

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  
 bakalářské práce
- posudek oponenta  
 diplomové práce

Autor/ka: Lukáš Frk

Název práce: *Study of phase transitions in models with itinerant and localized particles via machine learning*

Studijní program a obor: Fyzika

Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Vladislav Pokorný, Ph.D.

Pracoviště: Fyzikální ústav AVČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 00 Praha 8

Kontaktní e-mail: pokornyv@fzu.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/opponenta:

Práce se zabývá aplikacemi metod strojového učení na klasifikaci fází v modelu Falicova a Kimballa (semiklasické přiblížení pro Hubbardův model), který je známý svým bohatým fázovým diagramem. Cílem práce je zrekonstruovat fázový diagram z článku Antipov et al., PRL **117**, 146601 (2016) pomocí sady různě pokročilých metod: analýzy hlavních komponent (PCA), pokročilejší metody Isomap a predikčních metod založených na neuronových sítích. Fázovou hranici mezi uspořádanou a neuspořádanou fází je možné odhalit už za použití standardní PCA,

hlubší analýza odhalí hranici mezi slabou lokalizací a Andersonovým izolátorem. Žádná z metod ale neodhalí předpokládanou hranici mezi Andersonovým a Mottovým izolátorem.

Práci hodnotím jako výbornou po stránce formální i obsahové. Je psaná v anglickém jazyce, v podstatě bez překlepů, obrázky jakou na slušné grafické úrovni (jenom z Obr. 6 a 7 chybí kousek na pravé straně). Autor práce pouze opakovaně zavádí některé zkratky (PCA je zavedena 5x), za druhou stranu zavede zkratku AI pro Andersonův izolátor a pak ji v textu nepoužívá. Práce je dobře motivovaná, má jasnou strukturu, přesně stanovený cíl kterého se drží, model i metody jsou dobře popsány. Práce se ale věnuje téměř výhradně problematice datové analýzy a nenechává moc prostoru pro fyziku. Výsledky jsou seřazeny podle použitých metod a závěry jsou podpořeny adekvátním množstvím numerických dat. Za nejdůležitější závěr práce pak považuji fakt, že pro klasifikaci fází je 120 let stará metoda PCA pořád lepší než moderní metody strojového učení. V práci mi pouze chybí detaily, které by umožnily reprodukovatelnost výsledků, třeba verze knihovny sci-kit nebo odkaz na repositář, kde jsou uloženy použité kódy a data.

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

- Autor práce na str. 18 píše „Also, in order to avoid overfitting, L2 regularization is introduced to both hidden layers.“ ale nedefinuje co L2 regularizace je ani necituje žádnou referenci na tuto metodu. Jak brání tato regularizace přefitování dat?

- Pro popis přechodu mezi Mottovým a Andersonovým izolátorem pro interagující elektrony byla vyvinuta teorie typického média (PRL **94**, 056404 (2005); PRB **71**, 205105 (2005)). Ta je postavená na předpokladu, že střední hustota stavů není dobrý popis pro neuspořádaný systém, protože v Andersonově izolátoru jsou elektrony lokalizované v malé oblasti krystalu a tak nedochází k samoprůměrování (je narušena ergodicita). Místo toho se zavádí typická hustota stavů, kterou lze aproximovat geometrickou střední hodnotou. Nenabízí tato teorie nějakou inspiraci pro zpracování dat pomocí výše uvedených algoritmů, které by odhalily přechod mezi Mottovým a Andersonovým izolátorem?

### **Práci**

**doporučuji**

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

**výborně**  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 10.6.2024

Vladislav Pokorný