

# Posudek doktorské disertační práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

Autor práce: RNDr. Viktor Holubec, student doktorského studia.

Název práce: Teoretický popis nerovnovážných procesů transformace energie na úrovni molekulárních struktur.

Obor: 4F1-Teoretická fyzika, astronomie a astrofyzika.

Rok odevzdání: 2013.

Pracoviště: Katedra Makromolekulární Fyziky MFF UK.

Posuzovatel: Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc., školitel doktoranda.

Vážení členové komise pro obhajobu.

S RNDr. Viktorem Holubce spolupracuji již více než 8 let. Byl jsem vedoucí jeho bakalářské práce „Parrondův paradox a jednoduchý model molekulárního motoru“, úspěšně obhájené v červnu roku 2007 (studijní program Fyzika, studijní obor Obecná fyzika, MFF UK). Naše spolupráce pak pokračovala v průběhu jeho magisterského studia, zejména v souvislosti s jeho diplomovou prací „Nerovnovážná termodynamika malých systémů“. Diplomová práce byla úspěšně obhájena v květnu roku 2009 (studijní program Fyzika, studijní obor Teoretická fyzika, MFF UK).

Předkládaná doktorská dizertace se zabývá teoretickým studiem energetických transformací v průběhu nerovnovážné časové evoluce mezoskopických systémů. Tyto tzv. malé systémy jsou vždy vystaveny působení náhodných termálních sil. Jejich dynamika má tedy nutně pravděpodobnostní charakter. Předmětem práce je studium stochastické dynamiky v případech, kdy se jistým předepsaným způsobem mění vnější podmínky. Konkrétně je předepsán tzv. experimentální protokol, tj. jistá časová závislost pro vnější síly působící na systém. V takovém rámci probíhá studium tzv. molekulárních motorů, jevů stochastické koherence, stochastické rezonance, a zejména teoretický popis nově vyvinutých experimentálních metod mechanické mikromanipulace na úrovni jednotlivých makromolekul. Současně je zvolené téma velmi aktuální v souvislosti s nedávnými objevy fundamentálních flukтуаčně-disipačních zákonitostí v oblasti termodynamiky a statistické fyziky malých systémů.

Dovolte mi ve čtyřech bodech obecně charakterizovat práci doktoranda a dosažené výsledky.

1) Nutnou podmínkou ke splnění cílů disertace bylo předběžné zvládnutí pokročilých partií teorie pravděpodobnosti, nerovnovážné termodynamiky a nerovnovážné statistické fyziky. V důsledku časově proměnného vnějšího působení jsou studované dynamické procesy časově nehomogenní Markovské procesy. Přesná řešení typicky vyžadují explicitní výpočet evolučních operátorů, formálně zapsaných jako jisté časově uspořádané exponenciální operátory. Zde je jeden z možných přístupů založen na algebraické struktuře Lieových grup. Prvky grupy jsou operátory, které tvoří generátor Markovské evoluce. Tímto postupem se v dizertaci podařilo najít analytická řešení několika konkrétních dynamických modelů.

2) Nutno poznamenat, že pro úplný teoretický popis energetických transformací nestačí výpočet evolučního operátoru. Základní termodynamické veličiny, teplo a práce, jsou stochastickými funkcionaly definovanými na souboru trajektorií samotného dynamického procesu. Jejich charakterizace, tj. například výpočet hustoty pravděpodobnosti pro práci vykonanou systémem na okolí v průběhu daného nerovnovážného izotermického procesu, vyžaduje řešení hyperbolických systémů parciálních diferenciálních rovnic. Je to tedy úkol složitější než řešení samotných pohybových rovnic pro dynamiku systému. Doktorand našel přesný tvar pravděpodobnostního rozdělení vykonané práce v několika konkrétních netriviálních modelech [1,3,5]. Získaná řešení umožňují mimo jiného konkrétní diskuzi fluktučních teorémů pro práci (Jarzynského identita).

3) Součástí vlastní práce bylo programování a počítačové simulace prováděné v prostředí MATLAB. Doktorand samostatně vyvinul a aplikoval nové algoritmy při simulaci časově nehomogenních Markovských procesů, viz publikace [4] v níže uvedeném přehledu. Metoda je založena na rozkladu počítačové generace individuálních trajektorií procesu na dva nezávislé kroky. Prvním je generace náhodných časových okamžiků přeskoků systému mezi mikrostavy, tj. generace časově nehomogenního Poissonova bodového procesu. Druhým krokem je pak generace samotných přeskoků mezi mikrostavy. Nová metoda je zvláště vhodná při počítačové simulaci výše zmíněných funkcionalů Markovských procesů.

4) Experimentálně určovaný protokol vnějšího silového působení lze předepsat jako posloupnost procesů (větví). Větve se liší stupněm nevratnosti a také teplotou rezervoáru, který v dané větvi komunikuje se systémem. Tyto obvykle čtyři větve vytvářejí cyklický protokol a ve stacionárním režimu systém odpovídá cyklickými změnami stavu. Pozornost se pak přirozeně zaměřuje na práci vykonanou na okolí v průběhu jednoho cyklu, na účinnost konání práce, ale i na fluktuace práce v průběhu cyklu, a na rychlost konání práce, výkon. V předkládané dizertaci je provedena úplná energetická analýza pro konkrétní systémy a konkrétní protokoly. Výsledky jsou bohatě ilustrovány, například pracovními diagramy navrhovaných cyklických procesů. Doktorand dospěl až k prvním pokusům o optimalizaci činnosti navrhovaných tepelných motorů [1,2,5]. V současnosti se touto otázkou systematicky zabýváme v nově připravované publikaci.

Výpočty v dizertaci zvládl doktorand samostatně a prokázal přitom schopnost kriticky hodnotit a systematicky využívat odbornou časopiseckou literaturu v daném oboru. Uchazeč připravil spolu se mnou a s dalšími kolegy k publikaci 6 vědeckých prací. Z toho pět prací již prošlo recenzním řízením a byly přijaty k publikaci. Jsou to tyto publikace:

[1] Chvosta, P.; Einax, M.; Holubec, V.; et. al.: Energetics and performance of a microscopic heat engine based on exact calculations of work and heat distributions, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010, P03002.

[2] Chvosta, P.; Holubec, V.; Ryabov, A.; et. al.: Thermodynamics of two-stroke engine based on periodically driven two-level system, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 42, 2010, 472.

[3] Holubec, V.; Chvosta, P.; Ryabov, A.: Thermodynamics, chapter Four Exactly Solvable Examples in Non-Equilibrium Thermodynamics of Small Systems, *InTech*, 2010, 153.

[4] Holubec, V.; Chvosta, P.; Einax, M.; et. al.: Attempt time Monte Carlo: An alternative for simulation of stochastic jump processes with time dependent transition rates, Europhysics Letters 93, 2011, 40003.

[5] Holubec, V.; Chvosta, P.; Maass, P.: Dynamics and energetics for a molecular zipper model under external driving, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2012, P11009

O samotných výsledcích bude jistě podrobněji pojednáno v průběhu obhajoby. Zde chci zdůraznit dva důležité aspekty charakterizující celou dizertaci. Za prvé, jak již bylo řečeno, difúzní úlohy s časově závislým potenciálem vedou k výpočtu propagátoru, kterým je jistý časově uspořádaný exponenciální operátor. Jinak a ekvivalentně řečeno, řeší se systémy diferenciálních rovnic s časově závislými koeficienty. Tato úloha je z čistě matematického hlediska velmi komplikovaná. Doktorand tak musel v průběhu výpočtů čelit netriviálním technickým problémům, musel se například seznamovat se speciálními funkcemi a s jejich vlastnostmi. A přesto našel neporuchová, analytická řešení všech studovaných úloh. Lze ocenit, že se doktorand neuchýlil k čistě numerickému řešení, k poruchovým rozvojem, popřípadě výhradně k Monte-Carlo simulacím. Za druhé, v práci oceňuji snahu o formulace, které jsou orientovány na přímé srovnání teoretických a experimentálních výsledků. Konkrétně model externě stimulovaného rozplétání „zipu“ lineárně uspořádaných vazeb (zobecněný Kittelův model v paragrafu 2.4) byl navržen způsobem, který umožňuje přímé srovnání teoretických výsledků s experimentálně získanými daty.

RNDr. Viktor Holubec byl v průběhu svého doktorandského studia aktivním spoluřešitelem bilaterálního projektu „Statistická rozdělení práce a tepla v modelech molekulárních motorů“. Při řešení projektu s německými kolegy-teoretiky z University Osnabrueck, byl platným a kreativním členem řešitelského týmu. V Osnabruecku prokázal schopnost samostatné tvůrčí práce, odborné komunikace a koordinace kroků, které vyústily ve společné publikace.

Rád bych se na závěr zmínil o pedagogické aktivitě doktoranda. Viktor Holubec vedl v celém průběhu doktorského studia cvičení k mé přednášce „Termodynamika a Statistická fyzika“ (3/2 Z+Zk) pro studenty 3. ročníku bakalářského studia odborné fyziky na MFF UK. Přednášku si v tomto období zapisovalo 50-60 studentů. Viktor prokázal nesporný talent k práci se studenty, ke cvičení přistupoval se zaujetím, iniciativně a zodpovědně. Studentům poskytl při samotné výuce i na svých speciálních internetových stránkách výraznou motivaci, konzultace a podporu. Tato práce nebyla finančně oceněna a rád bych za ni Viktoru Holubcovi poděkoval. Stejně tak považuji za velice prospěšnou práci doktoranda v oblasti popularizace fyziky, konkrétně při řešení rozvojového projektu VVŠ v letech 2011-2013. Projekt má název „Magická fyzika-putovní pásmo překvapivých experimentů pro studenty středních škol“.

Konstatuji, že předkládaná práce je po formální i po obsahové stránce způsobilá k zahájení řízení k její obhajobě. Doporučuji ji uznat jako doktorskou disertaci a doporučuji, aby byl v případě úspěšné obhajoby RNDr. Viktoru Holubcovi udělen titul PhD.

V Praze dne 8. srpna 2013

Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc.