

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- | | |
|-------------------------------------------------------|-------------------------------------------|
| <input checked="" type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input checked="" type="checkbox"/> bakalářské práce | <input type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor: Jan Kovačovský
Název práce: Non-additive intermolecular interactions
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího: Mgr. Jiří Klimeš Ph.D.
Pracoviště: Katedra chemické fyziky a optiky
Kontaktní e-mail: klimes@karlov.mff.cuni.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 vedoucího:

Ve své bakalářské práci se pan Kovačovský zabýval popisem interakcí mezi atomy vzácných plynů jednak pomocí empirických potenciálů a také pomocí obecných potenciálů založených na neuronových sítích. Cílem bylo ověřit možnosti těchto metod pro dvoučásticové interakce a neaditivní tříčásticové interakce. Neuronové sítě se v současnosti intenzivně testují a začínají využívat pro popis interakcí mezi atomy a molekulami. Pro bakalářskou práci jsme především testovali modely, ve kterých je hlavní část interakce ponechána jednoduchému fyzikálnímu popisu (např. pomocí Lennard-Jonesova nebo Buckinghamova potenciálu) a neuronové sítě se starají o odchylky od tohoto popisu. Na tématu pan Kovačovský pracoval pilně a velmi oceňuji rychlost s jakou implementoval různé algoritmy a schopnost osvojit si práci s programy pro kvantové výpočty nebo s dostupnými knihovny pro neuronové sítě. Také byl schopen vyřešit různé problémy, které nastaly při použití tohoto nového přístupu k popisu interakcí. Nicméně v některých případech došlo k tomu, že ne vždy byly různé úkoly dotaženy do konce, což se odráží i na kvalitě odevzdané práce.

V obecné části práce, do strany 11, je v textu několik věcných chyb a nedostatků, například při značení integrálů mezi rovnicemi 1.7 a 1.8. V rovnici 1.29 patrně chybějí znaky integrálů a bylo by vhodnější značit výsledek jako energii E než jako potenciál V . Od strany 12 je kvalita práce znatelně vyšší. Vlastní výsledky jsou obsaženy v kapitolách 2 a 3. V první z nich se jedná o výsledky testování různých parametrů neuronových sítí pro popis meziatomových interakcí a informace zde obsažené jsou velmi užitečné pro další práce. Ve třetí kapitole jsou příklady použití modelových potenciálů pro popis interakce dimeru a trimeru helia a neonu. Z výsledků, které pan Kovačovský získal, je zde jen část a pro některé grafy chybí detailnější popis v textu.

Přes uvedené nedostatky konstatuji, že předložená práce splňuje požadavky kladené na bakalářskou práci a doporučuji ji k obhajobě s navrženou známkou dobře.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Co označuje veličina G v grafu 3.4?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího: Praha, 24. 8. 2023