

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Implementace algoritmu optimalizace hejnem částic do programu FOX
Jméno autora:	Milan Kočí
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra inženýrství pevných látek
Oponent práce:	Radovan Černý
Pracoviště oponenta práce:	Universita Ženeva

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	náročnější
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Zadání diplomové práce patří k těm náročnějším, protože kromě dobré znalosti strukturní chemie pevných látek a krystalografie je zapotřebí také dobrá úroveň znalosti programování v jazycích C++ a Python.	

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>	
Zadání diplomové práce bylo splněno v celém rozsahu.	

Zvolený postup řešení	vhodný
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
Postup řešení, t.j. modifikace kódu programu Fox s využitím knihovny ObjCryst, je správný postup. Rovněž zvolené testovací struktury byly vhodně vybrány tak aby pokryly inorganické krystaly s koordinačními polyhedry i molekulové krystaly s různým stupněm komplexnosti.	

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>	
Závěrečná práce má výbornou odbornou úroveň. Student prokázal plné porozumění problematice globální optimalizace aplikované na řešení krystalových struktur z dat práškové difrakce.	

Formální a jazyková úroveň	výborná
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
Odborná terminologie je v práci používána správně, malé připomínky budou diskutovány během obhajoby. Typografická úroveň práce je výborná.	

Výběr zdrojů, korektnost citací	výborné
<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>	
Předchozí práce jsou citovány správně, nenašel jsem žádné porušení citační etiky. Student prokázal plnou znalost předchozích prací zabývajících se stejnou problematikou.	

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.

Hlavním, a velmi cenným, výsledkem diplomové práce je naprogramování algoritmu "Optimalizace hejnem částic" do programu Fox. Efektivnost naprogramování algoritmu nejsem schopen posoudit, ale ze srovnání s algoritmem "Paralelní temperování" na testovacích příkladech vyplývá srovnatelná rychlost prohledávání parametrového prostoru.

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.

Celkově na mne práce udělala velmi dobrý dojem. Autor pochopil správně zadaný problém a našel efektivně a rychle správné řešení.

Otázky a komentáře k obhajobě:

- Strana 5: Factory Rp a Rwp existují také ve verzi kdy pozadí je odečteno. Takto je vlastně původně definoval H. Rietveld.

- Strana 9: Kde je v rovnici 2.1 zahrnuta chemická informace (vazebné délky, úhly, Bond valence sum) ?

- Strana 14: Jsou sousední částice (doporučeno 3) částice nejbližší dané částici?

- Strana 16: Je v algoritmu PSO užívaná chemická informace (délka vazeb)?

- Strana 17: Definice parametru w připomíná Shannonovu informační entropii. Je to náhoda?

- Strana 19: Metropolisově spíše než Metropolitním.

- Strana 20: Z čeho plyne omezení dimenze problému na 20 v Bayesovské optimalizaci?

- Strana 30: Z výsledku vyplývá, že pro PbSO₄ dominují LSQ spíše než PSO. Souhlasíte?

- Strana 31: DICVOL není součástí programu Fox. Ten má svou vlastní indexovací rutinu, která používá stejnou metodu jako DICVOL, algoritmus dichotomie.

- Z textu není úplně jasné, zda "lokální optimalizace" znamená LSQ anebo jenom prohledávání omezené části parametrového prostoru pomocí PSO.

- Bude práce publikována alespoň na serveru GitHub?

- Stačí pro práškovou difrakci základní verze jednotlivých algoritmů globální optimalizace anebo je zapotřebí další vývoj komplikovanějších ale výkonnějších algoritmů?

- Znáte nějakou práci kde byla srovnávána výkonnost jednotlivých algoritmů globální optimalizace na jednom problému (pokud možno krystalografickém nebo chemickém či fyzikálním)?

- Z výsledků vyplývá, že PSO počítá rychleji a zdá se být výkonnější pro molekulární krystaly. PT je nepřekonatelný pro krystaly s koordinačními polyhedry. Souhlasíte?

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

Datum: 22.1.2024

Podpis:

