



## 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 doc. Ing. Robert Zemčík, Ph.D.

e-mail zemcik@kme.zcu.cz

### Aktuálnost tématu disertační práce

komentář: Téma modelování materiálů s heterogenní strukturou na mikro či nano úrovni je rozhodně aktuální a je předmětem velkého množství vědeckých prací. To dokládá jednak provedená rešerše, i obsáhlý seznam literatury v předkládané disertaci.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Splnění cílů disertační práce

komentář:

Cíle práce byly navrženy celkem tři (3). Zaprvé, vyvinout algoritmus pro obecné dláždění (anglicky "tiling") a implementovat principy molekulární dynamiky pro materiálové struktury s kruhovými či kulovými inkluzemi. Zadruhé, vytvořit algoritmus pro tvorbu Wangových dlaždic založený na modifikované molekulární dynamice, definovat okrajové podmínky pro účinné potlačení nežádoucích artefaktů periodicity a implementovat statistický popis pro porovnání rozdělených oblastí. Zatřetí, implementovat a/nebo modifikovat optimalizační metody do algoritmu pro tvorbu dlaždic, ověřit tyto algoritmy na umělých vzorcích a rekonstruovat skutečnou náhodnou heterogenní materiálovou mikrostrukturu.

Všechny tři navržené cíle byly bezesporu splněny.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Metody a postupy řešení

komentář: Student zvolil zajímavý přístup, kdy k popisu heterogenní struktury využil metodu Wangovo dláždění, která měla v nedávné době aplikace zejména v oblasti počítačové grafiky.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Výsledky disertace - konkrétní přínosy disertanta

komentář: Student vytvořil celou řadu algoritmů a modelů. V práci však detailní informace o algoritmech chybí (většinou jsou popsány jen slovně), není zde ani zmínka o softwaru, jazyku či platformě, které autor použil. Rovněž matematický popis problémů není výstižný. V práci je několikrát zmíněna optimalizace, ale matematický zápis definice objektivní funkce úplně chybí. Přitom např. v diplomové práci „Zrůbek L. Wangovo dláždění v numerické analýze kompozitů, 2012“, tedy na velice podobné téma a z téhož pracoviště, jsou matematické modely a vytvořené

algoritmy popsány mnohem detailněji a srozumitelněji.

Výsledky jsou vždy ukázány a porovnány na několika (např. třech až pěti) variantách. Vzhledem k podstatě problému, tj. náhodnosti, by bylo přínosné provést statistické vyhodnocení pro řádově vyšší počet variant (desítky až stovky).

Jako největší přínos disertanta každopádně považuji právě tvorbu, kombinaci a ladění algoritmů pro generování Wangovo dláždění. Je velmi pravděpodobné, že se muselo jednat o mnoho času, dílčích nápadů a kombinatorického úsilí, nutného k překonání mnoha překážek, aby algoritmus běžel hladce, a to z důvodu relativně „malé prošlapanosti cestiček“ v této oblasti.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Význam pro praxi a pro rozvoj vědního oboru

komentář: Lze očekávat, že vytvořené algoritmy a prvotní získané výsledky jistě najdou uplatnění v navazujícím výzkumu. Příkladem může být především analýza mechanických vlastností náhodných heterogenních struktur, která umožní lépe popsat chování existujících struktur, nebo navrhnout struktury s vlastnostmi lepšími.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Formální úprava disertační práce a její jazyková úroveň

komentář: Práce je sepsána v anglickém jazyce. Některé obraty nejsou standardní a jsou tak hůře pochopitelné (např. str. 18 „This doctoral thesis ..., which 2D or 3D sample are composed of ...“, str. 67 „... 10 particles include no tile.“). V textu se míchá britské a americké hláskování (fiber/fibre, neighbor/neighbour), jsou tam drobné překlepy (ensamble, databases, aplicated...) a často není dodržena shoda podmětu s přísudkem (zejména u 3. osoby j.č.). Většinu chyb je schopen běžný nástroj opravy pravopisu (třeba v MS Word) snadno odhalit.

V textu je uváděno množství číselných hodnot (počty, velikosti, poměry...), ale bez použití jednoznačného označení veličiny. To znemožňuje porovnávat jednotlivé části textu, texty s grafy a parametry analyzovaných variant.

vynikající     nadprůměrný     průměrný     podprůměrný     slabý

### Připomínky

Formální připomínky:

1. Číslování stránek přechází z „... ix, x“ na „13, 14 ...“.
2. Odkazy na literaturu by měly být v textu zakomponovány tak, aby bylo možné věty přečíst. Např. tento zápis na str. 17 dole nedává smysl „Now, researchers are able ... [9], [10], or [11].“ Pravděpodobně mělo být „... [9, 10, 11].“
3. U Fig. 2-3 by možná bylo přehlednější zobrazit rozvinuté pláště daných krychlí.
4. U Fig. 2-4 by bylo vhodné uvést poloměry kružnic, velikost oblasti nebo jejich poměry.
5. Vztah (2.1) je hůře čitelný. Chybí i vysvětlení poprvé použitých veličin  $\square$ ,  $x$  a  $y$ . Dá se vůbec integrovat přes  $dx$  ( $x$  je rovně a tlustě, tedy jde o vektorovou veličinu)?
6. 3.1 – zde se chaoticky míchají osy  $y$  a  $z$ . Není zřejmé, v které rovině se částice vyskytují (oblast  $\square$  z (2.1)). Nepřehledně jsou značeny složky rychlosti, místo standardního  $v_x$  je  $v_x!$
7. U složených obrázků, např. Fig. 3-18, je prohozené označení Left/Right,
8. 4.3.3 – pro porovnání s předchozím zde chybí konkrétní hodnota objemového podílu.

Dotazy na studenta:

1. Co přesně míníte pojmem „periodicity artefact“? Vysvětlete prosím větu z 3.2: „The main goal ... is to reduce ... artefacts, while keeping compatibility...“ Nemělo by to jít tzv. ruku v ruce?
2. 3.2.4 – co je to „great periodicity number“?
3. 3.2.5 – jak konkrétně byla definována objektivní funkce a proč (je to inspirace skutečností)?
4. Fig. 3-13 – na okraji oblasti u metody WT-AW nejsou aplikovány žádné podmínky periodicity? Je zachován stejný objem oblasti, jako má artificial sample?
5. Fig. 3-14 (horní vs. spodní varianta) – Můžete porovnat náročnost optimalizačního procesu, který najde konkrétní rozmístění inkluzí ve zvoleném Wangovo dláždění s procesem, který hledá stejně kvalitní náhodnou mikrostrukturu na celé oblasti (bez PUC, bez dlaždic)? Můžete ukázat graf S2 pro jednu variantu, tj. bez průměrování přes všechny realizace? Nedochází tímto průměrováním k nereálnému vylepšení výsledků?
6. Fig. 3-21 – proč je prostřední varianta barevná? Nebylo by výhodnější vytvořit tyto tři varianty tak, aby měly stejný histogram (a ideálně s lineárním průběhem)?
7. Jak byla definována zastavovací podmínka u PSO (4.9–4.12)?
8. 4.2.1 – Jaký je důvod použití a jaký je vztah mezi podmínkami „... the objective function is defined as a sum of the quadratic differential of two-point probabilities“ a „The distance between particles has been minimized...“?
9. 4.2.2 – jak konkrétně byla definována objektivní funkce (error v Fig. 4-35) a proč? Fig. 4-32 – nejde omylem o dva identické grafy S2? Vysvětlete důvod použití hodnot 12.55% a 6.25%.
10. Fig. 4-41 a 4-48 – jak byla vygenerován spodní „random“ konfigurace? Jiným náhodným uspořádáním optimalizovaných dlaždic?
11. Z textu práce není zcela zřejmé, jak se dají pracně vygenerované mikrostruktury dále využít (viz např. abstrakt „... je vhodnější využít konceptu Wangova dláždění...“), konkrétně, jak je možné vytvořit výpočtový model (např. MKP) sloužící k určení pole posuvů, deformací a napětí (nebo pro inverzní úlohu, tj. k určení elastických konstant) dané struktury, a to s využitím samostatných, ale vzájemně vazbami (?) propojených Wangovo dlaždic (podobně jako je to u periodických okrajových podmínek na PUC). Nebo takový model bude používat síť celé výsledné oblasti bez ohledu na to, jakým algoritmem byla vygenerována?
12. Existuje Wangovo dláždění i s nepravoúhlými dlaždicemi (lichoběžníky, trojúhelníky, šestiúhelníky) a mohla by taková topologie mít nějaký příznivý vliv na potlačení nežádoucích artefaktů (pravidelně se vyskytující póry v rozích, které patrně mohou vyvolávat jakousi parazitní ortotropii (tuhost, pevnost) u takovéto pseudonáhodné struktury)?

### Závěrečné zhodnocení disertace

V práci uvedené odkazy na publikace autora svědčí o průběžné konfrontaci postupů a výsledků s odbornou veřejností. Je škoda, že patrně jen na tuzemských akcích. Věřím, že kdyby autor měl možnost konfrontovat výsledky a způsob jejich prezentace již během studia i na prestižní zahraniční akci (nebo samozřejmě v prestižním odborném časopise), byla by velká pravděpodobnost, že některé nejasnosti v mých připomínkách by již byly předem vyřešeny. Obsah práce je rozhodně velmi kvalitní.

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

ano

ne

Datum: 30.4.2019 .....

Podpis oponenta: .....