

**I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE**

<b>Název práce:</b>	<b>Vývoj meziatomárních potenciálů pro molekulární dynamiku pomocí neuronových sítí: Aplikace pro martensitickou fázi slitiny nikl titan</b>
<b>Jméno autora:</b>	<b>Bc. Petr Jaroš</b>
<b>Typ práce:</b>	diplomová práce
<b>Fakulta:</b>	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
<b>Katedra:</b>	Katedra inženýrství pevných látek
<b>Vedoucí práce:</b>	Ing. Petr Sedlák, Ph.D.
<b>Pracoviště vedoucího práce:</b>	FJFI ČVUT, Ústav termomechaniky AV ČR

**II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ**

<b>Zadání a motivace k jeho vypsání</b>	<b>náročnější</b>
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce a krátké průvodní slovo k motivaci pro zadání práce.</i>	
Diplomová práce je zaměřena na využití moderního přístupu v atomárních simulacích pevných látek založeném na kombinaci metod molekulární mechaniky a kvantově-mechanických výpočtech metodou DFT pro simulace mikrostrukturních procesů se slitině NiTi s tvarovou pamětí. Úkolem diplomanta bylo nejprve si osvojit celou metodiku zahrnující generaci tréninkového datasetu pomocí DFT výpočtů, sestavení NN (neural network) atomárního potenciálu, implementace NN potenciálu do prostředí pro atomární simulace a provedení samotné simulace s vhodně zvolenými okrajovými podmínkami, dále, demonstrovat tuto metodiku na jednoduchém případě monokrystalu Si a nakonec aplikovat tuto metodu na simulace vývoje mikrostruktury v B19' martenzitu NiTi. Zadání tak bylo velmi náročné a vyžadovalo od diplomanta osvojit si různé simulační metody a provést řadu náročných výpočtů.	

<b>Splnění zadání</b>	<b>splněno</b>
<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>	
V diplomové práci se podařilo splnit všechny vytčené cíle. Diplomant si úspěšně osvojil jak metodu DFT pro kvantově-mechanické výpočty (v práci byly výpočty provedeny v programu VASP), tak metodu tvorby a ladění NN potenciálu a atomární simulace (v programu LAMMPS). Kvalitu NN potenciálu naladěného na DFT data ověřil nejprve na simulacích krystalického Si. Zde ukázal, že získaný potenciál dobře popisuje základní stav materiálu a jeho elastické vlastnosti a fononová spektra. Dále se věnoval samotné tvorbě potenciálu pro martenzit NiTi. I když zde získaný NN potenciál byl naladěn pouze na omezený DFT dataset – v rámci diplomové práce nebylo možné realizovat více náročných DFT výpočtů, jsou vlastnosti získaného NN potenciálu již velmi slibné. Především správně reprodukuje extrémní anizotropii plastického skluzu ve struktuře B19', která stojí za složitým mikrostrukturním vývojem a lokalizací plastické deformace v tomto systému.	

<b>Aktivita a samostatnost při zpracování práce</b>	<b>výborná</b>
<i>Posuďte, zda byl student během řešení aktivní, zda dodržoval dohodnuté termíny, jestli své řešení průběžně konzultoval a zda byl na konzultace dostatečně připraven. Posuďte schopnost studenta samostatně tvůrčí práce.</i>	
Petr přistupoval k práci velmi aktivně. Cenné zkušenosti s tvorbou NN potenciálů získal na prestižním pracovišti na Ruhr Univerzitě v Bochumi (Německo) ve skupině pod vedením Prof. J. Behlera během několikaměsíčního pobytu. Aktivně se též zasadil o využití superpočítačů k tvorbě DFT datasetů – ve spolupráci s VUT Brno byl spolunavrhovatel úspěšného projektového návrhu na výpočetní čas v superpočítačovém centru IT4Innovations, kde následně realizoval většinu DFT výpočtů.	

<b>Odborná úroveň</b>	<b>výborná</b>
-----------------------	----------------

*Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.*

Po odborné stránce je práce na vysoké úrovni. Kombinace klasické molekulární mechaniky s kvantově-mechanickými DFT výpočty je nejmodernější přístup k simulaci velkých atomárních systémů, jež umožňuje zcela nový pohled na řadu mechanismů v materiálech. Tato práce je tak na limitu současných možností simulací materiálů. Celou metodiku tohoto přístupu zahrnujícího DFT výpočty, tvorbu NN potenciálu a samotné atomární simulace si Petr výborně osvojil i díky úzké spolupráci s Prof. J. Behlerem (Ruhr Univerzita v Bochumi), který je jedním z předních světových odborníků v této oblasti.

**Formální a jazyková úroveň**

**výborná**

*Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.*

Práce je psaná v anglickém jazyce, má šedesát stránek a po formální stránce je na dobré úrovni.

**Výběr zdrojů, korektnost citací**

**výborné**

*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.*

V diplomové práci je 46 referencí. Citované zdroje jsou relevantní a odrážejí současný stav poznání jak v metodice atomárních simulací, tak v mechanice slitin s tvarovou pamětí.

**Další komentáře a hodnocení**

*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.*

Diplomová práce Petra Jaroše představuje jedno z prvních použití metodiky NN potenciálů k simulaci pevných látek u nás. Rychlý rozvoj této metodiky v nedávné době, související zejména s možností výpočtu větších atomárních systémů metodou DFT, otevírá nový prostor v atomárních simulacích a detailním pochopení procesů v materiálech. Petrova práce nám zprostředkovává tento unikátní teoretický nástroj, jež nepochybně najde v brzké době řadu uplatnění i v dalších oborech než jako zde, ve fyzice kovů a mechanice martenzitických mikrostruktur.

**III. CELKOVÉ HODNOCENÍ A NÁVRH KLASIFIKACE**

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

Celkově hodnotím diplomovou práci jako mimořádně zdařilou. Oceňuji zejména vysoké pracovní nasazení diplomanta, odvahu začít s novým tématem, které u nás ještě není plně zavedeno, schopnost navázat kontakt se špičkovým zahraničním pracovištěm v daném oboru a samostatnost ve vědecké práci. Samotné výsledky diplomové práce související se simulacemi martenzitu B19' ve slitině NiTi jsou velmi přínosné – NN potenciál reprodukuje pozorovanou silnou anizotropii plastického skluzu v této struktuře, a tak umožní následné simulace interakce plasticity s dvojčatením – dvou mechanismů, které stojí za složitým mikrostrukturním vývojem v této slitině.

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **A - výborně**.

Datum: 23.1.2024

Podpis: