

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor: David Voráč

Název práce: Symetrie dob přechodových dějů v komplexních biofyzikálních systémech

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly oponenta: Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc.

Pracoviště: Katedra Makromolekulární Fyziky

Kontaktní e-mail: petr.chvosta@mff.cuni.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 vedoucího/oponenta:**

Studium kinematiky biofyzikálních reakcí je nesporně vysoce aktuální. To platí jak pro experimentální tak pro teoretické uchopení problému. Jestliže se omezíme na nezbytné komponenty jakéhokoliv realistického popisu, úloha musí zahrnovat stochastický průběh reakčních souřadnic v jistém energetickém reliéfu a za přítomnosti externě vtištěných sil.

To je již kontext, ve kterém autor rozvíjí svůj netriviální model. Nejprve akceptuje dnes standardní analogii mezi reakční souřadnicí jisté řetězové bio-reakce a prostorovou souřadnicí náhodně bloudící částice. Přenějí řečeno, analogie vyústí ve studium jistého markovského stochastického procesu. Reprezentující částice je podrobena náhodným přeskokům mezi diskrétními stavy. Přeskoky probíhají ve spojitém čase, doby setrvání v jednotlivých diskrétních místech mají exponenciální rozdělení.

Zde se dostávám k upřesnění výše uvedeného adjektiva „ netriviální “. Doposud se většina autorů omezila na popis reakce pomocí jediné reakční souřadnice. Takové omezení má ovšem ryze technické pozadí. Autor práce se směle pokusil toto umělé omezení překonat. Jeho model zahrnuje dvě reakční souřadnice a uvedená analogie potom přirozeně vyústí ve studium stochastické dynamiky dvou interagujících částic.

V takto koncipovaném procesu se fyzikálně relevantní otázky týkají dob prvního dosažení jistých preferovaných uzlů. Doby prvního dosažení jsou jisté náhodné proměnné. Odpovídají dobám ukončení reakčních cyklů. Centrální výsledky práce se pak týkají charakterizace středních hodnot dob prvního dosažení.

V rámci obvyklého rozsahu bakalářské práce není ovšem možné splnit dva logicky protichůdné požadavky, tj. exponovat daný problém od základů v celé jeho šíři a současně se přiblížit k aktuálnímu stavu porozumění dané úlohy. Podle mého soudu se autor v rozumné míře s tímto jím nezaviněným dilematem vypořádal. Je to ale na úkor preciznosti při definici centrálních veličin, trpí zde celková srozumitelnost práce.

O to více si cením pozornosti a pečlivosti, které autor věnoval počítačovým simulacím, jazykové a grafické podobě práce. Chci zdůraznit, že nutnou podmínkou splnění úkolu bylo předběžné zvládnutí pokročilých partií teorie pravděpodobnosti a statistické fyziky. Součástí vlastní práce bylo programování v prostředí MATLAB. Autor prokázal schopnost pracovat s odbornou časopiseckou literaturou. Výsledky jsou originální a jsou srovnatelné se standardní vědeckou publikací. Uchazeč má talent k teoretické práci ve fyzice.

## **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

- 1) Uvažované markovské procesy jsou vyčerpávajícím způsobem popsány příslušnými Pauliho řídicími rovnicemi, tj. v podstatě maticemi rychlostních koeficientů. Jaký je explicitní tvar těchto matic pro stochastickou dynamiku jedné částice? Podobně pro dvě částice.
- 2) Jestliže bychom se podrželi kontextu markovovských procesů, jaká je přesná definice uvažovaných dob  $\tau_+$  a  $\tau_-$ ? Závisí tyto doby na počáteční podmínce? Jestliže ano, jak? Jestliže ne, proč? Existuje intuitivně srozumitelné odůvodnění rovnosti středních

dob prvního dosažení uvedené v odstavci 1.3? V případě dvou interagujících částic se veličiny tau týkají tzv. první částice, nebo tzv. druhé částice?

- 3) Proším autora, aby v kontextu Obrázku 2.6. a v rámci odstavce 2.5. upřesnil pojem „typická trajektorie“. Dále, aby pomohl k porozumění tím, že v rámci Obrázku 2.6. indikuje realizace náhodných dob prvního dosažení.
- 4) Tento předposlední bod je spíše námětem pro odbornou diskuzi. Bylo možné aproximativně popsat interakci částic metodou jistého středního pole, dodatečně působícího na jedinou reprezentativní částici. Například zavedením „interakčních oprav“ v lokální energii pro difúzi jediné částice?
- 5) Tento poslední bod je spíše námětem pro odbornou diskuzi. Jak by autor reagoval na následující provokativní námitku? Všechny analytické závěry druhé kapitoly jsou ryze kvalitativní, intuitivní, založené na heuristických úvahách. Ano, přesný vhled poskytuje pouze řešení Pauliho rovnice s maticí řádu 16. Existují však metody, jak odprojektovat informaci o tzv. druhé částici a alespoň strukturálně odvodit jedinou konvoluční řídicí rovnici pro tzv. první částici. Bylo by možné, popřípadě schůdné sledovat tento myšlenkový plán?

### **Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako práci bakalářskou.

### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

V Praze dne 7. července 2020

Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc.