

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Martin Crhán
Název práce: Full Centroid Molecular Dynamics through Machine Learning
Studijní program a obor: Teoretická fyzika (FTFP)
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího: RNDr. Ondřej Maršálek, Ph.D.
Pracoviště: Fyzikální ústav UK, MFF UK
Kontaktní e-mail: ondrej.marsalek@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:

Diplomovou práci “*Full Centroid Molecular Dynamics through Machine Learning*” vypracoval Martin Crhán pod mým vedením na Fyzikálním ústavu UK. Práce se věnuje metodám dráhově integrační molekulární dynamiky s cílem zvýšit výpočetní efektivitu a přesnost centroid molecular dynamics, která umožňuje získat přibližnou informaci o dynamice systému kvantových částic. K dosažení tohoto cíle práce využívá mimo jiné metody strojového učení.

Text samotný je zpracován kvalitně a s minimem formálních či technických problémů. Úvod do tématu je přehledný a shrnuje vše důležité k pochopení samotného obsahu práce. Sekce vysvětlující teoretické základy a výpočetní metodiku jsou napsány poměrně podrobně, což jednak umožňuje reprodukci výpočtů a jejich výsledků a jednak usnadňuje další rozvoj představených metod, například dalšími studenty. Výsledky pro modelové systémy i pro kapalnou vodu jsou potom prezentovány jasně a zřetelně ukazují schopnosti a výhody vyvinuté metodiky. Zároveň dokumentují, že student kromě implementace a provedení samotných simulací realizoval také nadstandardní analýzu výsledků, například při srovnání druhých derivací interakčních a korekčních energií.

Během přípravy diplomové práce musel student zvládnout poměrně širokou škálu témat, včetně podrobností metodiky na úrovni nutné pro vlastní implementaci či technických detailů nutných k realizaci simulací, které jsou nezanedbatelně složitější než standardní klasická molekulární dynamika. Student tyto úkoly zvládal s aktivním zájmem a s přehledem, který ukazuje, že získal schopnost samostatně řešit výzkumné otázky. Téma práce je čerstvým a otevřeným výzkumným problémem, při jehož řešení student prokázal značnou iniciativu při navrhování možných postupů řešení otázek a problémů, které během práce nastaly. Při studiu teoretických základů i výpočetní metodiky šel do značné hloubky, což ukazuje například úroveň detailu ve druhé a třetí sekci práce.

Celkově jsem s prací Martina Crhána velmi spokojen a výslednou diplomovou práci považuji za vynikající. Odborný obsah práce prezentovaný mnou jako vedoucím vzbudil zájem na dvou nedávných konferencích. Vyvinutá metodika může jednak být dále rozvíjena a jednak je bezprostředně použitelná pro další projekty. Chystáme se ji také v nejbližší době publikovat.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Všechny otázky a připomínky byly vypořádány během přípravy diplomové práce.

Práci:

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl

Místo, datum a podpis vedoucího:

Praha, 30. 8. 2023