POSUDEK OPONENTA DIPLOMOVÉ PRÁCE

Autor:	Martin Jex
Název práce:	Optimalizace algoritmu větví a mezí s aplikací na testování fázové stability vícesložkových směsí
Oponent práce:	doc. Milan Hladík, Ph.D.

Obsah práce

Práce se zabývá testováním fázové stability vícesložkových směsí. K tomuto účelu autor formuluje optimalizační úlohu, jejíž optimální hodnota rozhoduje o dané stabilitě. Pro výpočet optima autor zvolil metodu větvení a mezí, která garantuje nalezení optima a optimální hodnoty s libovolnou přesností. Efektivitu této metody výrazně ovlivňují právě pravidla na větvení a výpočet těsných mezí, neboť pomáhají tzv. ořezávat výpočetní strom a zahazovat jeho neperspektivní podčásti. Pro tento účel autor využívá konvexně–konkávní rozklad a další podmínky, které vycházejí z fyzikální podstaty problému. Dále autor numericky testuje navržený algoritmus na dvou konkrétních úlohách a porovnává z hlediska efektivity jím navržené prořezávací podmínky.

Hodnocení

Text je napsán srozumitelně a pokud mohu soudit, tak veškerá odvození byla korektní (viz moje poznámky dole). Vlastní příspěvek je podle mne velmi nosný – jedná se o důležitou praktickou úlohu, pro kterou autor navrhl efektivní metodu, kterou pak ještě ověřil na reálných datech v numerické studii. Numerické porovnání by možná mohlo být podrobnější (se zahrnutím kombinace prořezávacích podmínek atp.), ale i tak je výsledků dost a identifikují jasně, které podmínky se vyplatí používat a které nikoli.

Problém má také potenciál dalšího výzkumu, a může být i základem pro vědeckou publikaci. Jak píšu v poznámkách dole, existuje celá řada optimalizačních technik, které by se v principu daly využít k výpočtu těsnějších mezí a tím pádem k možnému silnějšímu ořezávání výpočetního stromu. Rozšířená numerická studie by pak mohla vybrat ty nejužitečnější optimalizační nástroje.

Konkrétní poznámky

- Úloha (1.5): Vzhledem k ostrým nerovnicím je přípustnou množinou vnitřek simplexu, a optimum nemusí nutně existovat. Proto bych očekával diskusi existence optima a vůbec jak ty ostré nerovnosti ovlivňují metody globální optimalizace.

- Konvexně–konkávní rozklad z věty 2 je jedním z možných způsobů konvexifikace úlohy. Pokud se autor bude v budoucnu zabývat možnými dalšími rozšířeními, může zvážit McCormickovu linearizaci pro bilineární členy, nebo obecněji techniku RLT (Reformulation-Linearization Technique).
- Algoritmus 1 a 2, while cyklus: spíš bych psal „while UB není blízko LB"
- Efektivitu metody větvení a mezí také ovlivňuje datová struktura, použitá na reprezentaci množiny podúloh. Autor používá frontu, ale další možnosti (jako prioritní fronta atp.) jsou rovněž ke zvážení.
- začátek Sekce 3.1: Autor píše, že „v bodě extrému musí být parciální derivace nulové". To je pravda pro vnitřní bod přípustné množiny, ale pro okrajové body je nutno uvažovat KKT podmínky. I když autor optimalizuje pouze uvnitř simplexu, nelze vyloučit, že účelová funkce „utíká" dolů ke kraji simplexu. Možná to nenastane z fyzikální podstaty úlohy, ale mohlo by to býti podrobněji diskutováno.
- Kapitola 4: U příkladů bych raději explicitně uvedl hodnotu n, počet iterací algoritmu, a případně další charakteristiky.

Shrnutí

Celkově hodnotím práci velmi positivně. Autor poctivě nastudoval látku, navrhl a implementoval algoritmus a porovnal různé podmínky. Zadání podle mého soudu bylo splněno a práce rovněž zcela splňuje standardy kladené na práce tohoto typu.

Závěr

Předloženou diplomovou práci doporučuji hodnotit známkou výborně.

V Praze, 11. května 2021

doc. Milan Hladík, Ph.D.

Charles University, Faculty of Mathematics and Physics,
Department of Applied Mathematics,
Malostranské nám. 25, 118 00 Prague, Czech Republic,
e-mail: `hladik@kam.mff.cuni.cz`.