

POSUDEK DOKTORSKÉ DIZERTAČNÍ PRÁCE
MODELLING OF ULTRACOLD GASES IN MULTIDIMENSIONAL OPTICAL LATTICES
ING. MIROSLAVA URBANKA

Posuzovaná práce je napsána jako přehledný výklad na celkem 97 stranách. Dizertační práce je založena na třech publikacích, jejichž je pan Ing. Urbanek hlavní autor. Práce je napsána dobrou angličtinou a má vynikající grafické zpracování.

Dizertační práce se zabývá problémem modelování plynů ultra chladných bosonických atomů ve více dimenzionálních optických mřížích pomocí Boseho-Hubardova Hamiltoniánu. Modelování ultra chladných atomů v optických mřížích je velmi důležité téma jak z hlediska fyziky kondenzovaných látek, tak také v poslední době velmi rychle se rozvíjejících oborů kvantové informatiky a kvantové simulace.

První část dizertační práce se věnuje modelování v jednorozměrných mřížích, její větší, druhá část, pak modelování ve dvourozměrných optických mřížích s velmi zajímavým příkladem více částicové lokalizace. Tyto simulace jsou obzvláště důležité také proto, že některé jevy, jako například vysokoteplotní supravodivost, jsou důsledkem více dimenzionálního uspořádání. Simulování dvourozměrných optických mříží je navíc oproti simulování jednorozměrných mříží nesrovnatelně obtížnější. V posledních letech bylo pro tyto účely vyvinuto několik alternativních metod (TNS, MERA, PEPS, TTNS, QMC, DMET, etc.), každá však má své výhody i nevýhody a to, která z metod je v daném konkrétním případě nejvýhodnější, záleží na okolnostech.

Pan Ing. Urbanek se ve své práci věnuje moderní metodě stromových tenzorových sítí (*tree tensor networks*, TTNS). Hlavním přínosem dizertační práce je pak masivně paralelní počítačový program TEBDOL (a k němu příslušející tenzorová knihovna) pro simulace ultra chladných bosonických atomů ve vícedimenzionálních optických mřížích, což osobně velmi oceňuji. Dizertační práce pana Ing. Urbanka se velmi hezky čte, autor dobře uvádí čtenáře do problematiky (obzvláště část týkající se tenzorů je kvalitně zpracována). Přesto si myslím, že některé části by zasloužily větší pozornost. Především úvodní část 1.2 (alternativní metody pro řešení Boseho-Hubardova Hamiltoniánu) a také část týkající se kvantové termalizace (kapitola 10). Dizertační práce obsahuje jen velmi malé množství překlepů (operátory bez stříšky, „nearest-neighbouring interactions“ namísto „nearest-neighbour“, či chybějící gramatické členy „the“, např. „the article“ ve 3. větě sekce 6.2). Žádné větší nedostatky jsem v práci nenašel. Z drobných výtek bych snad jen zmínil opakované zavádění některých veličin (např. *double precision machine epsilon*), či operátorů v praktické části práce. Osobně také nejsem velkým příznivcem psaní v první osobě jednotného čísla.

Celkově se domnívám, že dizertační práce pana Ing. Urbanka má velmi dobrou úroveň a pan Urbanek v ní bez nejmenších výhrad prokázal schopnost samostatné tvořivé vědecké práce na požadované úrovni. Navrhuji proto, aby tato práce byla uznána jako podklad pro udělení vědecké hodnosti Ph.D.

V Cambridge (USA) dne 22.8.2017,

RNDr. Libor Veis, Ph.D.

Následují otázky a komentáře, z nichž některé mohou být použity pro obecnou diskusi.

1. V části 2.2 se hovoří o tzv. symetrických tenzorech (*symmetric tensors*), tzn. o řídké reprezentaci tenzorů, při které se využívá symetrií [v tomto případě $U(1)$]. Pokud se však nepletu, nejedná se nutně o „symetrické tenzory“ z matematického hlediska, tzn. o tenzory invariantní vůči permutacím svých indexů. Raději bych volil v literatuře běžně se objevující název *symmetry decomposed*, případně *sector decomposed form*.
2. Je symetrie celkového počtu částic v programu TEBDOL přímo integrována, nebo má uživatel možnost přidat další (alespoň ne-abelovské), např. celkovou projekci spinu?
3. Disertační práce se věnuje simulování časového vývoje zobecněným TEBD algoritmem. Ve všech numerických příkladech je počátečním stavem systému známý stav, např. základní stav odpovídající $U = 0$, či atomy lokalizované v určité části optické mříže. Umožňuje program TEBDOL také variační optimalizaci (variační komprese v Appendixu A) základního stavu (případně i excitovaných stavů) 2D Boseho-Hubardova Hamiltoniánu s libovolnými parametry J a U ?
4. V části 7.3, kde autor srovnává TTNS časový vývoj s přesným časovým vývojem, by bylo zajímavé znát informaci o normě TTNS vlnové funkce. Ta se v průběhu časového vývoje díky použitým aproximacím nezachovává a v dalších numerických příkladech je na ni odkazováno jako na veličinu informující o přesnosti simulací.
5. V části 6.2 je představena paralelizace pro jednodimenzionální uspořádání s úctyhodným škálováním. Mohl by autor stručně okomentovat příbuznost/rozdíly s přístupem představeným v práci: E. Stoudenmire and S. R. White, *Physical Review B* **87**, 155137 (2013)?
6. V závěru práce autor píše o možném rozšíření TTNS/TTNO přístupu pro fermionické simulace. Zajímá mne názor autora na možné rozšíření pro aplikace v kvantové chemii, tzn. nejen práce s elektrony (fermiony), ale také komplexní Hamiltonián obsahující dlouhodobou coulombickou interakci.
7. Hlavním výstupem disertační práce je počítačový program TEBDOL (a k němu příslušející tenzorová knihovna), což je ve skutečnosti obdivuhodný počín. Autor si zvolil poněkud exotický programovací jazyk Common Lisp. Je možné tento programovací jazyk efektivně kombinovat s jazykem C/C++, tzn. např. volat Common Lisp přímo z C/C++ programu? Jaká byla hlavní motivace pro výběr tohoto programovacího jazyka? Předpokládám, že výpočetně nejnáročnější úkoly se řeší na úrovni knihoven BLAS a LAPACK (maticové násobení, SVD, etc.).