

Hodnocení bakalářské práce – vedoucí

Autor hodnocení:	prof. RNDr. Zdeněk Dostál, DSc.
Vedoucí bakalářské práce:	prof. RNDr. Zdeněk Dostál, DSc.
Oponenti:	Ing. Martin Menšík
Téma:	Řešení problému vlastních čísel s aplikacemi v molekulové dynamice
Verze ZP:	1
Student:	Ing. Martin Mrovec

1. Zadání závěrečné práce.

Cílem práce bylo seznámit se s problematikou výpočtu vlastních čísel a vektorů, zejména symetrických pozitivně definitních matic, se zaměřením na řešení problémů spojených s molekulární dynamikou. Práce je náročná, neboť student musel čerpat z různých zdrojů, včetně těch pocházejících z aplikačních oblastí. Cíle práce byly stoprocentně splněny. Práce je motivovaná řešením problémů molekulárního modelování v rámci výzkumného VP3 projektu CE IT4Innovations.

2. Aktivita studenta během řešení.

Student pracoval samostatně a iniciativně, chodil pravidelně na konzultace a byl vždy dobře připraven.

3. Aktivita při dokončování.

Práce byla dokončena v dostatečném předstihu a její definitivní obsah dostatečně konzultován.

4. Hodnocení výsledků závěrečné práce.

Autor podal samostatný výklad elementárních i praktických metod výpočtu vlastních čísel i příslušné teorie a vhodně vybral příklady z různých aplikačních oblastí (mechanické kmitání a molekulová dynamika), naprogramoval příslušné algoritmy (Jacobi, Givens). Správnost algoritmů otestoval na vhodných příkladech. Práce je dobrou přípravou k řešení reálných úloh.

5. Hodnocení práce z hlediska přínosu nových poznatků.

Práce je samozřejmě kompilačního charakteru, obsahuje však původní samostatně řešené příklady a původní prvky v odvození a zdůvodnění algoritmů. Oceňuji zejména elementární důkaz Cayley-Hamiltonovy věty, popis konvergence Givensovy metody a numerické příklady.

6. Charakteristika výběru a využití studijních pramenů.

Autor rozšířil vhodně doporučenou literaturu a uvedl odkazy v náležitých místech práce.

7. Souhrnné hodnocení.

Autor zvládl velmi dobře problematiku vlastních čísel. Práce je napsána pečlivě, v dobré grafické úpravě. Způsob výkladu ukazuje autorovo dobré pochopení dané problematiky a vytváří předpoklad pro úspěšnou další práci v této oblasti. V práci jsem nenašel chyby.

8. Otázky k obhajobě.

Srovnejte QR s Jacobiho metodou metodou.

Celkové hodnocení: výborně