

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Optimalizace výpočtu zdrojových členů pro modelování generace vysokých harmonických v dlouhých prostředích
Jméno autora:	Bc. Němec Tadeáš
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra fyzikální elektroniky
Oponent práce:	Mgr. Zdeněk Mašín, PhD
Pracoviště oponenta práce:	Ústav teoretické fyziky, Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	náročnější
<p><i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i></p> <p>Zadání specifikuje práci v oblasti nelineární optiky, konkrétně z problematiky šíření (propagace) ultrakrátkých laserových pulzů v plynném prostředí. Tato práce vyžaduje znalosti z různých oborů včetně kvantové mechaniky, elektrodynamiky a programování. Jako taková vyžaduje od studenta pochopení souvislostí mezi makroskopickým a mikroskopickým popisem interakce hmoty a záření a zároveň vyžaduje schopnost prakticky implementovat numerické řešení problému, jak pomocí vlastního kódu, tak pomocí existujících nástrojů a tyto výpočty správně interpretovat. Vzhledem k tomu považuji práci za spíše náročnějšího charakteru.</p>	

Splnění zadání	splněno
<p><i>Posudte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i></p> <p>Hlavním cílem práce bylo prozkoumat možnosti využití neuronových sítí pro reprezentaci zdrojového členu v Maxwellových rovnicích v jedné dimenzi popisující šíření laserového pulzu v paraxiální aproximaci. Tohoto cíle bylo dosaženo a student v práci prezentuje výsledky simulací propagace laserového pulzu s použitím neuronových sítí optimalizovaných pro dvě intenzity: v poruchovém a v neporuchovém režimu.</p>	

Zvolený postup řešení	vhodný
<p><i>Posudte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i></p> <p>Hlavní těžiště práce spočívá v numerickém řešení známých rovnic pro propagaci laserového pulzu v plynném prostředí. K dosažení tohoto úkolu student nejprve používá srovnání svého numerického (ab initio) modelu pro explicitní výpočet zdrojového členu z Schrodingerovy rovnice s modelem využívajícím standardního popisu zdrojového členu v neporuchové oblasti s pomocí elektrické susceptibility prvního a třetího řádu. Ab initio model se zakládá na jednorozměrné aproximaci atomu efektivním potenciálem (soft-core Coulomb) a podobně redukci vlnové rovnice pro elektrické pole na jednorozměrnou aproximaci ve směru šíření vlny. Zvolené numerické metody pro řešení těchto jednorozměrných diferenciálních rovnic jsou standardní a běžně využívané s tím, že student provedl vlastní implementaci těchto metod. Pouze drobný nedostatek lze spatřovat v tom, že pro řešení Schrodingerovy rovnice nebyla implementována metoda ECS, která by mohla významně snížit výpočetní náročnost ab initio</p>	

metody a tedy snad umožnit i studium širší škály parametrů, ale tato skutečnost je studentem diskutována. Výpočet zdrojového členu pomocí neuronových sítí bylo použito standardní knihovny TensorFlow, která je vhodným nástrojem pro řešení tohoto problému.

Odborná úroveň

výborná

Posudte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.

Po odborné stránce neshledávám v práci žádné podstatné nedostatky kromě občasných drobných nepřesností, např. diskuze Bornovy-Oppenheimerovy aproximace, která ale není pro řešení práce podstatná, občasná nekonzistence v uvádění jednotek, kde jsou na začátku vymezeny atomové jednotky pro zbytek práce, ale v některých rovnicích přetrvávají veličiny jako je hmotnost elektronu a permitivita a v první rovnici dokonce i Planckova konstanta.

V kapitole 1 oceňuji stručný a jasný popis teorie, ze kterého je patrné, že student si teorii prošel poctivě a nenacházím v ní žádná slabší místa. Pouze v části 1.2 týkající se mikroskopických polí bych čekal zmínku o magnetické komponentě a stručnou diskuzi dipólové aproximace. V závěru první kapitoly student částečně navazuje na svoji bakalářskou práci a zasazuje ji do kontextu ab initio výpočtů ionizace v silných polích.

V kapitole 2 je přehledně popsána základní teorie propagace laserového pulzu v paraxiální aproximaci při zanedbání transversních komponent pole a různé tvary zdrojového členu Maxwellových rovnic. Těžištěm této kapitoly je výpočet susceptibility prvního a třetího řádu pomocí ab initio výpočtu dipólové odezvy atomu argonu a rozdělení rozsahu intenzit pole na poruchovou a neporuchovou oblast.

V kapitole 3 jsou popsány zvolené numerické metody pro řešení jednorozměrné Schrodingerovy rovnice (konečné diference a Crank-Nicholsonova propagace) a vlnové rovnice pro elektrické pole (Runge-Kutta čtvrtého řádu).

V kapitole 4 jsou popsány a analyzovány výsledky numerického modelování, která poslouží v dalším kroku jako zdrojová data pro trénování neuronové sítě. Jsou zde popsány interferenční jevy v numerických výsledcích jejichž zdroj se nepodařilo identifikovat, ale pravděpodobně souvisí s koherenční délkou pulzu. Nebylo mi zřejmé proč byla propagační vzdálenost zvolena právě na 26 mikrometrů a proč je náhle v části týkající se propagace vysoce intenzivního pulzu (str. 55) náhle použit frekvenční filtr na výsledky ad hoc modelu pro vyšší harmonické místo prezentace nezkreslených výsledků.

V poslední páté kapitole jsou prezentovány výsledky modelování s použitím neuronových sítí. Student prokázal schopnost zvládnout práci s knihovnou TensorFlow včetně implementace vlastní neuronové sítě. Výsledky ukazují částečný úspěch v predikci zdrojového členu při nižších intenzitách pole, ale daná neuronová síť selhává v případě pole s vysokou (neporuchovou) intenzitou. Tento problém je připsán malému rozsahu neuronové sítě, ale výpočty s větší sítí už nejsou provedeny. Popis výsledků v této části je značně zhuštěný s množstvím parametrů uvedených v textu. Pomohlo by tyto parametry shrnout do tabulek. V závěrečné diskuzi jsou rozvedeny možnosti dalšího pokračování práce včetně použití neuronových sítí z oblasti zpracování zvuku a nutnost použití širší třídy trénovacích dat.

Formální a jazyková úroveň

průměrná

Posudte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posudte typografickou a jazykovou stránku.

Po formální stránce je práce zpracována velmi kvalitně. Student si dal práci s pečlivou sazbou

rovnic a generováním obrázků. V některých případech ale na obrázcích chybí popisy všech os (elektrické pole v Fig. 4.4, 4.5) nebo se pojmenování veličin na osách neshoduje s popisem u obrázku (Fig. 5.10). Poněkud úsměvně působí volba číslování harmonických řádů v mnoha grafech (např. Fig.4.1), kde hlavní signál pochází od lichých harmonických, ale horizontální osy mají značky právě jen u těch sudých. Celkově je práce napsaná srozumitelnou angličtinou, ale občas se v práci vyskytují kostrbaté jazykové obraty, např. věty začínající „Remark that...“. Přehlednost textu v poslední kapitole mírně klesá. Tato část by si zasloužila trochu více péče, ale celkově se jedná o pečlivě zpracovanou práci.

Výběr zdrojů, korektnost citací

výborné

Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.

Všechny uvedené citace jsou relevantní a neshledal jsem v tomto směru žádné nedostatky. Výběr literatury je široký a citace jsou přehledně rozdělené na monografie, články, studentské práce a online zdroje. Způsob číslování citované literatury z tohoto důvodu není chronologický, což je poněkud nestandardní, ale neshledávám to jako vadu. Oceňuji i kvalitně zpracovaný stručný úvod do neuronových sítí včetně přehledu nejdůležitějších současně používaných metod.

Daší komentáře a hodnocení

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.

Úroveň dosažených výsledků je dobrým základem pro publikaci. Zřejmě by bylo nutné doplnit některé výpočty, například o výsledky pro větší neuronové sítě nebo o zahrnutí propagace tranzverzních komponent pole pro dosažení realistického popisu harmonického spektra.

III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE

Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.

Nejpřesvědčivěji na mě působil studentem velmi dobře zvládnutý komplexní projekt, který vyžadoval pochopení jak fyziky z různých oblastí, tak praktické znalosti programování.

Otázky:

1. V práci studujete vliv řady parametrů na výsledné zdrojové členy nebo na generované spektrum vysokých harmonických. Jeden z neméně důležitých parametrů ale zůstal nevyšetřen: vliv samotného efektivního 1D potenciálu atomu. Je známo, že v 1D simulacích dochází k uměle zvýšenému vlivu iontového potenciálu a tedy k zesílení rezonančních efektů. Pro dosažení realističtější simulace skutečného atomu ve 3D byly vyvinuty různé druhy efektivních 1D potenciálů, např. Szilárd Majorosi, Mihály G. Benedict, and Attila Czirják Phys. Rev. A 98, 023401, (2018). Bylo by zajímavé srovnat výsledné harmonické spektrum nebo zdrojové členy pro

případ dvou různých soft-core potenciálů. Změní volba potenciálu něco na interpretaci Vašich výsledků?

2. Trénování neuronové sítě probíhalo vždy pro konstantní intenzitu. Toto jsem považoval za trochu překvapivé neboť je to právě silná nelinearita procesu HHG, kterou bych považoval za klíčový aspekt, který by měla dobře natrénovaná síť umět reprodukovat. Je Vaše síť schopná tuto vlastnost HHG popsat? Dá se to otestovat přímočaře na vstupech s elektrickými poli různé intenzity. Změnil by tento způsob trénování přesnost výsledné neuronové sítě, tj. parametry MSE, MAPE?

3. Proč jste pro výpočet zdrojového členu v ab initio simulacích použil acceleration gauge namísto běžně používané length gauge?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm

Datum: 29.1.2024

Podpis: Zdeněk Mašín

