



**Posudek školitele na disertační práci Ing. Davida Celného**  
***Development of parallel algorithms for molecular dynamics simulation***  
***of heterogeneous atomistic systems***

Davida jsem „zdědil“ po Dr. J. Hrubém (školitel) a Dr. V. Vinšovi (školitel-specialista) v okamžiku, kdy již měl značnou část práce na téma nukleace hotovou. V době, kdy David hledal další uplatnění, jsme v naší laboratoři zkoumali supersonickou expanzi vodní páry (a dalších plynů) metodou molekulové dynamiky. Tento projekt byl motivován experimenty provedenými v laboratoři M. Fárníka a J. Fedora na ÚFCH JH. Vyvinuli jsme originální metodu, která svazuje molekulovou dynamiku s rovnicemi fluidní dynamiky. Naše implementace této metody však pracovala pomalu, protože běžné postupy paralelizace založené na doménové dekompozici nebyly pro nehomogenní systém obsahující plyn a klastry efektivní. V tomto okamžiku přišel David s unikátními znalostmi v oboru moderní počítačové technologie a pustil se do implementace molekulové dynamiky silně nehomogenních systémů pro nejmodernější dostupný masivně paralelní hardware – grafické procesorové jednotky. I když práce byly přerušeny výjezdem do Německa, kde se David zabýval třetí tematikou, nakonec požadovaný software vyvinul k plné spokojenosti. V tomto okamžiku jsou výsledkem dvě publikace. První práce publikovaná v *J. Chem. Theory Comput.* je zaměřena na technické aspekty a David je po zásluze prvním autorem. V druhém článku přijatém k publikaci v *J. Chem. Phys.* a zaměřeném na vlastnosti simulovaných klastrů je spoluautorem, je ale zřejmé, že bez jeho softwaru by tato práce nevznikla.

Tím výčet Davidových výsledků nekončí. Předchozích témat se týká prvoautorská publikace ve *Fluid Phase Equil.* (modelování rozhraní pomocí gradientní teorie) a v recenzním řízení je práce o detekci klastrů v metastabilních systémech, kde je také prvním autorem. Web of Science uvádí celkem 10 záznamů, z toho 1 se netýká disertace, 2 prvoautorské jsou zmíněné výše a v ostatních je David spoluautor s různou mírou zapojení.

Jak je vidět, materiálu na kvalitní disertaci nashromáždil David více než dost. Bohužel při sepisování byl tlačěn termínem a na některých částech práce je rychlost znát. Závady jsou však formální – nepřesné formulace, ne dobře strukturovaný výklad, kostrbatá angličtina. Tyto nedostatky však nejsou zásadní. Vzhledem k velkému objemu práce na obou působištích i širí vědeckých zájmů **disertaci doporučuji k obhajobě.**

V Praze dne 30.08.2023

prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.