

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor/ka: Jan Brandejs  
Název práce: Optimizing quantum simulations and the DMRG method  
Studijní program a obor: Fyzika, Teoretická fyzika  
Rok odevzdání: 2016

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Doc. Mgr. Jaroslav Zamastil, PhD.  
Pracoviště: KCHFO MFF UK  
Kontaktní e-mail: zamastil@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/oponenta:**

Předložená práce se zabývá poměrně novou, zajímavou metodou (DMRG) a jejímu použití na molekulu diboranu. Odbornou část diplomantovy práce, tj. samotné pochopení metody, jakož i napsání a odladění příslušné procedury, hodnotím velmi vysoko.

Podstatně hůře hodnotím formální, či písemnou, část diplomantovy práce.

Práce je přehledně strukturována, ale nepředstavuje skutečně pedagogický úvod do problematiky, který bych mohl doporučit.

Práce je psána anglicky, ale angličtina by mohla být výrazně lepší.

Práce obsahuje značné množství tiskových chyb, na samé hranici toho, co je tolerovatelné.

Občas je práce prostě nesrozumitelná. Např., v definici 3 na str. 7 je použita tří-orbitalová redukovaná matice hustoty, která není předem zavedena. V této definici na str. 7 je odkaz na rovnici 3.2, která se nachází až na str. 15. Odkaz samotný mně nedává smysl. Na str. 32 je místo čísla rovnice otazník, atd.

### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

Na str. 30 autor ukazuje, že odhad chyby při výpočtu normy vlnové funkce (n.v.f.) jde převést na diagonalizaci matice hustoty. To co nás ve skutečnosti zajímá je ale chyba při výpočtu energie.

Není mi znám žádný teorém dokazující, že minimalizace chyby při výpočtu n.v.f. vede k minimalizaci chyby v odhadu energie. Autor žádný takový teorém nezmiňuje.

Je to tak, že se prostě věří v to, že minimalizací chyby n.v.f. nejsem daleko od minima energie?

Není mně jasné nakolik je DMRG svázána s Matrix Product State (MPS) reprezentací.

Je to tak, že MPS je pouze výhodná reprezentace a DMRG je na ní, alespoň v principu, nezávislá? Je-li tomu tak, v čem spočívá výhoda MPS reprezentace?

### **Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: