

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Ondřej Novák
Název práce: Numerical simulations of optical response of nanostructures using FDTD method
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika (FOF)
Rok odevzdání: 2019

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Vojtěch Vozda
Pracoviště: Oddělení optiky a magnetooptiky, Fyzikální ústav UK
Oddělení radiální a chemické fyziky, Fyzikální ústav AVČR
Kontaktní e-mail: vozda@fzu.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Práce Ondřeje Nováka studujícího obor Obecná fyzika na Univerzitě Karlově se zabývá numerickým výpočtem Maxwellových rovnic pomocí metody konečných diferencí v časové doméně – FDTD (*Finite Difference Time Domain*). Hlavním cílem práce je napsání kódu v jazyce *Python*, přičemž nejdůležitější rovnice jsou přepsány do tenzorové formy tak, aby bylo možné výpočty značně urychlit počítáním na grafické kartě pomocí platformy CUDA (*Compute Unified Device Architecture*). Práce je vhodně rozdělena do šesti kapitol, které se postupně zabývají základním popisem FDTD, okrajovými podmínkami, psaním kódu v jazyce *Python*, definicí materiálů a zdrojů, měřením spekter a simulací povrchových plazmonů. Po závěru následuje seznam literatury, přičemž autor zde uvádí 14 různých zdrojů včetně knih, vědeckých článků i webových stránek.

V úvodní, celkem rozsáhlé teoretické části se autor zabývá přepisem Maxwellových rovnic do počítačového kódu pomocí záměny derivací za konečné diference. Vcelku složitá teorie týkající se numerické integrace a rozložení elektromagnetického pole do tzv. Yeeho buňky je zde podána ve formě, která by pro nezavěšeného čtenáře mohla být dost složitá k pochopení. Větší srozumitelnosti by se přitom dalo dosáhnout přiložením jediného názorného obrázku. Kapitola obsahuje vše podstatné, v textu se však objevují mírné nedokonalosti ve formě chybějících definic, odkazů na rovnice či hůře pochopitelného textu.

Autor dále pokračuje popisem okrajových podmínek důležitých pro simulaci volného prostoru či periodických struktur. Okrajové podmínky autor velmi úspěšně implementoval do svého algoritmu, jak ostatně ukazuje na obrázcích ze simulace. Netriviální teorie pohlcení signálu na okrajích simulovaného prostoru je v práci popsána značným množstvím rovnic a parametrů. Naskytá se zde otázka, zda-li by byl čtenář schopen tuto teorii sám pochopit a implementovat bez nahlédnutí do citované literatury. Osobně bych zde na úkor rozsáhlé teorie uvítal více vlastních výsledků jako například porovnání výpočetního času mezi jednotlivými modely, tj. mezi PML (*Perfectly Matched Layer*) a CPML (*Complex frequency-shifted PML*), nebo kalkulaci odražených reziduálních vln v závislosti na šířce tlumících okrajů (tedy počet bodů PML, resp. CPML).

Ve třetí kapitole autor vhodnými argumenty popisuje z jakého důvodu si pro napsání simulace vybral programovací jazyk *Python* a jakým způsobem implementuje analytické rovnice do počítačového kódu. Dobře vysvětlená je zde i manipulace s dvourozměrnými poli jakožto tenzory, jejichž hodnoty jsou pro výrazné urychlení počítány na grafické kartě. Ačkoli je zde názorně ukázána efektivita využití grafické karty pro velké rozměry simulovaného prostoru, chybí tu porovnání s časovou náročností na klasickém procesoru. Není tedy zjevné, kolik času je ušetřeno.

Čtvrtá kapitola popisuje definici materiálů a tři různé metody, kterými lze vybudit elektromagnetické vlny. Autor do simulace navíc úspěšně implementoval pokročilou proceduru zabývající se vyhlazením hran objektů, přičemž v příloze dokonce poskytuje i uživatelsky přívětivý skript pro jejich snadnou definici.

Pátá kapitola cílí na popis diskrétní Fourierovy transformace, která je velmi důležitá pro výpočet frekvenčně rozlišené odezvy od nanostruktur, tedy transmisního, reflexního či absorpčního spektra. Autor zde bohužel poskytuje pouze jeden příklad jejího výpočtu a to spektrum funkce sinus, které s rostoucím integračním časem postupně konverguje k delta funkci. V této kapitole je také zmíněna teoreticky i výpočetně složitá transformace z blízkého do dalekého pole, která do simulace nebyla zatím implementována. Nutno však podotknout, že zadání práce to rozhodně nevyžadovalo.

Poslední kapitola je věnována povrchovým plazmonům, jejichž šíření bohužel nebylo z důvodu numerických nestabilit úspěšně simulováno. Z citované literatury je však zřejmé, že toto téma je značně netriviální a autor zde diskutuje možné postupy, které by měly vést k budoucímu vylepšení výsledků.

Práce je psaná v anglickém jazyce, který je z větší části na dobré úrovni. Vytknout by se však dalo

celkem velké množství chybějících členů či přebývajících čárek ve větách a některé pravopisné chyby. Čtenáře pravděpodobně už i v samotném poděkování či abstraktu zarazí překlepy, které jsou pak celkem často přítomny i v hlavním textu. Velkého množství těchto chyb by se přitom dalo vyvarovat pomocí běžných nástrojů pro automatickou korekci. Dále se v práci místy objevuje nekonzistence ve značení (např. citace literatury jako [1], [[1]], ([1])) či v užitých pojmech. Je však vhodné podotknout, že text je i přes zmíněné nedostatky z větší části dobře srozumitelný a autor si dal na formulaci vět záležet. Grafické zpracování je na velmi dobré úrovni, text je správně zarovnán a vložené obrázky jsou přehledné a v dobrém rozlišení. Co se týče obsahu, tak zde chybí především výpočet optické odezvy od nanostruktur, k čemuž se váže i samotný název práce. Ačkoli je simulace plně funkční pro modelování optické odezvy od dvourozměrných objektů, tak zde není jediný příklad, na kterém by autor detailně rozebral a ověřil správnost vlastních výpočtů.

Závěrem lze říci, že ačkoli má práce jisté nedostatky, na jejichž vylepšení bude autor pravděpodobně pokračovat při psaní diplomové práce, tak daná problematika je zde dobře zpracována a práci jakožto celek hodnotím kladně. Výsledky simulace jednoznačně ukazují, že autor danou problematiku velmi dobře zvládl a v některých oblastech dokonce překročil původní rozsah zadání. Zde bych vyzdvihl například přenesení výpočtů na grafickou kartu či pokročilou metodu v definování simulovaných objektů do ortogonální mřížky. Z těchto důvodů práci doporučuji k obhajobě a hodnotím stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Srovnával autor výpočetní čas na procesoru a na grafické kartě? Jaké jsou (odhadem) úspory v časové náročnosti?
- Autor udává, že z důvodu výpočetní náročnosti v simulaci používá jakožto okrajové podmínky PML namísto CMPL. Z textu však vyplývá, že simulace obsahuje i CPML, které je nutno použít pro složitější struktury. Jaký je rozdíl ve výpočetních náročnostech u těchto dvou metod?
- Zabýval se autor porovnáním své simulace s jinými veřejně dostupnými programy jako je například MEEP či B-CALM? V čem je, nebo má být, předkládaná simulace lepší?
- Jaké jsou plány do budoucna a co bylo hlavní motivací napsání vlastního kódu?

Práci:

- doporučuji
 nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 20. srpna 2019

