

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Implementace algoritmu optimalizace hejnem částic do programu FOX
Jméno autora:	Mgr. Milan Kočí
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra inženýrství pevných látek
Vedoucí práce:	Ing. Jan Drahokoupil, Ph.D.
Pracoviště vedoucího práce:	KIPL FJFI ČVUT

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání a motivace k jeho vypsání	náročnější
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce a krátké průvodní slovo k motivaci pro zadání práce.</i>	
Motivací zadání bylo využít předchozí zkušenosti z oblasti predikování a řešení krystalických struktur pro otestování, zda algoritmus optimalizace hejnem částic by nemohl v některých případech poskytnout snadnější cestku k vyřešení krystalické struktury než běžně používaný algoritmus paralelního temperování.	

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>	
Klepněte sem a zadejte text.	

Aktivita a samostatnost při zpracování práce	výborná
<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>	
Klepněte sem a zadejte text.	

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>	
Klepněte sem a zadejte text.	

Formální a jazyková úroveň	průměrná
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
Klepněte sem a zadejte text.	

Výběr zdrojů, korektnost citací	výborné
<i>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.</i>	
Klepněte sem a zadejte text.	

Další komentáře a hodnocení	
<i>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.</i>	
V práci se nejenom podařilo splnit všechny cíle, ale dokonce implementovaný algoritmus, optimalizace hejnem částic, při řešení trochu složitější organické struktury (Sofosbufir) předčil několikanásobně dosavadní	

implementaci využívající paralelní temperování. A z dosažených výsledků lze předpokládat, že pro složitější struktury si povede ještě lépe.

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.

Zadání práce bylo hodně náročné. Milan Kočí si musel kromě jiného také rozšířit své znalosti z linuxu a pythonu. Velmi obtížným krokem bylo prostudovat a porozumět kódu programu FOX na řešení struktur z práškových difrakčních dat. Pak teprve mohl Milan Kočí přistoupit k vlastní práci implementování algoritmu optimalizace hejnem částic do tohoto programu. V práci se nejenom povedlo dotáhnout implementaci do zdárného konce, ale také byl algoritmus vyzkoušen na třech vybraných strukturách a bylo provedeno i testování vlivu vlastních parametrů algoritmu na úspěšné řešení struktury Paracetamolu.

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

Datum: 30.1.2024

Podpis:

