

Posudok doktorskej dizertačnej práce

Tensor Network-based Computational Methods for Strongly Correlated Molecular Quantum Mechanics

Mgr. Jana Brandejsa

Dizertačná práca Mgr. Jana Brandejsa, ktorú vypracoval pod vedením Dr. Libora Veisa, sa zaoberá vývojom, implementáciou a aplikáciami nových výpočtových metód založených na metóde renormalizačnej grupy matice hustoty (DMRG). Kvantovo-chemická verzia metódy DMRG je jednou z mála dostupných výpočtových metód umožňujúcich výpočty molekúl so silne korelovanými elektrónmi, ktoré vyžadujú veľké aktívne priestory (rádovo desiatky molekulových orbitálov). Formát práce je skrátenejší, nakoľko je doplnený piatimi publikáciami autora. Štyri publikácie sú články v medzinárodných impaktovaných časopisoch, ako Journal of Chemical Theory and Computation, Journal of Chemical Physics, Journal of Computational Chemistry, posledný je review článok publikovaný v časopise Chemické listy písaný v češtine.

Z môjho pohľadu je najdôležitejší výsledok práce masívne paralelný DMRG program MOLMPS, ktorý je diskutovaný v prvej kapitole práce. Na niekoľkých príkladoch, vrátane klastra FeMo kofaktoru enzýmu nitrogenázy, je ukázané škálovanie s počtom CPU jadier, až do (približne) 2500. Napriek tomu, že sa jedná o vysoko netriviálny problém, ktorý vyžaduje množstvo komunikácie medzi výpočtovými uzlami, je výsledné škálovanie výborné. Ako jeden z praktických príkladov využitia metódy DMRG v kvantovej chémii je v dizertačnej práci diskutovaná aj analýza chemické väzbovosti, konkrétne elektrón-deficitných väzieb berýlia. V druhej kapitole je prezentované rozšírenie metódy DMRG na popis (chýbajúcej) dynamickej korelácie, a to prístupom „tailored coupled clusters“. Najskôr je to relativistická (štvorkomponentová) verzia s aplikáciami na diatomiká s atómami ťažkých kovov, následne vylepšenie nerelativistickej verzie s využitím lokálnych párových prirodzených orbitálov („natural orbitals“) - LPNO. Použitie LPNO umožnilo formulovať a následne implementovať takmer lineárne škálujúci program, ktorý je v princípe schopný počítať systémy s tisíckami bázových funkcií.

Dizertačná práca Mgr. Brandejsa prezentuje originálne výsledky a doktorand v nej zreteľne demonštroval svoju odbornosť. Práca je písaná výbornou angličtinou, má kvalitné grafické spracovanie a obsahuje iba malý počet preklepov a nepresností. **Záverom teda konštatujem, že práca Mgr. Brandejsa spĺňa kritériá na obhajobu v III. stupni vysokoškolského štúdia v zmysle platného Vysokoškolského zákona a neskorších predpisov a po jej úspešnej obhajobe navrhujem kandidátovi udeliť titul „PhD“.**

Pripomienky a podnety do diskusie:

1. V sekcii "Symmetry sectors" kapitoly 1.2 je uvedené, že v implementácii DMRG bola využitá symetria $U(1)$, odpovedajúca zachovaniu počtu alfa a beta elektrónov. Autor tvrdí, že ďalšie zlepšenie je možné dosiahnuť použitím symetrie $SU(2)$, odpovedajúcej spinu elektrónov. Ako je možno túto symetriu využiť a ako sa tým zmení výsledné škálovanie metódy DMRG?
2. Autor v sekcii 1.4 uvádza, že v prípade, keď je študovaný systém popísaný „čistým stavom“ (v orig. „pure state“), je korelácia „C“ tvorená výhradne kvantovým entanglementom. Je možné to nejak (názorne) ukázať?
3. Využíva sa v MOLMPS implementácii metódy DMRG asynchrónny paralelizmus, jednostranná (tzv. „one-sided“) komunikácia, alebo iná, pokročilá funkcionálna štandardu MPI-3?
4. Je MOLMPS samostatný program, resp. programový balík? Ak áno: a) akým spôsobom získava autor napr. 1- a 2-elektrónové integrály v báze atómových funkcií? b) prečo sa autor nerozhodol o implementáciu v rámci programového balíka NWChem, v ktorom už v minulosti spolupracovníci Dr. Pittnera implementovali iné metódy a (nazdávam sa, že) je dobrou softvérovou platformou pre súčasné superpočítače?