

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Bc. Martina Šarmanová

Název práce: Mathematical modeling of vibrational dynamics in electron scattering from molecule

Studijní program a obor: Matematické modelování ve fyzice a technice, Matematika

Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Ivana Pultarová, Ph.D.

Pracoviště: Fakulta stavební ČVUT v Praze, Katedra matematiky

Kontaktní e-mail: ivana.pultarova@cvut.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:

Předložená práce studuje efektivní numerické metody řešení integro-diferenciálních rovnic, které slouží pro popis energetických a frekvenčních jevů při nepružné srážce elektronu s molekulou. Rovnice jsou diskretizovány pomocí rozvoje řešení do vlastních funkcí příslušného Hamiltonova operátoru. Získaná soustava lineárních rovnic má symetrickou matici s komplexními diagonálními prvky.

Práce navazuje na bakalářskou práci autorky. Zde ovšem se počítá s molekulou o třech atomech a se třemi vibračními složkami, což zvyšuje náročnost úlohy. Přestože matice soustavy je řídká a je součtem Kroneckerových součinů diagonálních nebo třídiagonálních matic s pravidelnou strukturou, není jasné, jak odhadnout spektrální vlastnosti matice, a tedy jak ev. ovlivnit konvergenci iteračních metod. Pro řešení byly zvoleny Krylovovy metody, a to metoda sdruženě ortogonálních sdružených gradientů (COCG) a zobecněná metoda minimálních reziduí (GMRES). Hlavním cílem práce bylo nalézt vhodné metody předpodmínění. Jedna z kapitol je věnována shrnutí nejnovějších výsledků pro soustavy s komplexní maticí. Do sady testovacích metod byly v práci zahrnuty: Jacobiova metoda, bloková Jacobiova metoda pro různé volby bloků, předpodmínění pomocí rozkladu pásové matice a neúplného LU rozkladu a dvě metody rozkladu dle nejnovějších výsledků. Výpočty byly prováděny pro tři modely kolize elektronu s molekulou vody s různými časově frekvenčními parametry. Autorka naprogramovala uvedené metody v jazyku Fortran.

Co do počtu kroků se obecně jako nejvýhodnější ukázala metoda předpodmínění pomocí pásové matice. Ovšem z hlediska výpočetního času byla nejvýhodnější bloková Jacobiova metoda. Úspora času byla oproti nepředpodmíněné verzi GMRES i více než tisícinásobná. Důležitou roli hrála možnost paralelního výpočtu i vhodné přeuspořádání matice, což bylo v práci zdůvodněno. Tuto skutečnost považuji za důležitou, neboť právě fyzikální pozadí úlohy může napovědět, jak vhodně volit bloky pro předpodmiňovač, a tím se zde otevírá možnost nových výsledků.

Volbou tématu, rozsahem a způsobem zpracování splňuje předložená práce požadavky na diplomovou práci. Získané výsledky jsou originální a představují přínosný vhled do náročné a zajímavé problematiky. Práce je napsána v anglickém jazyce, bez gramatických chyb, s nepatrným množstvím tiskových chyb, které patrně vznikly v důsledku nesprávného použití sazečského programu: např. nekonzistentnost v použití malých a velkých písmen a závorek v označení obrázků a vzorců.

Předloženou práci doporučuji uznat jako diplomovou práci a doporučuji hodnocení A.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Proč jsou počty N_B , N_S a N_A vlastních funkcí pro diskretizaci voleny úměrné převráceným hodnotám frekvencí ω_B , ω_S , ω_A ?
- 2) Jak je naloženo s komplexními diagonálními prvky při (blokové) Jacobiově metodě a při pásovém a neúplném LU rozkladu? Jinými slovy: Je např. matice K_1 ve vzorci (5.2) komplexní?
- 3) Čím je způsobena jistá periodičnost v křivkách na obrázcích 4.11 - 4.13?

4) Lze přímo z dat úlohy, tedy např. z M , λ , ϵ , a , α , β , usoudit na náročnost numerického řešení?

Práci

doporučuji nedoporučuji
uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 15. srpna 2022