

12. září 2022

Vyjádření školitele k diplomové práci pana

Bc. Jakuba Martinky

na téma

Neadiabatická molekulová dynamika fotochemických procesů akcelerovaná pomocí strojového učení

Pan Jakub Martinka se ve své diplomové práci zabýval výpočty neadiabatické molekulové dynamiky (MD) molekuly vinylbromidu a použitím technik strojového učení na rychlý výpočet ploch potenciální energie základního a excitovaných stavů jakož i jejich gradientů.

Pan Martinka během svého působení v mé skupině provedl výpočty excitačních energií v různých bázích a CAS aktivních prostorech za účelem volby ab initio metody pro MD a poté výpočty řady MD trajektorií této molekuly na ADC(2) a CASSCF úrovni. Během této práce se pan Martinka seznámil se základy neadiabatické molekulové dynamiky a zvládnul potřebné techniky k provádění MD výpočtů. Dalším krokem jeho práce bylo následné použití dat ze spočtených trajektorií pro tvorbu trénovacích sad pro strojové učení metodou kernel ridge regrese, trénování ML modelů a vyhodnocování jejich přesnosti. Pan Martinka se úspěšně a z velké části samostatně zhostil i tohoto úkolu.

Diplomová práce pana Martinky se skládá ze tří kapitol. Z první kapitoly věnované teoretickým základům použitých metod kvantové chemie, molekulové dynamiky a strojového učení je zřejmé, že si pan Martinka osvojil znalost relevantních metod na úrovni odpovídající magisterskému studiu. Druhá kapitola je věnována výsledkům neadiabatické MD molekuly vinylbromidu. Ukázalo se, že po fotoexcitaci dochází nejen k rychlé populaci tripletních stavů, ale též k rychlé disociaci této molekuly. Kapitola 3 pak prezentuje aplikaci metody strojového učení na potenciálové povrchy relevantní ve výše uvedené molekulové dynamice a porovnání jejich přesnosti vůči ab initio datům pro trajektorie neobsažené v tréninkových sadách. Celkové výsledky prezentované v této diplomové práci nejsou ještě dostatečně úplné na to, aby mohly v této formě být publikovány, nicméně představují významný přínos našemu výzkumu a budou součástí publikace v budoucnu.

Pan Martinka se jako student velmi osvědčil, pracoval se zájmem, samostatně a iniciativně. Předloženou práci doporučuji hodnotit stupněm výborně a po její obhajobě a složení státní zkoušky doporučuji udělení magisterského titulu panu Martinkovi.



Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.

školitel