

Hodnocení vedoucího závěrečné práce

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta informačních technologií

Student: Bc. Jakub Pekař
Vedoucí práce: Ing. Jiří Černý, Ph.D.
Název práce: Parallel Simulation of Biomacromolecules using the DFTB method
Obor: Počítačové systémy a sítě

Datum vytvoření: 26. 1. 2017

Hodnotící kritérium: 1. Náročnost a další komentář k zadání	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 5: 1=mimořádně náročné zadání, 2=náročnější zadání, 3=průměrně náročné zadání, 4=lehčí, ale ještě dostatečně náročné zadání, 5=nedostatečně náročné zadání
Popis kritéria: Podrobněji charakterizujte diplomovou (bakalářskou) práci a její případné návaznosti na předchozí nebo běžící projekty. Dále posuďte, čím je zadání této ZP náročné. (U obtížnější ZP lze dále tolerovat některé nedostatky, které by u ZP standardní obtížnosti tolerovány nebyly; a naopak u jednoduché ZP mohou být zjištěné nedostatky hodnoceny přísněji.) Komentář: Pro splnění zadání "Paralelní simulace biomakromolekul metodou DFTB" se musel student seznámit s detaily kvantověchemických a empirických výpočetních metod a navržený postup paralelizace zahrnout do rozsáhlého existujícího kódu.	
Hodnotící kritérium: 2. Splnění zadání	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4: 1=zadání splněno, 2=zadání splněno s menšími výhradami, 3=zadání splněno s většími výhradami, 4=zadání nesplněno
Popis kritéria: Posuďte, zda předložená ZP splňuje zadání. V komentáři uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, případně rozšíření ZP oproti původnímu zadání. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků. Komentář: Zadání bylo splněno v požadovaném rozsahu.	
Hodnotící kritérium: 3. Rozsah písemné zprávy	Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 4: 1=splňuje požadavky, 2=splňuje požadavky s menšími výhradami, 3=splňuje požadavky s většími výhradami, 4=nesplňuje požadavky
Popis kritéria: Zhodnoťte přiměřenost rozsahu předložené ZP vzhledem k obsahu, tj. zda všechny části ZP jsou informačně bohaté a ZP neobsahuje zbytečné části. Komentář: Rozsah textu je dostatečný s přiměřeným množstvím podrobností.	
Hodnotící kritérium: 4. Věcná a logická úroveň práce	Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F): 95 (A)
Popis kritéria: Posuďte, zda předložená ZP je po věcné stránce v pořádku, případně vyskytují-li se v práci věcné chyby nebo nepřesnosti. Zhodnoťte dále logickou strukturu ZP, návaznosti jednotlivých kapitol a pochopitelnost textu pro čtenáře. Komentář: Práce neobsahuje zjevné nepřesnosti, tematické bloky logicky a srozumitelně navazují.	
Hodnotící kritérium: 5. Formální úroveň práce	Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F): 95 (A)
Popis kritéria: Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku ZP, viz Směrnice děkana č. 12/2014, článek 3. Komentář: Práce splňuje obvyklé formální náležitosti, typografická i jazyková úroveň splňuje očekávání.	
Hodnotící kritérium: 6. Práce se zdroji	Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F): 95 (A)
Popis kritéria: Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení ZP. Charakterizujte výběr studijních pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje nebo zda se pokoušel řešit již vyřešené problémy. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a uvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.	

Komentář:

Student našel dostatečné množství vhodných zdrojů a na jejich základě navrhl efektivní řešení problému. Použité zdroje jsou zřetelně citované podle běžných standardů.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

7. Hodnocení výsledků, publikační výstupy a ocenění

98 (A)

Popis kritéria:

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků ZP, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, apod. Případně také zhodnoťte, zda software nebo zdrojové texty, které nevytvořil sám student, byly v ZP použity v souladu s licenčními podmínkami a autorským právem. Popište případnou publikační činnost a získaná ocenění související s řešením této ZP.

Komentář:

Řešení výrazně rozšiřuje možnosti praktického použití DFTB metody pro simulace biomolekul.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - nehodnotí se

8. Komentář o využitelnosti výsledků

Popis kritéria:

Uvedte, zda hlavní výsledky ZP rozšiřují již publikované známé výsledky a/nebo přinášející zcela nové poznatky. Uveďte možnosti využití výsledků ZP v praxi.

Komentář:

Kód bude zahrnut do výchozí DFTB implementace s možností integrace i přímo do balíku GROMACS, kde umožní vědecké komunitě efektivní a detailnější popis dějů v biomolekulách.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - následující škálou 1 až 5:

9. Aktivita a samostatnost studenta v průběhu řešení

9a:

1=výborná aktivita,
2=velmi dobrá aktivita,
3=průměrná aktivita,
4=slabší, ale ještě dostatečná aktivita,
5=nedostatečná aktivita

9b:

1=výborná samostatnost,
2=velmi dobrá samostatnost,
3=průměrná samostatnost,
4=slabší, ale ještě dostatečná samostatnost,
5=nedostatečná samostatnost

Popis kritéria:

Posuďte, zda byl student během řešení aktivní, zda dodržoval dohodnuté termíny, jestli své řešení průběžně konzultoval a zda byl na konzultace dostatečně připraven (9a). Posuďte schopnost studenta samostatně tvůrčí práce (9b).

Komentář:

Student projevil vysokou míru samostatnosti, na konzultace byl připravený a samostatně navrhoval vhodná řešení nalezených problémů.

Hodnotící kritérium:

Způsob hodnocení - bodové hodnocení 0 až 100 bodů (známka A až F):

10. Celkové hodnocení

95 (A)

Popis kritéria:

Shrňte stránky ZP studenta, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Celkové hodnocení **nemusí** být aritmetickým průměrem či jinou hodnotou vypočtenou z hodnocení v předchozích jednotlivých kritériích 1 až 9.

Text hodnocení:

Student ve své práci úspěšně vyřešil největší nedostatky stávající neparalelní DFTB implementace. V pokusech o urychlení se nedržel jen předpokládaného slabého místa (diagonalizaci matic), ale navrhl i modifikace v dalších částech kódu.

Podpis vedoucího práce: