

# Posudek oponenta diplomové práce

Autor/autorka práce: **Vít Mazín**

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

## Obsah práce

Práce se zabývá implementací genetických algoritmů a spirální optimalizační metody v dostatečně obecné podobě, aby bylo možné ji použít při numerických experimentech s různými materiály a s různými implementacemi hodnotící funkce – tak aby nebylo potřeba zabývat se dále algoritmem jako takovým.

## Kvalita řešení a dosažených výsledků

Text práce v první části popisuje řešený fyzikální problém a následně metody genetických algoritmů a spirálové optimalizace. Popis GA i optimalizace je zcela obecný, ale srozumitelný a dobře pochopitelný. Bohužel není doplněn o rešerši, která by se zabývala tím, jak byly tyto (nebo jim podobné) algoritmy použity v minulosti k řešení podobných úloh. Samotný popis fyzikální části není příliš srozumitelný bez doplňujících materiálů (což je ale do velké míry dáno tím, že se fyzikou nezabývám a řada použitých pojmů je pro mě neznámá).

Vytvořená implementace je plně funkční a dobře připravená. Jak parametrizace implementovaných algoritmů, tak doplnění vlastní fitness funkce a podobné úpravy je možné provést velmi snadno a díky dobře napsaným dokumentačním komentářům je vytvořený framework použitelný i bez jeho hluboké znalosti nebo potřeby ho nějak upravovat.

## Formální úroveň

Text práce je přehledný a dobře srozumitelný, vyžaduje ale velmi pozorné čtení, některé informace (jako je zdroj dat pro konečné testování nebo materiál, pro který je test připraven) jsou zmíněny jen jednou, často v úvodních částech práce a v okamžiku kdy jsou popisovány experimenty a testy se k nim už autor nevrací.

Program samotný je připraven tak, aby byl snadno spustitelný a rozšiřovatelný. Funkce spojené s ryze inforatickou částí (zejména samotný algoritmus a rozdělení zátěže na jednotlivé cílové uzly) jsou plně automatické a snadno použitelné i lidmi, kteří se programováním nezabývají.

## Práce s literaturou

Veškerá použitá literatura je relevantní a v práci důsledně odkazovaná. Chybí mi podrobnější rešerše aplikace uvedených metod na podobné problémy v minulosti.

## Splnění zadání

Zadání považuji za plně splněné.

## Dotazy k práci

Jak byla získána / vytvořena data pro testování správnosti výpočtu? Vznikla nějaká automatizace pro podobné testování?

Na základě čeho jste volil použité metody křížení, mutace a nastavení parametrů GA a SOA?

Přes výše uvedené výhrady navrhuji hodnocení známkou **výborně** a práci doporučuji k obhajobě.

V Plzni 3. 6. 2020

Ing. Richard Lipka, Ph.D.

