

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Vývoj meziatomových potenciálů pro molekulární dynamiku pomocí neuronových sítí: Aplikace pro martenzitickou fázi slitiny nikl titan
Jméno autora:	Bc. Petr Jaroš
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra inženýrství pevných látek
Oponent práce:	Ing. Petr Šesták, Ph.D.
Pracoviště oponenta práce:	Ústav fyzikálního inženýrství, Fakulta strojního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2896/2, 616 69 Brno

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	náročnější
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
<p>Předložená diplomová práce se zabývá vývojem meziatomových potenciálů s pomocí neuronových sítí pro slitinu s paměťovým efektem – NiTi. Zadání práce hodnotím jako poměrně náročné, neboť pokrývá hned několik vědeckých oblastí, z nichž zejména strojové učení v oblasti meziatomových potenciálů se dostává do popředí až několik posledních let a je tedy nutno stále dohledávat co možná nejvíce aktuální práce. Z dalších oblastí lze zejména jmenovat nutnost zvládnutí základů atomistických simulací, a to jak na bázi prvoprincipiálních výpočtů (DFT), tak i s pomocí molekulární dynamiky. Dále je pak bezpodmínečně nutné znát problematiku slitin s paměťovým efektem (slitina NiTi), tj. problematiku martenzitických transformací. Samotné téma práce je tedy zvoleno vhodně vzhledem k trendům posledních let, kdy nastal poměrně velký zájem o tyto potenciály z důvodu jejich přesnosti, jenž je mnohdy velice blízko přesnostem dosahovaným v oblasti prvoprincipiálních simulací. Jedná se tedy o vhodný způsob jak přenést „DFT přesnost“ do molekulární dynamiky.</p>	

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>	
<p>Toto posouzení je nutno rozdělit na dvě části. První část pokrývá tvorbu potenciálu pro křemík, ke které nemám žádné výhrady, a druhá část tvorbu potenciálu pro NiTi slitinu. Zde je daný NN potenciál schopen reflektovat základní chování martenzitické fáze NiTi slitiny, zejména pak energeticky nejvýhodnější smykový směr, při kterém nedochází už k žádným významným extrapolacím. Na druhou stranu jsou zde odchylky při výpočtech elastických konstant, které naznačují nutnost doplnění „training“ setu o další konfigurace. Celkově zadání hodnotím jako splněné.</p>	

Zvolený postup řešení	vhodný
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
<p>Zvolený postup řešení je vybrán adekvátně, tj. konstrukce jednotlivých konfigurací atomárních struktur pro křemík a martenzitickou fázi NiTi slitiny následovaný získáním potřebných charakteristik s pomocí programu VASP (meziatomových sil, energie systému, případně napětového tenzoru) jenž jsou v závěru použity ke konstrukci potenciálu (pomocí RuNNer) pro molekulární dynamiku realizovanou v programu LAMMPS. Úplně na závěr je proveden „benchmark“ získaného potenciálu na bázi NN jenž je porovnáván s dostupnými daty v literatuře či jinými „klasickými“ potenciály. V této části není, co by se dalo dané diplomové práci vytknout, jelikož se jedná o nejhodněji zvolený postup řešení.</p>	

Odborná úroveň

výborná

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

Odbornou úroveň hodnotím jako výbornou. Student se velice vhodně zorientoval v dostupné literatuře a správně vybral relevantní zdroje které dobře propojil s tématem dané práce. Schopnost dobře využít tyto znalosti pro podporu vlastní práce ukazuje uvážlivý a zejména aktivní přístup práci. Student tedy v práci shrnuje získané znalosti v oblasti strojového učení, resp. neuronových sítí, atomistických simulací a slitin s paměťovým efektem. Presentované znalosti považuji za dostatečné pro splnění zadání diplomové práce a její úspěšnou obhajobu. Mám však zde připomínku k teoretické části kde bych uvítal delší/rozsáhlejší pojednání o neuronových sítích.

Formální a jazyková úroveň

výborná

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

Práce je napsána v anglickém jazyce, jednotlivé části jsou srozumitelné a pro čtenáře dobře čtivé. Volbu napsat práci v tomto jazyce hodnotím jako pozitivum, jelikož to reflektuje studentovy schopnosti pracovat aktivně s anglickým textem. Zde bych upozornil na nutnost dodržování přesnosti některých pojmů. Např. dle mého názoru jsou na obr. 2.30 a 2.31 „gamma“ plochy. Prosim tedy zda by student během obhajoby neupřesnil rozdíl mezi vrstvenou chybou „stacking fault“ a „gamma“ plochou.

Výběr zdrojů, korektnost citací

výborné

Vyjáďte 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.

Zdroje uvedené v práci jsou vybrané vhodně ve spojení se studovanou problematikou a jsou zde citované vědecké články předních výzkumných kapacit v daných oborech (zejména práce autorů jako Sehitoglu, Otsuka, Ackland). Zde musím však vytknout chybějící citaci na studentovu bakalářskou práci, jenž je v textu odkazována (poslední věta části 1.1), ale daná reference vede na jinou publikaci v seznamu literatury. Dále pak student přehlédl jednu práci (oponenta), jenž se přímo nabízí k porovnání se zde prezentovanými daty (strana 56-57 smyk (100)[001]). Konkrétně se jedná o publikaci P. Šesták, Acta Materialia 109 (2016) 223-229. Rád bych tedy zda by student při obhajobě porovnání s výše uvedenými daty komentoval a vysvětlil případné rozdíly.

Další komentáře a hodnocení

Vyjáďte 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.

Za hlavní výsledek považuji konstrukci NN NiTi potenciálu pro molekulární dynamiku a demonstraci jeho funkčnosti včetně jeho výhod a nevýhod. Z prezentovaných dat je patrné, že potenciál dokáže poskytnout přesnější výsledky (pokud nedojde k extrapolaci) než současně dostupné klasické potenciály. Tento výsledek je na vysoké úrovni vzhledem k diplomové práci. V další řadě je také je v práci kompletně shrnut postup získávání „training dat“ a následné testování „benchmark“ potenciálu.

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.

V závěrečném hodnocení jsem významný čas přemýšlel, zda celkové hodnocení zvolit „A“ či „B“. Nicméně vzhledem k tomu, že se zde student pustil do poměrně náročného tématu, tak i přes několik nedostatků práce, jež zmiňuji v hodnocení výše, jsem nucen dát hodnocení „A“ a to zejména s přihlédnutím k vybranému materiálu (slitina NiTi), jež je v oblasti atomistických simulací extrémně náročný. Hovořím zde hlavně ze své vlastní zkušenosti, neboť jsem na toto téma zpracovával disertační práci a jsem si tedy vědom faktu, že molekulární dynamika byla prakticky v té době nepoužitelná, jelikož nebyla schopna reflektovat ani základní chování této slitiny a prvoprincipiální simulace mají také svá omezení a je nutno vzít např. v potaz i fakt, že je zde velký nesoulad mezi experimentem a teorií (B19' a B33). Pro studenta je tedy tato diplomová práce skutečnou výzvou.

K práci mám ještě následující připomínky a doplňující otázky.

1. Student v práci popisuje důležité nastavení programu VASP. Zde mi však jedno konkrétní téma chybí. Jedná se o nastavení vyhlazení Fermiho meze (smearing – VASP tag ISMEAR a SIGMA). Rád bych se studenta dotázal, zda kontroloval vhodnost velikosti „rozmazání“ této meze a jakou metodu použil (Gaussian smearing, tetrahedron nebo Methfessel-Paxton).
2. Mohl by student během obhajoby okomentovat odhad počtu struktur nutných pro vygenerování NN potenciálu a porovnat tento počet s „kernel based“ metodami?
3. Rád bych také pokud by student také diskutoval stupně volnosti (někdy také označované jako podmínky relaxace) při smyku (100)[001].
4. Student se v práci zmiňuje o biokompatibilitě slitiny NiTi. Mohl by během obhajoby vysvětlit biokompatibilitu samotného niklu?
5. Může student popsat, jak přesně pracoval s faktem, že dle prvoprincipiálních simulací je struktura s nižší energií B33 a dle experimentu B19'? Např. při stanovení elastických konstant?
6. Byly zkoušeny i jiné „klasické“ potenciály pro LAMMPS?

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

Datum: 26.1.2024

Podpis: