

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: Jakub Krieger

Název práce: Molekulová simulace Lennard-Jonesovské tekutiny jako úloha do praktika z fyzikální chemie

Hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte jednu z možností)

1. Rozsah práce a její logické a formální členění	
✓	A - přiměřené, odpovídají charakteru práce a významu jednotlivých částí
	B - nevyrovnané, členění není logické n. rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
	N - nedostatečné

2. Odborná a didaktická správnost	
✓	A - výborná, bez závažnějších připomínek
	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
	C - uspokojivá, s čtenějšími drobnými závadami
	N - nevyhovující, s hrubými chybami

3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů	
✓	A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce
	B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zejm. v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací
	C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat
	N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyková a stylistická úroveň práce	
✓	A - výborná, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
	B - velmi dobrá, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
	C - uspokojivá, čtenější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

5. Formální a grafická úroveň práce	
	A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
✓	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu, překlepy, chybějící zkratky apod.
	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo čtenějšími drobnými chybami
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k výše uvedeným bodům: **viz příloha**

Dotazy k obhajobě

viz příloha, bod 8, odd. **Nepřesnosti**

Stanovisko k opravě chyb v práci:

opravný lístek/oprava v textu ~~JE~~ / **NENÍ** (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

Stanovisko k výsledku automatické anti-plagiátorské kontroly práce dle SIS:

Celkové procento podobnosti: 5 %

Počet slov v nejdelším úseku podobnosti: cca 50 (citace zákona)

Slovní komentář ke stavu kontroly programem Turnitin ze SIS (*byla nalezena významná shoda v části úvod, výsledky, diskuse či závěr?*): **Práce je originální, veškeré nalezené shody jsou citace, běžné obraty či vzorce, které ze své podstaty nemohou být napsány jinak.**

Jedná se podle Vás o **PRÁCI ORIGINÁLNÍ** / ~~PLAGIÁT~~ (zakroužkujte) - v případě podezření, že posuzovaná práce je plagiát, prosím zdůvodněte

Celkový návrh

Navrhovaná celková klasifikace (*výborně, velmi dobře, dobře, neprospěl*): **výborně**

Datum vypracování posudku: **1. června 2024**

Jméno a příjmení, podpis oponenta (*dle SIS*): **prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.**

Posudek oponenta na bakalářskou práci Jakuba Kriegera

Molekulová simulace Lennard-Jonesovské tekutiny jako úloha do praktika z fyzikální chemie

Je to poprvé, co jsem recenzoval pedagogickou práci a musím říci, že jsem byl mile překvapen – dokonce natolik, že se pokusím se navrženou „laboratorní úlohu“ protlačit do našich laboratoří z fyzikální chemie.

Práce je dělena na „teoretickou část“, která kromě nezbytných fyzikálních postupů obsahuje i pedagogické pojmy. „Metodická část“ obsahuje návrh pedagogického experimentu, jehož analýze je věnována „Výstupní část“ a následně je navrženo vylepšení úlohy. Pan Krieger mi poslal software a úlohu jsem si sám vyzkoušel.

Práce je dobře čitelná a přehledná a software po překonání běžných obtíží funguje bez problémů.

Nepřesnosti

V práci jsem našel nepřesnosti, které ale nesnižují hodnotu práce z hlediska cílů. Kromě toho některé poznámky níže jsou jistě subjektivní.

1. Definice ideálního plynu dle rov. (2.1) není jediná možná, mělo by se upřesnit slovem „klasický“ resp. vyhovující Maxwellově–Boltzmannově statistice (aby se odlišilo od fyzikální definice, která obecně uvažuje kvantovou statistiku). Podobně na začátku odd. 2.2.1 „klasické hmotné body“.
2. Za rov. (2.8): Termín „fázový prostor“ není definován. Chápu ale, že je to těžké vysvětlit na bakalářské úrovni.
3. Odd. 2.3.2: Rov. (2.22) je spíš příklad platný jen pro atomární plyn. e^{-r} dál v textu má být e^{-Br} , kde B je konstanta. Exponenciální funkce se v numerických procesorech nepočítá podle Taylorova rozvoje, ale obvykle pomocí Čebyšovovy aproximace. V rov. (2.25) chybí odečtení hodnoty LJ potenciálu v $r = r_c$. Hodnota $r_c = 2,5\sigma$ se dnes již používá výjimečně.
4. Odd. 2.3.4: Upřesnit periodické okrajové podmínky jako „kubické“. Nerovnost (2.30) je opačně.
5. Odd. 2.3.5: Znaménko před gradientem v (2.34).
6. Odd. 2.3.6: Jen pro jednoatomový plyn.
7. Odd. 2.4.2: Zde není nic špatně, ale pro danou cílovou skupinu považují definici n_{ef} a další detaily za nevhodné. Myslím, že stačí říci, že data jsou korelovaná, což se řeší zablokováním tak, že korelace jsou malé.

8. Odd. 3.1.3: Pro úplnost by chtělo přidat parametr a , a to i do návodu. Není jasné, jak jsou získány parametry a, b van der Waalsovy rovnice. Obvyklá metoda je použít T_c, p_c tekutiny, ale jaké? Reálného argonu nebo Lennard-Jonesovy kapaliny? Ono to může být prakticky to samé, pokud LJ σ, ε bylo nastaveno podle přesných simulací. Toto by chtělo vysvětlit (na patřičně jednoduché úrovni i studentům).

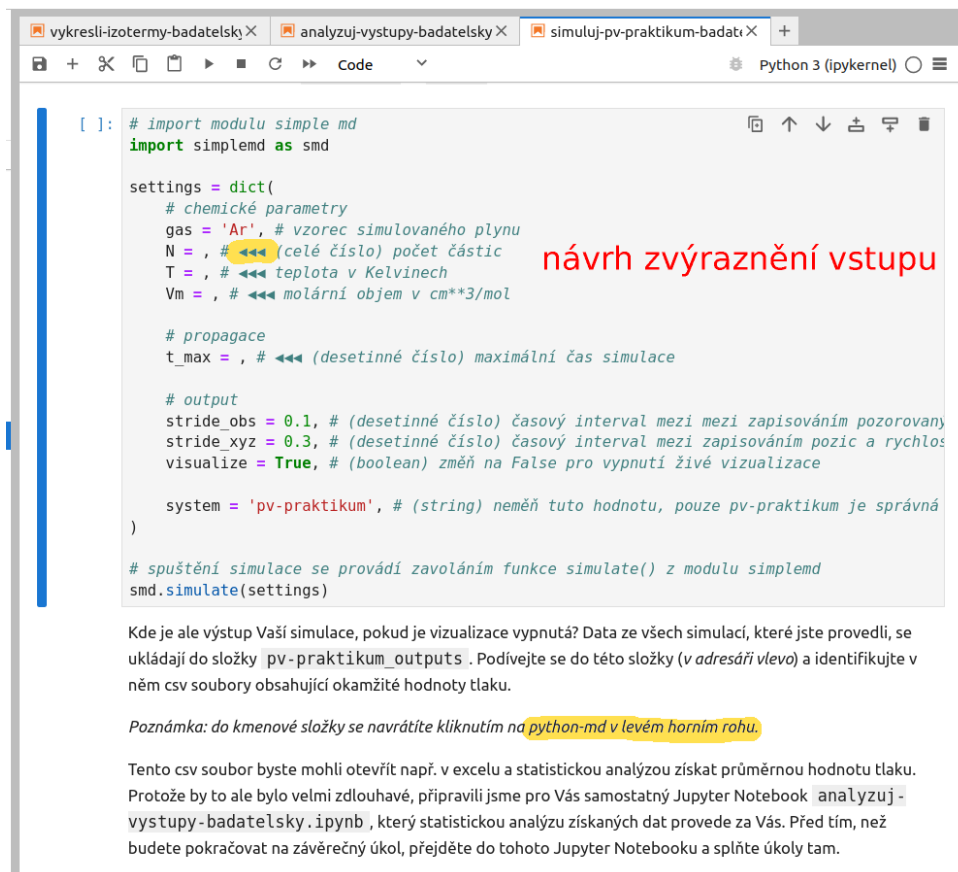
Moje doporučení (i z hlediska rychlosti) je použít krátkodosahový LJ potenciál (bez korekcí na useknutí) s tím, že parametry σ, ε budou nastaveny pomocí simulovaného kritického bodu (ten je pro $r_c = 2,5\sigma$ k dispozici v literatuře) tak, aby odpovídaly argonu. Pak ale přestane být vhodné řízení počtu částic podle technické podmínky $R_c < L/2$.

9. Pod obr. 12: Doba simulace roste při jednoduché implementaci párové sumy kvadraticky s N .
10. Obr. 13: Předpokládám, že nebyly použity korekce na useknutí potenciálu. Pro cílovou skupinu ale raději nezavádět, viz bod 8 výše.

Poznámky k simulační úloze

Některé nedokonalosti již byly odhaleny autorem při testování na vzorku studentů.

1. Chybí mi úvodní informace k tomu, co dělat v prostředí jupyter-lab při chybě, jak řešit přerušení výpočtu, jak reset (např. co smazat). Dále není jasné, co se stane, když upravím data v průběhu běhu (výstup se zablokuje) a stisknu znova Ctrl-Enter. Zdá se mi, že si „naprogramuji“ několik simulací za sebou, jen nevidím výstupní protokol (ale můžu si mezitím dojít na kafe).
2. Je dobré upozornit, že jupyter-lab automaticky ukládá změněný notebook – tedy nelze se v případě chyby vrátit jednoduše k definovaně uložené verzi.
3. Souhlasím se zjištěním, že je lepší neplést studenty redukovánými veličinami a používat reálné. Zda simulační program používá redukované veličiny nebo ne, je technický detail nezajímající cílovou skupinu.
4. Zvýraznit v kódu, kam má student napsat vstupní data, viz obr. 1.
5. Velmi bych doporučoval 3D grafiku, koule přes sebe nejsou přehledné. Téměř jistě takový modul pro python existuje.
6. Lepší úprava výstupu se **zaokrouhlenými hodnotami veličin**.
7. “Please, use a lower density” změnit na “use a higher molar volume”. Ano, každý student by to měl vědět, ale mate to.
8. Řízení počtu částic podle podmínky $r_c < L/2$ nepovažuji za vhodné. A samozřejmě, že můžu sčítat přes kopie simulační buňky, pokud je to výhodné (např. pokud studuji krystaly). Podmínka $r_c < L/2$ je pouze technická.



Obrázek 1: Jak zvýraznit místo pro vstup dat

9. Nejsou jasné jednotky t_{\max} , zvláště proto, že se nemluví o hmotnosti a neví se, co je redukováná jednotka času. V případě reálných jednotek lze řídit dobu výpočtu buď simulačním časem nebo počtem kroků.
10. Všiml jsem si, že počáteční konfigurace je na sféře. To tak má být? Nebyl by lepší krystal s vakancemi? Nebo i náhodná konfigurace s omezením délky pohybu pohybu v jednom kroku či minimalizací?
11. Tabulka výsledků z [analyzuj-vystupy-badatelcky.ipynb](#) je zpřeházená, lepší by bylo seřadit podle T a pak podle V_m .
12. Pro výpočet středních hodnot se správně ignoruje neustálený začátek, ale není vysvětleno, proč a kolik. Pro $t_{\max} = 500$ se odsekává 50, což nesouhlasí s obr. 18.
13. Je špatně p_{\min} v grafu $p(V_m)$ resp. nenastavuje se automaticky.
14. Str. 59: „Kliknutím na `python-md` se vrátíte do kmenové složky a Jupyter Notebook `analyzuj-vystupy` najdete tam.“ Problémy s navigací jsem neměl, ale žádné „`python-md`“ nikde nevidím.

Síly, kterými na sebe částice působí v závislosti na jejich vzdálenosti r , popisuje v naší simulaci Lennard-Jonesův potenciál $U_{\text{LJ}}(r)$ (viz obrázek níže). Pokud je potenciál záporný, částice se přitahují, pokud je kladný, částice se odpuzují. Hodnoty potenciálu a vzdálenosti udáváme v jednotkách ϵ a σ , což jsou vnitřní jednotky simulace. Např. jednotka vzdálenosti σ je praktická, protože průměr atomu v simulaci je vždy 1σ . Konkrétně pro argon platí **přepočet** $1\sigma = 0,3632\text{ nm}$.

Konkrétně pro argon platí **přepočet** $1\sigma = 0,3632\text{ nm}$.

Síly, kterými na sebe částice působí v závislosti na jejich vzdálenosti r , popisuje v naší simulaci Lennard-Jonesův potenciál $U_{\text{LJ}}(r)$ (viz obrázek níže). Pokud je potenciál záporný, částice se přitahují, pokud je kladný, částice se odpuzují. Hodnoty potenciálu a vzdálenosti udáváme v jednotkách ϵ a σ , což jsou vnitřní jednotky simulace. Např. jednotka vzdálenosti σ je praktická, protože průměr atomu v simulaci je vždy 1σ . Konkrétně pro argon platí **přepočet** $1\sigma = 0,3632\text{ nm}$.

Konkrétně pro argon platí **přepočet** $1\sigma = 0,3632\text{ nm}$.

Obrázek 2: Nahrazení $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ -vstupu v editoru (azurově) přímým textem (žlutě) – ještě lépe ovšem s desetinnou tečkou, aby číslo šlo kopírovat do pythonu, kde provádíme výpočty

Formální úroveň

Formální úroveň není příliš dobrá. V práci je spousta překlepů a gramatických i typografických chyb.

- ! V markdown textu v jupyter-lab notebooku nepoužívat pro matematické výrazy a čísla $\text{T}_{\text{E}}\text{X}$, ale HTML. Výraz generovaný $\$. \$$ je obrázkem a nelze zkopírovat do clipboardu a musí se opsat, což je protivné a vede k chybám (kromě šeredné nadbytečné mezery za čárkou), viz obr. 2.
- ! Správně je „van der Waals“ (vdW), nikoliv „Van der Waals“ (VdW).
- Živé odkazy v PDF jsou chválihodné, ale rámečky jsou šeredné. Zkuste: `\usepackage[colorlinks=true]{hyperref}`
- Spousta** drobných překlepů. Korektor pravopisu je dnes již běžnou výbavou editorů! Překlepy jsou ale i v kódu (`eps lion`).
- Str. 72: Lennardův–Jonesův znamená, že byli dva. Správně je Lennard-Jonesův (byl to jeden člověk). Výraz je někdy správně, někdy špatně.
- Sjednotit jednotky molárního objemu.
- Str. 59: Termín „kmenová složka“ jsem slyšel poprvé, ale asi mu je rozumět.
- „ne všichni studenti znají tabulkovou hodnotu molárního objemu za standartních podmínek“:
 - Proč by ji medle měli znát?
 - Správně se píše „standardní“.

- (c) Definice pojmu „standardní teplota a tlak“ je nejednoznačná a může to být cokoliv od 0 °C do 25 °C a od 100 kPa do 101,6 kPa.

9. Typografické chyby:

- (a) Proměnné mají být italikou (v textu i jako index/exponent) (*i*-tý stav).
- (b) Zkratky mají být stojatě (v textu i jako index/exponent) (*f*_{f.p.}).
- (c) Rozlišovat spojovník (bude-li), pomlčku a případné mezery okolo (20–30 min, záměrně vágní – student, který) a matematické minus (−1).
- (d) České „uvozovky“.
- (e) Neslabičné předložky nepatří na konec řádky, vyřeší se vlnovkou:
v~praktiku z~fyzikální chemie.
- (f) Vzhledem k interakci s kódem mi nevadí desetinné tečky místo čárek, ale mělo by to být jednotně, v textu i v notebooku se obě verze míchají. **Za desetinnou čárkou však nesmí být mezera** (pak se jedná o seznam), tedy v T_EXu takto: `3{,}14`. Pokud se zadá `\mathcode'="002C` v preambuli, nebude za , v matematickém režimu mezírka, ale je ji naopak nutno vkládat u seznamů (nepoužije-li se ;).

Práci jsem prostudoval a doporučuji ji k obhajobě. Navrhuji klasifikaci „výborně“.

V Praze dne 1. června 2024.

prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.