým průměrem či jinou hodnotou vypočtenou z hodnocení v předchozích jednotlivých kritériích 1 až 9.

**Text hodnocení:**

Práce byla sice náročnější, ale ne vše bylo dořešeno nebo vysvětleno. Proto práci doporučuji k obhajobě a hodnotím známkou B.

Podpis oponenta práce: