Oponentský posudok na doktorskú dizertačnú prácu

“Parallel Implementation of Multireference Coupled Cluster Methods and Calculations on Large Systems”

predloženú k obhajobe na Prírodovedeckej fakulte Karlovej Univerzity v Prahe

Mgr. Jiřím Brabcom

Študent doktorandského štúdia Mgr. Jiří Brabec predložil k obhajobe dizertačnú prácu s názvom “Parallel Implementation of Multireference Coupled Cluster Methods and Calculations on Large System”, napísanú v anglickom jazyku. Práca je prehľadne členená do kapitol, pričom prvé dve pojednávajú o teoretickom základe “Hilbert-space” multireferenčných metód spriahnutých klastrov ako aj o súčasnej architektúre počítačov a paralelných programov. Nasledujúce dve kapitoly detailne diskutujú implementáciu a škálovanie navrhnutých paralelných algoritmov pre metódy Brillouin-Wigner Multireference Coupled Clusters (MRCC) Methods so zahrnutím mono- a bi-excitácií (BW-MRCCSD) a Mk-MRCCSD (Mukherjee's MRCCSD). Kapitola päť, má aplikačný charakter a pojednáva o kvalite MRCC popisu naťahovania C-C väzby koncového CH3 fragmentu dodekánu, relatívnych energií izomérov diradikálu naftylénu ako aj energetických rozdielov spinových stavov polykarbénov. Témou predposlednej kapitoly je formulácia a pilotné výpočty tzv. “Universal state-selective” (USS) korekcie (do druhého poriadku) ku spomenutým MRCC metódam. Prácu uzatvára posledná, siedma kapitola, v ktorej autor zrozumiteľne sumarizuje kľúčové aspekty štúdií diskutovaných v predchádzajúcich kapitolách. Je dôležité zdôrazniť, že poznatky predkladané v jednotlivých kapitolách (až na kapitolu päť) boli publikované v renomovaných zahraničných časopisoch (Chem. Phys. Lett., J. Chem. Theory Comput. a J. Chem. Phys.), kde bezpochyby prešli náročným recenzným konaním. Práca má nadštandardnú jazykovú úroveň a ani pri zvýšenom úsilí sa mi nepodarilo nájsť takmer žiadne nedôslednosti, či preklepy (napr. “disc” vs. “disk”, strana 17 a pod.), čo iba zdôrazňuje autorovu svedomitosť a exaktnosť.

Vzľadom na vlastnú expertízu, sa v nasledujúcich riadkoch zameriam na časť práce zaoberajúcou sa paralelizáciou. Zdôrazňovať aktuálnosť vývoja efektívnych algoritmov a programov pre MRCC metódy (ako aj jednoreferenčné CC metódy, a v zásade ľubovolné metódy kvantovej chémie) je asi zbytočné. Keďže aplikácie týchto metód sa takmer vždy prispôsobujú hardvérovým a softvérovým možnostiam, častokrát je nutné uchýliť sa k (niekedy ťažko

obhájiteľným) modelovým systémom, čiže akýkoľvek posun v efektivite výpočtov je viac než žiadaný. Paralelizácia je, vzhľadom na multi-uzlovú/procesorovú/jadrovú architektúru väčšiny dnes dostupných superpočítačov, asi ten najpriamočiarejší (nie však jediný) spôsob urýchlenia výpočtov. Autor sa v práci vybral cestou paralelizácie prostrednítvom "task-level" paralelizácie, zjednodušene povedané kombinácie "Global Arrays" (GA) a segmentácie indexov intermediátov podporovaných v "Tensor Contraction Engine" (TCE), ktorá prirodzene vedie k tvorbe distribuovateľných zoznamov kontrakcií efektívne vykonateľných samostatne ako BLAS (hlavne "level 3") operácií, a tzv. "reference-level" paralelizácie, čiže paralelizácie na úrovni rovníc nezávislých pre danú referenciu. Adaptácia TCE na multireferenčné metódy, ako aj samotná implementácia jednotlivých, teoreticky veľmi náročných, MRCC metód boli určite veľkou výzvou, s ktorou sa musel doktorand vysporiadať. Autor v práci jasne demonštruje takmer lineárne škálovanie výpočtového času s počtom výpočtových jadier, až po v skutku impozantné rozmery v rádoch desaťtisícov. Z pohľadu skeptika sa však môžu vynoriť aj nasledujúce pripomienky: (skoro) lineárne škálovanie napr. z 2048 na 4096 jadier je určite skvelé, ale trvanie jednej BW-MRCCSD iterácie pre napr. 1,7-naftylén (4 referenčné funkcie, 384 atómových funkcií, 23 korelovaných orbitálov, tabuľka 4.2) 525 sekúnd na 1024 jadrách, prepočítané na jedno jadro je pravdepodobne dlhšie ako pri iných sériových (napr. pre CCSD, prepočítané na jednu referenciu) kódoch; uchovávanie 2-elektrónových integrálov "in core" limituje aplikovateľnosť algoritmu pre menší počet výpočtových uzlov/jadier a pod.

Záverom konštatujem, že doktorand jasne deklaroval svoju odbornosť v danej problematike, implementoval náročné teoretické modely do efektívnych, masívne paralelných počítačových programov a svoju prácu sumarizoval do prehľadnej a kvalitnej dizertačnej práce. **Predkladaná práca rozhodne spĺňa kritériá na obhajobu v III. stupni VŠ štúdia v zmysle platného VŠ zákona a neskorších predpisov a po jej úspešnej obhajobe navrhujem kandidátovi udeliť titul PhD.**

Námety do diskusie:

- v jadre väčšiny paralelizovaných slučiek sa nachádzajú volania BLAS rutín, predpokladám, že prevažne pre maticové násobenie. Nikde v práci som nenarazil na zmienku o použití resp. testovaní tzv. "threaded" BLAS rutín, t.j. rutín schopných automaticky využívať viac výpočtových jadier. Využitie týchto rutín by v prípade časovej dominancie aritmetických operácií umožnilo znížiť počet paralelných procesov na výpočtový nód a zároveň zachovať efektivitu využitia všetkých výpočtových jadier

- Dokáže si autor predstaviť modifikáciu navrhnutých algoritmov tak, aby nevyžadovali ukladanie všetkých 2-elektrónových integrálov do pamäte? Ak áno, dá sa odhadnúť aký by to malo dopad na efektivitu výpočtu? Je vôbec ešte možné využiť I/O operácie z lokálneho úložiska dát výpočtového uzla (t.j. nie "zdielaného" diskového priestoru ako Lustre, GPFS, ...) v tak silne GA-orientovanom algoritme?

- Má autor predstavu o čase, ktorý strávia algoritmy v rámci jednej MRCC iterácie aritmetickými operáciami a koľko GA operáciami (resp. ostatnými "nearitmetickými" operáciami)?

Bratislava, 6. 8. 2012 Mgr. Michal Pitoňák, PhD.