



Posudek disertační práce

Uchazeč Ing. David Šedlbauer

Název disertační práce Stochastic Hard Packing for Heterogeneous Materials Modelling via Wang Tilings

Studijní obor Fyzikální a materiálové inženýrství

Školitel doc. Ing. Matěj Lepš, Ph.D.

Oponent prof. Ing. Jan Zeman, Ph.D.

e-mail jan.zeman@cvut.cz

Aktuálnost tématu disertační práce

komentář: Předkládaná disertační práce se zabývá vývojem nových algoritmů pro generování konfigurací tvrdých částic za použití tzv. Wangových dláždění. Takové algoritmy nacházejí široké aplikace nejen v oboru fyzikálního a materiálového inženýrství, ale i v dalších příbuzných disciplínách. Principy Wangova dláždění byly zatím hlavně využívány v počítačové grafice na generování textur nebo pro popis a simulaci samoskládání, aplikace na modelování uspořádaných a neuspořádaných souborů částic jsou zatím velmi řídké. Proto považuji téma práce za dostatečně aktuální.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Splnění cílů disertační práce

komentář: Na straně 18 autor specifikuje následující tři cíle disertační práce:

1. Implementace algoritmů pro generování neuspořádaných souborů částic pro obecná Wangova dláždění založených na modelech molekulární dynamiky.
2. Vývoj nových okrajových podmínek na hranicích Wangových dlaždic, které jsou kompatibilní s molekulární dynamikou.
3. Rozšíření tohoto algoritmu o vliv cílové prostorové statistiky.

Výsledky prezentované ve třetí a čtvrté kapitole prokazují, že autor těchto cílů dosáhl. Mám nicméně několik připomínek k popisu použitých metod a k reprodukovatelnosti získaných výsledků, které zmiňuji detailněji v dalších částech posudku.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Metody a postupy řešení

komentář: Dle mého názoru se jedná o nejslabší aspekt předkládané disertační práce. Hlavní problém spatřuji v tom, že autor řadu kroků a argumentů v disertační práci popisuje slovně a dost obecně, není proto jasné, jak vyvinuté algoritmy fungují, jaké jsou jejich vstupní parametry, jak roste jejich výpočetní náročnost s rostoucím počtem částic a jaký je jejich časová náročnost. Výsledky prezentované v práci je tak obtížné nezávisle ověřit.

Jako příklad uvádím:

* Kapitulu 2.3, kde je krátce představena tzv. dvojbodová pravděpodobnostní funkce. V práci se ale používají i jiné prostorové statistiky (velikost rozdělení pórů, kumulativní počet částic), které autor v této části pomíjí a ani nijak nenaznačuje, jak je určil.

* Chybí detailní popis algoritmu založeného na molekulární dynamice, z předkládaného textu není jasné, jaké jsou jeho vstupní parametry, jakou má výpočetní náročnost, a jak (a proč) byly voleny parametry algoritmu pro získání výsledků prezentovaných ve třetí a čtvrté kapitole.

* U Particle Swarm Optimization (PSO) zcela chybí informace o tom, jak souvisí parametry algoritmu s cílovou funkcí, která má být minimalizována.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Výsledky disertace - konkrétní přínosy disertanta

komentář: Hlavní příspěvky předkládané práce spatřuji hlavně v

* navržení nového konceptu „adaptivních stěn“, které umožňují generovat soubory o vysokém objemovém zastoupení pomocí metod molekulární dynamiky a Wangova dláždění,

* využití podobnosti algoritmu PSO s metodami molekulární dynamiky pro konstrukci dláždění s předepsanou prostorovou statistikou.

Tyto dva nápady jsou velmi zajímavé a představují originální příspěvek Ing. Šedlbauera k řešené problematice (dle mých znalostí celosvětově). Je dle mého názoru škoda, že se je kandidát nepokusil publikovat v recenzovaném (mezinárodním) časopise, při recenzním řízení by se jistě vyřešila řada připomínek zmíněných jinde v posudku.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Význam pro praxi a pro rozvoj vědního oboru

komentář: Jak jsem zmínil v předchozím bodě, práce přispívá k rozvoji oboru generování souborů částic, což je téma s velmi dlouhou historií. Příspěvek pro praxi je jen nepřímý a dlouhodobý, ve smyslu využití přesnějších modelů heterogenních materiálů pro řešení inženýrských úloh.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Formální úprava disertační práce a její jazyková úroveň

komentář: Práce má kvalitní formální úroveň, množství chyb a překlepů v anglickém textu je adekvátní rozsahu. Kladně hodnotím práci s literaturou, jisté rezervy spatřuji ve vysázení rovnic.

vynikající nadprůměrný průměrný podprůměrný slabý

Připomínky

Při obhajobě disertační práce **požadují**, aby kandidát zodpověděl následující otázky:

1. Definujte a vysvětlete všechny prostorové statistiky využívané v disertační práci, včetně postupu jejich výpočtu.
2. Popište prosím algoritmus založený na molekulární dynamice, s důrazem na jeho vstupní

parametry, vliv velikosti simulovaného souboru a typické časy nutné pro simulaci. Uveďte též, jaké hodnoty parametrů jste používal a proč.

3. U generování souborů částic pomocí algoritmu PSO vysvětlíte, jak jeho parametry souvisí s cílovou funkcí. Uveďte též definici cílové funkce a zdůvodněte volbu parametrů algoritmu.

U všech otázek se prosím pokuste prezentovat příslušné postupy tak, aby je bylo možné reprodukovat jiným výzkumníkem pracujícím v příbuzné oblasti.

Závěrečné zhodnocení disertace

Za hlavní **silnou** stránku předkládané disertační práce považuji především získání nových výsledků v teoreticky náročné oblasti, která je široce pokryta ve světové literatuře.

Hlavní **slabou** stránku práce pak spatřuji v obtížné reprodukovatelnosti předkládaných výsledků, způsobené příliš obecným popisem vyvinutých metod.

I když jsem na řadě míst tohoto posudku kritický, domnívám se, že Ing. David Šedlbauer v předkládané práci prokazuje schopnost **samostatné vědecké práce** na náročném tématu, které kombinuje pokročilé partie statistiky, výpočetní geometrie, optimalizace a programování, což je hlavní rys úspěšného doktorského studenta. Proto kandidátovi doporučuji udělit titul Ph.D., pokud v průběhu obhajoby úspěšně zodpoví tři otázky uvedené výše.

Doporučuji po úspěšné obhajobě disertační práce udělení titulu Ph.D. ano ne

Datum: 8.5.2019.....

Podpis oponenta:.....

Jan Zeman