

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Modely fázového pole v materiálových vědách a jejich numerické řešení
Jméno autora:	Jan Palán
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra matematiky
Oponent práce:	RNDr. Miroslav Frost, Ph.D.
Pracoviště oponenta práce:	Ústav termomechaniky AVČR, v.v.i., Praha 8

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	průměrně náročné
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Zadání diplomové práce rozvíjí tematiku dlouhodobě řešenou na školícím pracovišti; vhodně kombinuje rešeršní a algoritmickou část.	

Splnění zadání	splněno
<i>Posuďte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i>	
Pracovní úkoly formulované v zadání byly bezezbytku splněny.	

Zvolený postup řešení	vhodný
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
Práce využívá pokročilé modely fázového pole používané v materiálových vědách a jemně modifikuje přístupy k numerickému řešení odvozených evolučních okrajových úloh za účelem zpřesnění výpočetních simulací.	

Odborná úroveň	výborná
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
Práce je vysoké odborné úrovni, kombinuje znalosti z oblasti termodynamiky, materiálových věd, aplikované a numerické matematiky a programování a hladce navazuje na výsledky publikované v literatuře. Diplomant využil znalosti numerické matematiky získané studiem a zkušeně je dokázal aplikovat ve specifickém kontextu.	

Formální a jazyková úroveň	průměrná
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
Jazyková a typografická úroveň práce je dobrá, grafické znázornění výsledků je přehledné. Několik odhalených drobných nedostatků je uvedeno na konci části III tohoto posudku.	

Výběr zdrojů, korektnost citací	průměrné
<i>Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje. 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.</i>	
Diplomant prokázal schopnost dobře využívat vědeckou literaturu. Použité zdroje zahrnují 35, v drtivé většině zahraničních, vědeckých prací včetně několika monografií. Postupy a výsledky převzaté z literatury jsou citovány jasně, řádně a v souladu s citačními normami.	

Další komentáře a hodnocení
<i>Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.</i>

V rámci diplomové práce byl vyvinut software pro numerické řešení modelů fázového pole s anizotropií, implementován do programovacího jazyka a začleněn do sady softwarových nástrojů vyvíjených na školícím pracovišti. Následné úspěšné testování na několika úlohách prokázalo jeho funkčnost a robustnost.

III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE

Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.

Práce se zaměřila na možnosti využití nestrukturovaných sítí v numerickém řešení úloh formulovaných v rámci modelů fázového pole. Hlavní motivací byla snaha odstranit vliv interakce směrů krystalografické orientace s geometrií strukturovaných pravouhlých výpočetní sítí na numerické simulace. Práce rozvíjí tematiku dlouhodobě řešenou na školícím pracovišti diplomanta a vhodně kombinuje poznatky z několika oborů: termodynamiky, materiálových věd, aplikované a numerická matematiky a programování. První kapitola přináší teoretické zakotvení metody fázového pole včetně formulací okrajových evolučních úloh pro konkrétní fyzikálně motivované situace. Kapitola je obsáhlá a dobře strukturovaná; je proto trochu škoda, že narativní oblouk kapitoly není uzavřen matematickým tvrzením o existenci řešení alespoň některého typu těchto úloh – např. úlohy (1.70), byť klidně i s pouhým odkazem na důkaz takového tvrzení v primární literatuře. Použití nestrukturovaných sítí vyžaduje modifikace diskretizačního schématu metody konečných objemů, které jsou hlavní náplní druhé kapitoly práce. Zde diplomant prokazuje dobré zvládnutí znalostí nabytých ve studiu a schopnost aplikovat je v konkrétní situaci. Třetí kapitola je věnována samotným numerickým simulacím, a to jak na nestrukturovaných tak strukturovaných sítích, a jejich porovnání. Na základě analýzy kvality sítě se autorovi podařilo objasnit neuspokojivé výsledky simulací růstu anizotropních krystalů ve třech rozměrech na mnohostěnových nestrukturovaných sítích a s využitím komerčního generátoru simulace výrazně vylepšil. Co se týče stěžejní motivace práce – tedy odstranění směrového zkreslení simulací užitím nestrukturovaných sítí – můžeme konstatovat, že i když prezentované výsledky neumožňují formulovat jednoznačný závěr o vhodnosti tohoto přístupu, práce přesto přináší cenné poznatky v této oblasti a vytyčuje možné směry dalšího bádání. Práci tedy jednoznačně doporučuji k obhajobě.

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm B - velmi dobře.

K práci mám následující drobné dotazy; budu rád, pokud se k nim diplomant v rámci obhajoby vyjádří:

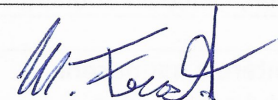
- 1) Bylo by možné stručně vysvětlit důvody vedoucí k volbě použitých numerickému přístupů, především metodě konečných diferencí a Rungeovy-Kuttovy-Mersonovy metody? Lze, např. na základě porovnání s literaturou, uvést výhody a nevýhody ve srovnání s jinými metodami (např. metodou konečných prvků)?
- 2) Co je důvodem růstu krystalů z kraje výpočetní oblasti na obr. 3.14?

Návrhy na opravy/úpravy textu:

- str. 11: Formulaci „lokální vybočení z rovnováhy“ navrhuji nahradit formulací „lokální vychýlení z rovnováhy“.
- str. 13: Proměnná u objevující se ve vztazích (1.5, 1.6) není zavedena. Jedná se nejspíše o překlep.
- str. 18: Význam parametru ξ vystupujícího poprvé v (1.16) se čtenář dozví teprve na str. 20.
- str. 19: Ve výrazu (1.32) nejspíše τ uteklo před závorku.
- str. 21: Nepodařilo se mi v textu dohledat definici/zavedení veličiny β vystupující v Tabulce 1.2.
- str. 23: Definici φ_n , resp. φ_n^0 , ze vztahů (1.61), resp. (1.62), se čtenář dozví až na straně 25.
- str. 27: V první větě kapitoly 1.3.1 přebývá slovo „předpokladem“.
- str. 52-53: Text vysvětlující nedostatečnost rovnice (3.8) pro model anizotropického růstu krystalu v binární slitině není příliš jasný.

Datum: 22.5.2023

Podpis:



RNDr. Miroslav Frost, Ph.D.
Ústav termomechaniky AVČR, v.v.i.