

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: **Šimon Pajger**

Název práce: **Entropy production and irreversibility in transition state theory**

Studijní program a obor: **Fyzika, Obecná fyzika**

Rok odevzdání: **2021**

Jméno a tituly oponenta: **doc. RNDr. Tomáš Novotný, Ph.D.**

Pracoviště: **109-KFKL**

Kontaktní e-mail: **tno@karlov.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 oponenta:

Bakalářská práce pana Pajgera pojednává o statistice dob přechodu mezi minimy bistabilního potenciálu pod vlivem stochastické dynamiky s možným vnějším harmonickým hnacím mechanismem. Práce má dvě hlavní části odpovídající nejprve přetlumenému a posléze podtlumenému pohybu částice v potenciálu. Teoretickým jádrem práce je odvození vztahu mezi pravděpodobnostními hustotami dob přechodu v opačných směrech pohybu založené na použití flukтуаčního teorému pro časově invertované trajektorie pohybu částice. Lze ukázat, že bez vnějšího hnacího mechanismu jsou statistiky dob přechodu v opačných směrech poněkud neintuitivně identické, zatímco s hnací silou lze dosáhnout této identity pouze pro vhodně vážené veličiny. Váhy jsou dány zhruba exponenciálou produkce entropie.

Tato obecná teorie byla detailně ověřena numerickými simulacemi se dvěma základními výpočetními schémata. První uvažovalo předepsané počáteční podmínky a simulace byla po každé úspěšné realizaci procesu zresetována do původního stavu. Druhé, náročnější, schéma pracovalo s jednou velmi dlouhou trajektorií, ze které vybíralo vhodné části odpovídající úspěšným realizacím procesu (přechod mezi minimy potenciálu). V obou případech bylo v rámci numerických možností prokázáno, že obecná teorie platí s nalezenými váhami. Kromě níže zmíněného problému s „Maxwellovým rozdělením“ v podtlumeném případě nemám k prezentovaným výsledkům žádné věcné či odborné výhrady, jde zjevně o solidní práci pravděpodobně s publikačním potenciálem.

Výrazně problematičtěji ovšem vnímám prezentační a formální stránku předložené práce, což je i výhradním důvodem pro mnou navrhované snížení hodnocení práce. Oceňuji použití angličtiny jako jazyku práce, je ovšem nutno si přiznat, že její úroveň není nikterak skvělá. Členy jsou podle mě použity značně nahodile, mnoho vět začíná „And“ anebo „But“, což je zjevný čechoslovakismus. Dále studentovi doporučuji se detailně seznámit se správným použitím anglického obratu „such a (countable noun in singular, e.g., method)“; evidentně tento obrat nezná a může se mu ještě hodit. Všechny tyto věci sice snižují kvalitu textu, ale jde v podstatě pouze o estetické aspekty. Bohužel to není vše. Jako mnohem zásadnější vnímám logicky nekonzistentní či neúplnou prezentaci teoretických konceptů – typickým příkladem je výklad na str. 5, kde by předposlední odstavec měl být předřazen rovnici (1.11), kde se již používá dříve nezavedená definice časově inverzní trajektorie. Rovněž oproti textu pod rcí (1.12) není nikterak okamžitě zřejmé, že veličina σ z rce (1.12) je skutečně produkce entropie (v lázni) – bližší zdůvodnění nebo alespoň relevantní citace by zde byly nesmírně užitečné. Není mi rovněž jasné, je-li v podtlumeném případě produkce entropie dána výrazem σ nebo zahrnuje i rychlosti z formulky (2.6). Naprosto nerozumím vztahu vzorečku na samém konci strany 21 a rovnice (2.11) ze strany předchozí.

Největším problémem je pak údajné „Maxwellovo rozdělení“ v rovnici (2.15) – nenapadá mě žádný relevantní kontext, ve kterém by to opravdu bylo Maxwellovo rozdělení, nicméně tento specifický tvar je nutný pro odvození symetrie (2.16), což tento bod přivádí za rámec prostého překlepu. Přesto věřím, že jde o problém s prezentováním věci (v opačném případě by se mohlo jednat o závažnou věcnou chybu) a podaří se ho v rámci obhajoby objasnit.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Můžete objasnit, jak chápat „Maxwellovo rozdělení“ z rovnice (2.15)?
- Rád bych lépe pochopil zdůvodnění potřeby vysokých počtů simulovaných trajektorií pro hladké vážené histogramy a jejich směrovou závislost. Rozumím tomu, že málo

pravděpodobné trajektorie mají tendenci více fluktuovat, a tudíž dávají „zubaté“ histogramy, pro jejichž vyhlazení je třeba zvýšit počet zkoumaných trajektorií. Není ovšem s tímto v rozporu vysvětlení směrovosti počtu trajektorií ve 3. odstavci odspodu na str. 9? Tam argumentujete, že ve směru „do kopce“ je pravděpodobnost menší (s tím souhlasím), a tudíž je menší i jejich variabilita/variance (?) a produkují tak hladší histogram. Tomuto argumentu příliš nerozumím.

- Pro numerické simulace jste zvolil nejjednodušší explicitní Eulerovo stochastické integrační schéma nejnižšího řádu (viz reference [13]). Zkoušel jste i nějakou jinou variantu a domníváte se, že Vámi zvolené schéma je optimální pro Vaše účely? Umím si představit, že „dražší“ ale přesnější numerické schéma může v samotném důsledku pro vážené histogramy vyjít numericky „levněji“.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze, 6. 9. 2021