

Diffusion in Time-Dependent Potentials

Mgr. Evžen Šubrt

Posudek disertační práce

Mgr. E. Šubrt vypracoval disertační práci na téma některých exaktně řešitelných modelů nerovnovážné statistické fyziky. Práce se dá rozdělit do dvou základních částí: zatímco první část se týká termodynamických aspektů difúze v časově a časoprostorově proměnném potenciálu, druhá část se zabývá analýzou fluktuací v časově závislých dvouhladinových systémech. Samotná disertace je souhrnem série článků publikovaných v mezinárodních a českých odborných časopisech. Obecně jde o velmi kvalitní práci, pouze s minimem nedostatků.

Statistická fyzika je jedním z pilířů moderní fyziky, jakožto most spojující fundamentální mikroskopické teorie s efektivním popisem kolektivního chování systémů na mezoskopické a makroskopické škále, pomocí metod teorie pravděpodobnosti. Jestliže rovnovážný stav a rovnovážné procesy jsou z teoretického hlediska dobře pochopeny, neexistuje dosud žádná obecná, ucelená a všeobecně akceptovaná teorie nerovnovážných a transportních jevů, s výjimkou teorie lineární odezvy a jí odpovídající lineární ireverzibilní termodynamiky. Absence obecných principů za tímto rámcem znamená, že jednotlivé nerovnovážné systémy je nutné studovat případ od případu, přičemž existuje velké množství (většinou aproximativních) metod. V posledních deseti až dvaceti letech zájem o nerovnovážnou statistickou fyziku opět výrazně vzrostl v souvislosti s objevem konstruktivní role šumu v rezonančních náhodných jevech a v molekulárních motorech, stejně jako s nalezením nových exaktních termodynamických relací a symetrií v distribuci nerovnovážných fluktuací. Těmto otázkám je v současnosti věnována velká pozornost také díky pokroku v oblasti nanotechnologie a molekulární elektroniky a v souvislosti s novými fascinujícími biofyzikálními experimenty.

Detailní analýza konkrétních nerovnovážných systémů, již se zabývá tato disertace, se pokouší vyplnit jednu výraznou mezeru, totiž absenci netriviálních exaktně řešitelných modelů mimo rámec poruchových schémat a numerických simulací. Tato práce skutečně rozšiřuje kolekci těchto modelů, přičemž dobře pokrývá výše uvedené oblasti současného zájmu. Kapitola 2 uvádí přesné řešení modelu difúze částice ve specifickém časově závislém potenciálu, které v neporuchovém režimu vykazuje efekt stochastické rezonance. Druhá část této kapitoly exaktně analyzuje bistabilní systém s časově závislou energetickou bariérou a porovnává výsledky se zjednodušeným dvouhladinovým modelem. Jak efekt stochastické rezonance v prvním případě, tak netriviální důsledky interní dynamiky jednotlivých stavů v porovnání se zjednodušeným modelem v druhém případě dobře demonstrují užitečnost exaktních řešení. Kapitola 3 řeší problém stacionární (časově závislé) distribuce difundujících částic v harmonickém vnějším poli, kombinací exaktních a numerických metod. I v tomto případě se zřejmě jedná o originální exaktní výsledky na tomto modelu. Konečně kapitola 4 se zabývá výpočtem pravděpodobnostní distribuce práce vnější síly v (časově závislém) dvouhladinovém systému. Netriviálním výsledkem je exaktní vztah pro tuto distribuci

v případě konstantní vnější síly a pro dva různé dynamické algoritmy (Metropolisův algoritmus versus tzv. „tepelná lázeň“). Zejména v tomto posledním případě se jedná o pozoruhodný dosažený výsledek.

Většina výsledků v této práci byla získána metodami vytvořujícími a Greenových funkcí aplikovanými na stochastické procesy, exaktní sumací nekonečných poruchových řad v Laplaceově resp. Fourierově obraze a metodami komplexní analýzy a speciálních funkcí. Je třeba zdůraznit, že techniky prezentované v této práci jsou opravdu pokročilé a úspěšné zvládnutí všech jednotlivých dílčích projektů si zasluhuje ocenění.

Z formálního hlediska je samotná disertační práce koncipována tak, že kopie jednotlivých článků byly doplněny vhodným úvodem do problematiky a spojeny do logických celků. Samotné rozdělení je provedeno kvalitně a logicky přirozeně, přesto má toto uspořádání některé nevýhody: především úroveň textu v člancích a v příslušných úvodech se poněkud liší (i po jazykové stránce), některé věci se opakují, apod. Trochu rozpaky budí kapitola 1, která je podle mého názoru příliš krátká a nepokouší se o poněkud obecnější a širší úvod; obsahuje více méně jen doslovné citace z jednotlivých článků.

Považuji za nesporné, že tato disertační práce prezentuje sérii originálních výsledků velmi dobré úrovně, které obohacují dynamicky se rozvíjející obor nerovnovážné statistické fyziky o nové netriviální přesně řešitelné modely. Toto dokazuje i množství již přijatých publikací v impaktovaných časopisech: „Physica E“, „J. Stat. Mech.“ a „Czech J. Phys.“; další článek byl nabídnut k publikaci v „Cent. Eur. J. Phys.“ Soudím také, že Mgr. E. Šubrt má dobré předpoklady k samostatné vědecké práci, a že jeho disertace bez zbytku splňuje podmínky nutné k udělení titulu Ph.D.

Dodatek 1: Některé chyby a nejasnosti v textu

- Konec str. 3: „The thesis presents the theoretical background...“ se hned na začátku str. 4 opakuje znovu: „We present the theoretical background...“
- Str. 10, řádek - 8: „One possibility is to employ...in [8]“: takto to lze napsat v článku, ale v disertaci to nedává moc smysl; ta by měla být pokud možno nezávislá.
- Rovnice (2.9)-(2.10): přestože chápu, že cílem je vysvětlit matematickou metodu výpočtu, je trochu obtížné tuto část číst v okamžiku, kdy čtenář neví vůbec nic o funkcích V , W , R , atd. (tento problém by zřejmě nenastal v případě, že by disertace měla klasickou strukturu, tzn. jednotlivé články by byly rozpracovány do větších detailů.)
- Str. 20, řádek 20: chybějící reference.
- Str. 72, řádek 4: chybějící konec věty.
- Str. 131, [78]: Schütz.

Dodatek 2: Některé obecné otázky pro Mgr. E. Šubrtu

- Exaktní distribuce práce v libovolném konečném časovém intervalu je samozřejmě pozoruhodný výsledek. Na druhé straně, zkušenosti z rovnovážné teorie fluktuací naznačují, že často by mohlo být naprosto dostačující znát dlouhočasovou asymptotiku této distribuce, přinejmenším pro stacionární resp. periodické procesy. To by, alespoň v principu, měl být výrazně jednodušší problém. Bylo by možné použitou metodu adaptovat na výpočet této dlouhočasové asymptotiky, např. pro dvouhladinový model s rozdílem hladin periodicky závislým na čase?
- V případě systémů s malým počtem stupňů volnosti není příliš obtížné stacionární (asymptotickou) distribuci práce a jiných dynamických pozorovatelných počítat numericky anebo analyticky poruchovou řadou. Jaký je status exaktních metod v porovnání s těmito alternativními postupy, jaké jsou možnosti, výhody a nevýhody?