

Hodnocení vedoucího bakalářské práce

Autor práce: Václav Löffelmann

Název práce: Paralelizace geometrických výpočtů pro analýzu biomolekul

Práce se zabývá paralelizací výpočtu molekulárního povrchu s využitím popisu prostorových vztahů mezi atomy popsaných pomocí 3D Voroného diagramu. Předchozí řešení, které používá grafové prohledávání do hloubky, není moc vhodné pro paralelizaci. Cílem bylo navrhnout alternativu vhodnou pro GPU, aby byl výpočet rychlejší a odstranila se nutnost pomalých přesunů dat z RAM do paměti GPU, které jsou nutné kvůli pozdější vizualizaci.

Student ze začátku disponoval pouze slabším hardwarem, takže hledání a odstraňování chyb, které se projevovaly pouze na některém hardwaru, pro něj bylo časově náročné. Proto vedoucí stanovil nejnütnější body práce, aby šly výsledky alespoň zobrazit v existujícím softwarovém nástroji CAVER Analyst a aby šel porovnat čas výpočtu oproti předchozímu řešení. Těchto bodů bylo dosaženo. Velmi pozitivně hodnotím, že se studentovi ve spolupráci s vedoucím podařilo odstranit nutnost grafového prohledávání, na kterém bylo založeno předchozí řešení.

Experimenty ukázaly, že navržené řešení je v některých ohledech i dvakrát rychlejší než předchozí. Studentovo řešení lze spustit jak na GPU tak na CPU. Překvapivě, výsledky na CPU byly lepší než výsledky na GPU.

Kvalitu práce hodnotím jako průměrnou. Teoretická část zevrubně pokrývá potřebnou teorii, mohla být ale více precizní. Např. v rovnicích (1) a (2) chybí obecné kvantifikátory, některé formulace nutí laického čtenáře k hlubšímu zamyšlení, a v práci se vyskytují gramatické chyby a překlepy. Popis navrženého řešení mohl být podrobnější. Dokumentace programu je v pořádku.

Aktivita studenta a spolupráce s vedoucím byla nadprůměrná. Student reagoval na e-maily, chodil na konzultace a dokázal analyzovat a opravit nalezené chyby.

Student splnil nejnütnější body zadání. Podařilo se mu vytvořit paralelní variantu algoritmu výpočtu molekulárního povrchu a provést experimenty. Pro plné nasazení do praxe bude v budoucnu ještě potřeba odstranit některé chyby v implementaci.

Navrhuji hodnocení známkou **velmi dobře** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 16.8.2016

Mgr. Martin Maňák