

Hodnocení vedoucího diplomové práce

Autor práce: **Bc. Vít Mazín**

Název práce: **Implementace algoritmů pro aproximaci potenciálů atomových vazeb pomocí výpočtů kvantové mechaniky**

Bc. Vít Mazín studuje v programu Inženýrská informatika obor Softwarové inženýrství. Po domluvě univerzitního ústavu NTC s Katedrou informatiky a výpočetní techniky byla zadána diplomová práce, která je svou povahou poměrně mezioborová, zasahující do oboru fyziky pevných látek a masivních počítačových simulací. Student ve své práci používal výsledky kvantově mechanických (QM) výpočtů a prováděl a daným způsobem zpracovával počítačové simulace metodou molekulární dynamiky (MD), nicméně tyto fyzikální výpočty nebyly cílem práce, ale jeho prostředím. Hlavním tématem práce bylo vytvoření optimalizační procedury, která dokáže identifikovat specifické parametry v simulacích MD tak, aby co nejlépe reprodukovaly výsledky QM.

Prvním úkolem studenta tak bylo seznámit se s fyzikálním pozadím problému a výpočetním vybavením využívaným v ústavu NTC. Na tomto místě velmi kladně hodnotím spolupráci se studentem, který se v odborně cizím prostředí rychle a dobře zorientoval.

Student v práci zpracoval a implementoval genetické optimalizační algoritmy a dále doplnil i spirální optimalizační metodu. Finální program spojuje obě optimalizační procedury s další částí programu, která iterativně iniciuje simulace MD a sleduje a vyhodnocuje jejich výsledky. Struktura programu je přehledná a dobře popsána.

Optimalizační algoritmy, které student podle zadání implementoval, jsou dobře dokumentované a dobře přizpůsobené danému hardwarovému a softwarovému vybavení určenému pro rozsáhlé paralelní simulace. Výsledky této práce budou v ústavu NTC dále využívány a testovány na fyzikálně komplexnějších problémech.

Diplomová práce je textově i graficky dobře zpracována a rozsah práce je odpovídající. Zadání bylo splněno.

Navrhuji proto hodnocení známkou **výborně** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 29.5.2020

Ing. Jan Očenášek, Ph.D.

