

Posudek oponenta na bakalářskou práci studenta oboru MINF

Jana Fejtka

Intervalová analýza a její použití pro řešení problému fázové stability

Předložená bakalářská práce (BP) se zabývá výpočtem fázové stability směsí pomocí metody větví a mezí. Práce je svým rozsahem dostačující a dobře strukturovaná. První, motivační kapitola se věnuje matematickému popisu úlohy fázové stability směsí a je v ní popsána potřeba hledání globálního minima funkce TPD. Ve druhé kapitole je popsána metoda větví a mezí s využitím intervalové aritmetiky pro globální optimalizaci a dále její implementace ve třetí kapitole. Poslední kapitola obsahuje komentované výsledky několika testů fázové stability směsí.

Po obsahové stránce považuji BP za zdařilou. V kapitole 3, která je věnována popisu implementace, bych akorát uvítal výpis kódu (nebo jeho částí), což by dobře doplnilo uvedený slovní popis jednotlivých komponent (tříd, metod) kódu. Velmi oceňuji především provedené testy uvedené v kapitole 4, přestože byly provedeny na poměrně slabém hardwaru vzhledem k výpočetním možnostem, které jsou dostupné na KM FJFI ČVUT v Praze.

Po formální stránce trpí BP řadou nedostatků, především větším množstvím gramatických chyb a překlepů téměř na každé straně (a to dokonce i v klíčových slovech!) a občasnou zmatečnost značení. Za všechny viz příklad na str. 17, kde není jasné, zda c_i označuje interval nebo reálné číslo (složku vektoru koncentrací) – jednou je uvedeno $0 \in c_i$, o kousek dál je rozebírána monotonie funkce $c_i \ln \frac{c_i}{c_i^*}$. Na pár místech BP by se hodilo k odkazování na rovnice použít čísla rovnic. V kapitole 4 by bylo vhodné do každého obrázku uvést legendu vysvětlující černou, šedou a bílou barvu (z poznámky na str. 24). Drobnou poznámku bych též měl k používání jednotek teploty, kde doporučuji používat jen K , aby pak nevznikly chyby jako $380^\circ C$ na str. 27 apod.

V závěru práce autor dobře shrnuje použitelnost algoritmu a jeho výpočetní nároky. K navrhovaným dalším krokům (v případném navazujícím výzkumném úkolu) bych doporučil přidat paralelní implementaci algoritmu pro použití na výpočetních klastrech dostupných na KM FJFI ČVUT v Praze a především prozkoumat, zda by šel algoritmus masivně paralelizovat na GPU (na KM lze v současnosti využít až 24 GiB RAM na jedné grafické kartě nebo zapojit více GPU pomocí MPI a mít až 64 GiB RAM, viz <http://mmg.fjfi.cvut.cz/mmg/gpu>, <http://helios.fjfi.cvut.cz>).

K BP bych měl následující poznatky, připomínky a dotazy. Dotazy by bylo vhodné zodpovědět během obhajoby.

1. Na straně 13 je za definicí 2.1.4 zmíněno, že "Dále budeme potřebovat vícerozměrné intervaly", aniž by to bylo dále rozvedeno. Lze něco obecně říct o zavedení intervalového rozšíření funkce f pro vícerozměrné intervaly?
2. Na straně 19 je zmíněno, že "Algoritmus je numerický a všechny výsledky budou zatížené nepřesnostmi." Zde by určitě bylo dobré buď definovat, co je tím myšleno

nebo rovnou uvést, že bude algoritmus počítán v konečné strojové aritmetice, odkud plynou uvedené nepřesnosti.

3. Z popsané implementace mi není zcela jasné, jak se pracuje v kódu s pamětí (zdrojové kódy nebyly přiloženy). Bylo by možné vysvětlit, proč je algoritmus ukončen pro nedostatek paměti, pokud je intervalů více jak $1/3$ kapacity pole, viz strana 22?
4. Bylo by možné ukázat graf, jak závisí spotřebovaná paměť a časová náročnost výpočtu na počtu intervalů? Stačí doplnit např. k výsledkům úlohy uvedených na Obr. 4.1, 4.2, 4.3. Lze odhadnout a stručně okomentovat složitost algoritmu?
5. Pro ušetření paměti by se též dalo zvážit i použití jednoduché přesnosti místo dvojité, což úzce souvisí s případnou budoucí implementací na GPU. Daly by se v rámci prezentace zopakovat testy pro příklad 1-složkové směsi (CO_2) s výpočtem v jednoduché přesnosti s otázkou, zda tato přesnost bude stačit k získání stejných nebo podobných výsledků jako na Obr. 4.1, 4.2 a 4.3.

Výše popsané nedostatky nijak zásadně nesnižují kvalitu předložené BP. Je zřejmé, že si pan Fejtek musel v poměrně krátké době osvojit mnoho nových dovedností a z předložené BP je patrné, že tomu věnoval dost času. Zadání BP bylo splněno a doporučuji k obhajobě.

Výše uvedený posudek jsem vypracoval při prvním odevzdání BP 27.července 2019, tj. na den přesně před rokem. Kromě jedné opravené výtky, která je ve výše uvedeném textu přeškrtnutá, se v práci prakticky nic nezměnilo, přestože pan Fejtek měl celý rok na opravení práce a práci stejně tisknul a vázal znovu. V původním posudku jsem navrhoval „známku A, i když s dlouhatánským mínusem za ony překlepy“. Tehdy jsem zohlednil, že pan Fejtek měl na dopsání BP zřejmě málo času. Jelikož tato okolnost pominula, neskrývám své zklamání a navrhuji známku **B (velmi dobře)**.

Ing. Radek Fučík, Ph.D.

KM FJFI ČVUT v Praze

V Praze dne 27. července 2020