

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Ing. Bc. Jakub Višňák

Název práce: Kvantově chemické algoritmy pro kvantové počítače

Studijní program a obor: Fyzika, obor Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2012

Jméno a tituly oponenta: Mgr. Roman Čurík, PhD.

Pracoviště: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i.

Kontaktní e-mail: roman.curik@jh-inst.cas.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:

Student se v práci zabývá implementací algoritmů kvantových výpočtů s aplikací v kvantové chemii. Práce je velice rozsáhlá, začíná základními principy kvantové informace, pokračuje základními algoritmy (kvantová fourierova transformace, algoritmus odhadu fáze). Pro reálnou aplikaci na diagonalizaci relativistického KRCI Hamiltoniánu autor taky přidává úvod do relativistické kvantové chemie. Dosažené výsledky a vědecká úroveň diplomové práce nemůžu hodnotit jinak, než „vynikající“. Studentovo pochopení problematiky je hluboké a dokazuje jeho nadání.

Bohužel celkový dojem mírně kazí forma zpracování. Nevadí mi rozsah práce – úplně nepotřebných sekcí je v práci poměrně málo. Musím přiznat, že práce se četla docela špatně. Dále uvádím několik důvodů a příkladů:

- Student se často odkazuje na rovnice, které v textu někde následují. Čtení je přerušováno vyhledáváním rovnic v nepřečtené části textu. Rovnice by naopak měli být součástí větné skladby.
- Autor používá závorkované části vět přes několik řádků, někdy vloží další závorku. Jako příklad ať slouží střední sekce na str. 101.
- V textu lze najít několik vět, které nemají žádný smysl, několik rovnic, které se mi nepovedlo najít a autor se na ně odkazuje (rovnice (221),(227),...), několik rovnic se stejným číslem (str. 132,133,...).

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. U CI rozvoje LCI(IV,6) pro stav $X 0^+$ se používá jako vstupní odhad vektor tvořen fixní lineární kombinací dvou determinantů určených pro každou mezijadernou vzdálenost R . Tyto fixní koeficienty zodpovídají CI CAS(2,2) diagonalizaci pro $R=3.3$ a.u. Proč se koeficienty nemění s R , tj. proč se CI CAS(2,2) neprovádí pro každé R ?
2. Máte nápad jak prodloužit úspěšnost metod IPEA A a IPEA B pro $R>7$? Mám na mysli proceduru jinou než opakování iterací r -krát. Nepomohlo by vylepšení počátečního odhadu vlastního stavu pro $R > 6$?
3. Proč nebyla použita metoda IPEA B pro CI rozvoj LCI(I) ?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Praha, 29. 8. 2012

Místo, datum a podpis oponenta: