

POSUDEK OPONENTA BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Název: Stochastické metody v krystalografii

Autor: Damián Kulich

SHRNUTÍ OBSAHU PRÁCE

Hlavním cílem předložené práce je generování vektoru trojrozměrných orientací kubických mřížek, které jsou přiřazeny jednotlivým buňkám dané mozaiky. Hustota tohoto vektoru má gibbovský tvar, přičemž funkce energie závisí na misorientacích sousedních buněk. Generování provádí autor pomocí MCMC algoritmu. V simulační studii pak zkoumá vliv volby parametru inverzní teploty a také vliv průměrného počtu stěn buněk mozaiky.

CELKOVÉ HODNOCENÍ PRÁCE

Téma práce. Zadané téma vyžaduje znalosti z některých pokročilejších oblastí (mozaiky, krystalografie, metody MCMC), se kterými se musel student seznámit studiem literatury. Téma bylo zpracováno v souladu se zadáním práce. V zadání se navíc jako možnost uvádí porovnání s reálnými daty, ale na to již vzhledem k rozsahu bakalářské práce nebyl prostor.

Vlastní příspěvek. Hlavním přínosem autora je simulační studie vycházející z vlastního návržení a implementace algoritmu pro generování orientací.

Matematická úroveň. Práce obsahuje korektně zformulovaný matematický text. V první kapitole jsou shrnuty základní potřebné definice a tvrzení. Věty týkající se markovských řetězců jsou uvedeny bez důkazů. Věta 1 je podaná s důkazem, ten ale ukazuje něco jiného, než je uvedeno ve znění věty. V kapitole 2 je představen studovaný model a je zformulována věta 5, jejíž důkaz je přímočarým důsledkem vět z první kapitoly.

Práce se zdroji. Použité zdroje jsou řádně citovány. U první položky chybí pomlčka v rozsahu stránek.

Formální úprava. Dobrý dojem kazí některé zjevné překlepy v textu, kterým se dalo lehce zabránit spuštěním programu na kontrolu pravopisu, např. trojrozměrných (str. iii), polykrystalických (str. 2), následující (str. 8), nazývají, hodnoté, inicializacími (str. 13), linárně, charakteristiký (str. 14), zvýšil (str. 15). Na docela dosti místech chybí čárka ve větě nebo tečka na konci věty (obvykle za matematickým vzorcem).

PŘIPOMÍNKY A OTÁZKY

1. Definice mozaik na str. 3 se uvažují v celém prostoru \mathbb{R}^3 . Jsou pak buňky konvexní mnohoúhelníky (nebo spíše mnohostěny), jak se píše za definicí 3?
2. V definici 7 by se mělo přidat, že determinant matice je roven 1. Jinak nemusí věta 1 platit, protože například pro ortogonální matici s prvky -1 , 1 a 1 na diagonále a nulami mimo diagonálu bychom požadovanou trojici úhlů nenašli.

3. Pořadí násobení matic ve znění věty 1 neodpovídá výsledku uvedenému v důkazu. V jakém pořadí se mají matice násobit? Může se stát, že $G_{33} = -1$, jak potom vypadá úhel ϕ ?
4. Jak by správně měla vypadat pravděpodobnost v poslední části druhého kroku algoritmů 2 a 3?
5. Jaký je důvod přidání druhého členu do (2.4)? Co by se stalo, kdyby se pro $\theta < 0$ neuvažovala hardcore podmínka?
6. V textu se mi nepodařilo dohledat, jaký je počet buněk Voronoiho mozaiky použité v podkapitole 3.3.
7. Všechny histogramy po 0 iteracích na str. 20–23 by měly odpovídat stejnému rozdělení. Čím je způsobeno, že některé vypadají víc odlišně?

ZÁVĚR

I přes některé uvedené výhrady považuji práci Damiána Kulicha za velmi dobrou a doporučuji ji uznat jako bakalářskou práci.

V Praze, 22. ledna 2021

doc. RNDr. Zbyněk Pawlas, Ph.D.
KPMS MFF UK