

Posudek oponenta diplomové práce

Název práce: Využití paralelismu pro analýzu biomolekul

Autorka: Bc. et Bc. Zuzana Majdišová

Oponent: Ing. Jiří Skála, Ph.D.

Diplomová práce Zuzany Majdišové se věnuje urychlení algoritmu konstrukce aditivně váženého Voronoiova diagramu. Je to aktuální problém v oblasti studia molekul proteinů. V první kapitole je obecný úvod do problematiky a stanovení cílů práce. V následujících kapitolách jsou popsány aditivně vážené Voronoiovy diagramy, filosofie obecných výpočtů na GPU a architektura OpenCL. Úroveň podrobností je přiměřená – text umožňuje porozumět celé problematice a podrobněji se zaměřuje na ty části, které jsou později využívány v řešení.

Kapitola 5 popisuje autorkou navrženou metodu konstrukce Voronoiova diagramu na GPU. V kapitole 6 jsou pak navržena další urychlení s využitím prostorových filtrů. Není mi jasné, zda je filtrování použito i při výpočtu na GPU. Řešení na GPU využívá vysoký výpočetní výkon k rychlému vyhodnocení všech kandidátů na vrchol diagramu, zatímco filtrování snižuje počet těchto kandidátů. Kapitola 7 popisuje detaily implementace.

V kapitole 8 jsou zdokumentovány experimenty. Oceňuji, že se autorka neomezila jen na porovnání časů, ale uvádí i analýzu přesnosti algoritmu podle použité aritmetiky (jednoduchá/dvojitá přesnost). Navržené řešení na GPU přineslo urychlení výpočtu. Ještě rychlejší se ukázalo použití navržených metod filtrování prostoru při paralelním výpočtu na CPU. Uvedená řešení jsou však pomalejší než existující metoda, která k dělení prostoru využívá Delaunayovu triangulaci.

Práce je dobře strukturovaná, výklad je veden logicky a srozumitelně. Text je vhodně doplněn obrázky, které pomáhají při pochopení geometrických souvislostí. V částech věnovaných novým řešením autorka zdůvodňuje svá rozhodnutí. V experimentech komentuje proč nastaly některé výjimečné případy. Na str. 33 v alg. 5.2 v kroku 7 asi má být $b_{ed} \in S$, nikoliv $b_{ed} \in K$. Gramatická úroveň textu je výborná, k typografickému zpracování nemám výhrad.

K práci mám následující dotazy:

Jaký vliv na urychlení by měly menší nebo naopak větší rozdíly v poloměrech atomů molekuly?

Výpočet úhlové vzdálenosti na GPU je proveden nejprve v jednoduché přesnosti. Podezřelé vrcholy jsou následně vyhodnoceny s dvojitou přesností. Uvažme vrcholy v_1, v_2 s úhlovými vzdálenostmi $\theta_1 = 1024,00011$ a $\theta_2 = 1024,00018$. Nemůže se stát, že bude nesprávně vybrán vrchol v_2 , protože v jednoduché přesnosti je $\theta_2 = 1024,0001$ a ve dvojitě přesnosti bližší vrchol nenajdeme?

Autorka splnila zadání diplomové práce. Ukázala, že se orientuje v dané oblasti, je schopna samostatně tvůrčí práce a implementace nových řešení. Práci Zuzany Majdišové *doporučuji* k obhajobě a navrhuji hodnocení *výborně*.

25. května 2014

Jiří Skála

