

## **Posudek oponenta na bakalářskou práci „Monte Carlo studie větvených polymerů“ Zdeňka Preislera**

Práce je věnována studiu konformačního chování větvených polymerů v atermálním rozpouštědle. Ke studiu autor využívá metody počítačových simulací, konkrétně pak dynamické Monte Carlo metody.

Volbu tématu práce považuji za vhodnou, protože se jedná o systém v praxi běžný a přesto netriviální, navíc studovaný perspektivní metodou počítačových simulací. Práce na studii umožňuje jejímu autorovi rozvinutí vědeckých dovedností, což je hlavním cílem bakalářské práce. Studie je také dobrým základem pro další studium této problematiky.

Práce je přehledně strukturována do pěti standardních částí (Úvod, Teorie, Výpočet dat, Výsledek a diskuze a Závěr) a její rozsah odpovídá úrovni bakalářské.

K jednotlivým částem práce:

1. „Úvod“ dobře popisuje základní rysy chování polymerních řetězců a výhody počítačových simulací (experimentů) při studiu polymerů jako metody komplementární ke klasickému experimentu a teorii. Ukazuje též současná výpočetní omezení metody.
2. Část „Teorie“ se poměrně obsírně věnuje Monte Carlo metodě a počítačovým simulacím. Poněkud méně se věnuje polymerům jako takovým, škálování velikosti polymerních klubek s délkou řetězců je zmíněno jen okrajově. Vítané by byly též alespoň souhrnné informace o dalších teoriích těchto systémů mimo škálování a dále informace o experimentech.
3. Kapitola „Výpočet dat“ názorně popisuje strukturu programu a jeho fungování. Kapitola nicméně neobsahuje informaci o tom, jaké kontrolní mechanismy autor použil pro posouzení správné funkčnosti programu. Rád bych ho proto požádal o tuto informaci během obhajoby.
4. Část „Výsledky a diskuze“ prezentuje vypočtené hodnoty. Ty ukazují dobrý soulad se škálovací teorií pro různé architektury řetězce. Pro posouzení, zda je malý rozdíl oproti teorii způsoben tím, že teorie přesně platí pouze pro dlouhé řetězce, nebo zda a do jaké míry je rozdíl způsoben „experimentální“ chybou, by byl užitečný výpočet směrodatné odchylky škálovacího exponentu.  
Zajímavé by též mohlo být ověření závislosti velikosti gyračního poloměru na počtu ramen řetězce. Přestože autor vypočetl gyrační poloměry pro různé počty ramen a uvádí i teoretický škálovací vztah, srovnání teorie se simulací přímo neprovedl. Toto srovnání bych doporučil. S malým dodatečným úsilím může obohatit výsledky vlastní práce.  
Vlastní vypočtené („naměřené“) hodnoty gyračních poloměrů jsou přehledně uvedeny v tabulkách včetně standardní odchylky. Autor též věnoval značnou péči vzorkování a nekorelovanosti „naměřených“ hodnot. Obojí je známkou dobré simulační práce.
5. V závěrečné části práce autor stručně sumarizuje své výsledky.

Po stránce formální oceňuji velmi slušnou grafickou úroveň práce. Na druhou stranu bych autorovi doporučil řádnější jazykovou kontrolu (např. „by jsem“, „Kühnův segment“).

Souhrnně práci hodnotím jako zdařilou, splňující požadavky kladené na bakalářskou práci a navrhuji práci hodnotit stupněm velmi dobře.

V Praze 18.6. 2008



David Viduna