

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Jakub Novotný
Název práce: Řád a chaos v jednoduchém modelu molekulárních vibrací
Studijní program a obor: Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D.
Pracoviště: Ústav částicové a jaderné fyziky, Matematicko-fyzikální fakulta UK
Kontaktní e-mail: pavel.stransky@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:

Předmětem bakalářské práce Jakuba Novotného je teoretická a numerická analýza chaotičnosti klasické limity jednoduchého kvantového modelu tzv. „bending vibrations“ víceatomových molekul (například molekuly H_2O) založeného na algebře $u(3)$. Ve své originální formulaci se jedná o integrabilní, a tedy nechaotický model se dvěma stupni volnosti. Integrabilita se naruší zavedením vnějšího (například magnetického) pole.

Bakalářská práce se skládá z úvodu, dvou kapitol a závěru. V první kapitole autor shrnuje využití teorie Lieových algeber ke studiu mnohočásticových systémů, přičemž se zaměřuje na $u(3)$ vibronový model. Diskutuje metodu, kterou lze získat klasickou limitu modelu. Dále zavádí základní pojmy z teorie klasického chaosu. V druhé kapitole pak prezentuje své originální výsledky. Odvozuje klasický hamiltonián $u(3)$ modelu s dodatečným vnějším polem a popisuje metodu kvantifikování chaotičnosti fázového prostoru založenou na výpočtu stability trajektorií na dané energetické nadploše protínající různě zvolené Poincarého řezy. K výpočtům používá moderní a velmi pokročilou knihovnu DifferentialEquations.jl programovacího jazyka Julia. Porovnává různé dostupné řešitele diferenciálních rovnic a vybírá ten, který dosahuje požadované přesnosti, a zároveň je dostatečně rychlý při souběžném integrování pohybových rovnic a rovnic tečné dynamiky. Mezi nejdůležitější numerické výsledky pak patří závislost chaotické části fázového prostoru a Ljapunovova exponentu na síle vnějšího pole a na energii. Autor ukazuje, že chaotičnost systému zprvu roste s rostoucí silou vnějšího pole, ale v jistou chvíli dojde k saturaci a další růst síly vnějšího pole naopak chaotičnost snižuje.

Předkládaná bakalářská práce je přípravnou půdou pro studium nových metod popisu kvantového chaosu (například tzv. mimočasových korelátorů) a k hlubšímu porozumění vztahu klasického a kvantového chaosu. Lze předpokládat, že její výsledky budou jednou prezentovány ve formě vědecké publikace.

Jakub Novotný při vypracovávání práce postupoval samostatně a iniciativně. Nastudoval řadu konceptů, které se nacházejí za rámcem bakalářského studia (například základy teorie Lieových grup a algeber, teorie klasického chaosu, výpočet klasické limity kvantového systému pomocí koherentních stavů či pokročilé numerické metody). Vyvinul, naprogramoval a odladil vlastní metodu kvantifikace chaotičnosti fázového prostoru. Díky ní dospěl k netriviálním originálním výsledkům. Celková grafická a odborná úroveň textu je na výborné úrovni, přičemž ke srozumitelnosti napomáhají i vhodně zvolené ilustrace a grafy.

Kontrola na plagiátorství odhalila 2 podobné dokumenty se shodou $< 5\%$. V obou případech se však jedná o triviální shodu v povinném Prohlášení (strana 2), jedná se tedy o shody irelevantní.

Práce Jakuba Novotného splňuje (a dle mého názoru v mnohém předčí) požadavky kladené na bakalářskou práci. Doporučuji ji tedy uznat jako bakalářskou a ohodnotit ji stupněm *v ý b o r n ě*.

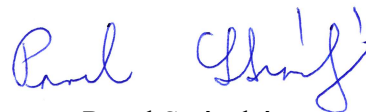
Práci doporučuji nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm: výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

V Praze dne 27.8.2020



Pavel Stránský