

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

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

|                          |   |
|--------------------------|---|
| Autor:                   | Vojtěch Votruba   |
| Název práce:             | Recognition of Dissipative Systems Using Machine Learning |
| Studijní program a obor: | Fyzika, Obecná fyzika (FOF)                               |
| Rok odevzdání:           | 2025  |

|                          |  |
|--------------------------|--|
| Jméno a tituly oponenta: | prof. ing. Václav Klika, Ph.D.         |
| Pracoviště:              | Katedra matematiky, FJFI, ČVUT v Praze |
| Kontaktní e-mail:        | vaclav.klika@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:

Bakalářská práce studenta se zabývá aplikací neuronových sítí na identifikaci fyzikálně relevantních modelů s GENERIC strukturou. Student umě předkládá shrnutí obou částí problému, totiž základy relevantních neuronových sítí a nerovnovážné termodynamiky, a následně aplikuje představenou metodu na několik experimentálních (simulovaných) dat.

Téma považuji za náročnější zejména kvůli propojování dvou velmi odlehlých oblastí. Práce je poměrně zdařilá, podstatné věcné chyby jsem nenašel (snad bych jen doporučil zkontrolovat obrázky viz bod 8 níže). Z textu je patrné autorovo porozumění metodě obou částí práce.

Níže připojuji několik dotazů k práci.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Jak souvisí nejpravděpodobnější dráha s derivací v rovnici pod (1.5) dle  $\eta$ ?
- Existuje nějaká klíčová vlastnost, kterou  $\phi$  v neuronových sítích, rce (2.1), mají mít?
- V předpisu pro  $\theta_{i+1}$  v second-order methods na str 16 užíváte  $(\nabla^2 L)^{-1}$ , inverzi Hessovy matice. Není toto však problém pro funkce typu ReLU (viz též předchozí bod)?
- Při učení dynamiky předpokládáte od začátku znalost  $\mathbf{x}$ . Lze rozšířit metodu tak, aby se učila i stavové proměnné?
- \*Nejednoznačnost úlohy učení v  $S, \Sigma$  je zřejmá. Neznamená to však, že numerické aproximativní metody musí selhávat při hledání řešení, dokud se tato nejednoznačnost neodstraní? Např v Figure 4.6 vidíme, že shoda není ideální, ale přijde mi, že jde o nevhodnou volbu  $C, K$ . Nešlo by přidat tyto dvě konstanty do učení modelu neuronovými sítěmi? Podobně je tomu asi v dalších příkladech. Např výsledky v Figure 4.10, si myslím, lze vylepšit vhodnější volbou shift a scalingu.
- Nebylo by lepší nagenеровaná numerická data trochu zašumit před aplikací metody?
- \*V chemických reakcích typu (4.2) bývá několik zákonů zachování. Není toto pro předkládanou metodu problém? A lze se tyto zákony zachování naučit (odhalit je) neuronovou sítí?
- \*V Obecné situaci v chemických reakcích, str 36-37, se podařilo naučit dynamiku, ale strukturu (entropii) již méně úspěšně. Prosím však o kontrolu správnosti Figure 4.15 a 4.16 - první říká, že entropie roste ve všech  $c_j$ , což se zdá být v rozporu s druhým obrázkem. Navíc, pokud se nepletu, ani variace (v abs. hodnotě) si neodpovídají.
- \*Uvažovaná počáteční podmínka ve Fickovské difuzi může být příliš speciální (Fourierovské módy velmi úzce souvisí s difuzí). Nemůže toto souviset s charakterem výsledků (oscilace) v Figure 4.20? Jak by vypadal výsledek učení pro náhodnou počáteční podmínku?

**Práci:**

- ☒ doporučuji  
☐ nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

- ☒ výborně   ☐ velmi dobře   ☐ dobře   ☐ neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 6. června 2025