

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Simulace nanoindentace pomocí molekulární dynamiky
Jméno autora:	Bc. Tibor Košťál
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra inženýrství pevných látek
Vedoucí práce:	Ing. Jan Drahoukoupil, Ph.D.
Pracoviště vedoucího práce:	Katedra inženýrství pevných látek

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání a motivace k jeho vyspání	průměrně náročné
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce a krátké průvodní slovo k motivaci pro zadání práce.</i>	
Molekulární dynamika (MD) se v posledních letech, zejména díky nárůstu výpočetního výkonu počítačů, stává velmi užitečným nástrojem v materiálovém výzkumu. Úroveň dosažených výsledků simulací pomocí MD je ve stádiu, kdy je ještě vhodné ověřovat její výsledky s nějakou experimentální technikou na experimentálně dobře definovaných vzorcích. Poté je možné extrapolovat její výsledky na situace, kdy je provedení experimentu náročné či dokonce nemožné. Cílem práce bylo provést simulace nanoindentace v programu LAMMPS na strukturách titanu a ukázat shodu s experimentálními daty.	

Splnění zadání	splněno s výhradami
<i>Posudte, 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>	
Předložená diplomová práce splňuje zadání. V některých směrech co se týče obsahu dokonce částečně přesahuje do dalších oblastí (různé indentory, beta fáze titanu). Bohužel však, tak jak její zpracování předloženo, působí nepřesvědčivým dojmem. Postup simulací, jejich nastavení a interpretace nejsou dostatečně popsány, tak velmi často musí čtenář hádat jaké nastavení bylo provedeno. Např. v kapitole 5.1 není napsáno do jaké orientace byla prováděna indentace, jaká byla teplota, jakým indentor byl použit, atd. Obdobně tomu je v dalších kapitolách.	

Aktivita a samostatnost při zpracování práce	podprůměrná
<i>Posudte, zda byl student během řešení aktivní, zda dodržoval dohodnuté termíny, jestli své řešení průběžně konzultoval a zda byl na konzultace dostatečně připraven. Posudte schopnost studenta samostatně tvůrčí práce.</i>	
Diplomová práce byla zadána již na podzim roku 2022. Student pracoval samostatně, konzultace byly prováděny spíše nárazově. Připravenost na jednotlivé konzultace, s ohledem na další mnou vedené studenty, hodnotím podprůměrně. Vzhledem k datu zadání diplomové práce hodnotím přístup spíše pasivní než aktivní.	

Odborná úroveň	podprůměrná
<i>Posudte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
Sepsaná práce na mne částečně působí dojmem cíle splnit zadání, neřešit věci, které přímo nesouvisí s dosažením cíle. Tento způsob práce je pravděpodobně vhodný v komerčním světě, ale ve světě vědy a poznání, působí nepřesvědčivě a o odborné úrovni lze pochybovat, protože pro předložené výsledky nejsou postaveny řádné základy. Některá nastavení nejsou v práci adekvátně zmíněna, např. jaký byl použit meziatomový potenciál pro Ti.	

Formální a jazyková úroveň	podprůměrná
<i>Posudte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posudte typografickou a jazykovou stránku.</i>	

Práce je napsaná v anglickém jazyce. Ač jsou některé pasáže pěkně a srozumitelně napsány, celkově jde jazykovou úroveň charakterizovat spíše jako proměnlivou. V některých místech je patrné, že byla práce sepisována na poslední chvíli. V úvodní části nejsou použity žádné vlastní obrázky, pouze převzaté. Některé formulace působí jako převzaté z nějakého jazykového modulu umělé inteligence.

Výběr zdrojů, korektnost citací

podprůměrné

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 práci mi chybí uvedení současného stavu poznání, zejména články z posledních několika málo let. V některých případech, kde by to bylo vhodné, nejsou uvedeny citace. Např. kapitola 2.2. Uvítal bych také komplexnější porovnání výsledků s literaturou jak výsledky experimentální, tak teoretické.

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.

Zadané téma vyžadovalo větší porci samostatné práce, jednak nastudování vhodných příkazů programu LAMMPS a sepsání indentačního skriptu a dále také proto, že tato metodika není ještě důkladně zavedena na pracovišti školitele. Kladně lze hodnotit sepsání a přiložení skriptu pro program LAMMPS, v kterém byla prováděna simulace indentace pomocí MD. Tento skript má cca 90 řádků a může být dobrým startovním myšlením pro případné následovníky.

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.

Základní cíle práce byli splněny, student nastudoval proces indentace, seznámil se s tématem MD, sepsal skript pro program LAMMPS, spustil simulace pro několik různých počátečních nastavení a dosažené výsledky porovnal s experimentálními daty. Celkově však práce působí dojmem „šité horkou jehlou“. Ač může časový prostor pro diplomovou práci na různých vysokých školách být různý, měl by celkový rozsah práce být úměrný kreditovému ohodnocení předmětu diplomová práce, který je v součtu pro náš obor 30 kreditů, odhadem tedy 30h týdně jeden semestr. Bohužel předložená práce tomuto standardu, tak jak je odevzdána, neodpovídá.

Domnívám se, že by bylo vhodné, během obhajoby, pro alespoň jeden výsledek, důkladně projít všechny výpočty, nastavení a interpretaci nasimulovaných křivek. A vyvrátit tak pochybnosti o jejich zprávnosti vzhledem ke kvalitě provedené práce.

Otázky:

Byly použity nějaké nástroje umělé inteligence, případně jakým způsobem?

Jaký byl použit meziatomový potenciál pro titan a je tento potenciál vhodný pro simulaci nanoindentace?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **D - uspokojivě**.

Datum: 24.5.2024

Podpis:

