

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor: Tomáš Tuleja  
Název práce: Bootstrap kvantové mechaniky a maticových modelů  
Studijní program a obor: Fyzika, Fyzika (FP)  
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly oponenta: Mgr. Jakub Novotný  
Pracoviště: Ústav částicové a jaderné fyziky, MFF UK  
Kontaktní e-mail: jakub.novotny@matfyz.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 oponenta:

Autor v této práci implementoval numerický algoritmus na principu "bootstrap", který slouží k získání aproximace vázaných hladin hamiltoniánu jednoduchého kvantového systému. Ten je pak demonstrován na výpočtu spektra harmonického oscilátoru a dvoujámy. Numericky získaný rozdíl mezi základním a prvním excitovaným stavem je porovnán s analytickými výsledky dvou standardních metod, WKB aproximace a metody dráhového integrálu. Odvození aproximace těmito dvěma metodami je věnována první kapitola. V druhé kapitole je představena metoda "bootstrap" a ve třetí kapitole jsou uvedeny numerické výsledky a implementované kódy.

Autor příliš podrobně následuje původní texty, ze kterých čerpá. První a druhá kapitola představují spíše kompilaci citovaných textů než kompaktní práci, což v některých případech dokládá i opomenutí vysvětlení přejaté notace a neuvedení motivace pro dané kroky v odvozeních. Uvítal bych komentáře přímo od autora, které by pomohly čtenáři se zorientovat a trochu nadnést nad velmi pokročilou teorií a technicky náročné výpočty, se kterými se v této práci autor seznámil.

Velmi podrobné odvození analytických výsledků v první kapitole tvoří dvě třetiny textu práce, přestože finální výsledek slouží jen ke konstatování, že v daném řádu a pro danou sadu parametrů lze použitím implementované metody získat lepší výsledek bez další diskuze. Naopak větší pozornost by si zasloužila teoretická kapitola o metodě "bootstrap" a její následné aplikaci. Ty působí velmi stručně a samotný princip metody není úplně jasný. Není zřejmé, proč by hodnoty určené touto metodou měly konvergovat ke skutečným hladinám kvantového systému.

Cenné jsou autorovy komentáře o validitě získaných hladin, neboť se ukazuje, že tato metoda může vést na falešné hladiny nebo některé opomenout při nevhodné volbě parametrů. Jak správně vyhodnotit získané výsledky je zásadní pro praktické použití této metody a zasloužilo by si tak obsáhlejší diskuzi a podrobněji rozepsat pozorování, která autor v práci uvádí, zvláště pak to, jak systematicky identifikovat falešné hodnoty ("imposter values"). Myslím, že hladiny v tabulce 3.2 nejsou vyhodnoceny správně. Jednotlivé hladiny v intervalech [2.2,2.3] a [2.7,3.0] byly metodou "bootstrap" vyhodnoceny jako skutečné hladiny spektra. Spíše však odpovídají ještě nedokongrovaným intervalům dvou skutečných hladin spektra dvoujámy na energiích  $\approx 2.248$  a  $\approx 2.989$ , což lze zjistit porovnáním se spektrem získaným jinými numerickými metodami, které však práce neobsahuje (pro případné porovnání uvádím mnou napočítaných prvních deset hladin diagonalizací hamiltoniánu v bázi harmonického oscilátoru pro  $g = 0.05$  po zaokrouhlení: [0.385, 0.497, 1.062, 1.588, 2.248, 2.989, 3.785, 4.675, 5.530, 6.622]).

Doufám, že moje kritické komentáře autorovi při psaní dalších odborných textů spíše pomohou, než aby ho zarmoutily. Velmi oceňuji grafické zpracování samotné práce a navrhuji hodnocení stupněm výborně.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- V práci byl porovnán numerický výsledek energetického rozdílu mezi základním a prvním excitovaným stavem s dalšími aproximacemi jen pro velmi mělkou dvoujámu. Má autor nějakou představu o tom, jak by dopadlo porovnání bootstrap metody s WKB a dráhovým integrálem v případě hlubší dvoujámy, kdy jsou první dva stavy spektra téměř degenerované?
- Proč by měla metoda "bootstrap" fungovat a je konvergence ke skutečnému spektru daného hamiltoniánu zaručená?
- Data na obrázcích 3.4 a 3.5 byla použita k vyloučení falešných hladin ("imposter values") pro dvoujámu v tabulce 3.2. Existuje nějaký systematický způsob, jak falešné hodnoty rozpoznat? Mohl by se autor vyjádřit ke komentáři o chybně vyhodnocených hodnotách v této tabulce?

- Porovnával autor výsledky napočítané metodou "bootstrap" se spektrem získaným jinou numerickou metodou? Má autor nějakou představu o tom, jaké by byly výhody a nevýhody "bootstrap" metody z tohoto hlediska (rychlost a stabilita výpočtu, náročnost na paměť)?

**Práci:**

- doporučuji  
 nedoporučuji  
uznat jako bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 31. července 2024