

Prof. dr hab. Marcin Mierzejewski
Instytut Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgr. Tomasza Szoldry pt.
“Ergodicity breaking in quantum systems: from exact time evolution to machine learning”

Rozprawę doktorską Pana Tomasza Szoldry stanowi cykl czterech publikacji, które zostały opublikowane w *Physical Review B* w latach 2021-2024. Pan mgr Tomasz Szoldra jest pierwszym autorem wszystkich czterech prac a ostatnim autorem jest Prof. Jakub Zakrzewski, promotor recenzowanej rozprawy. Rozprawa poświęcona jest analizie dwóch typów nieergodycznych układów kwantowych. Trzy z czterech publikacji dotyczą lokalizacji wielociałowej (*many-body localization, MBL*) a jedna publikacja poświęcona jest badaniom modeli, które posiadają pewną ilość specyficznych stanów własnych określanych jako “blizny kwantowe” (*quantum scars*). Jedna z prac poświęconych *MBL* została wyróżniona przed wydawcą *Physical Review B* jako *Editor's Suggestion*. W rozprawie precyzyjnie wskazano wkład Pana Tomasza Szoldry w powstanie poszczególnych publikacji. Zamieszczone informacje jednoznacznie wskazują, że wkład mgr. Tomasza Szoldry był dominujący.

Rozprawę uzupełnia stosunkowo obszerne wprowadzenie, w którym omówione zostały wybrane zagadnienia dotyczące kwantowych układów nieergodycznych, w tym zagadnienia związane z *MBL*. Możliwość występowania *MBL* w układach makroskopowych jest istotnym otwartym problemem, który budzi sporo zainteresowania i emocji w środowisku fizyków zajmujących się kwantową fizyką statystyczną. Przygotowanie wstępu, który we właściwy sposób oddaje obecny stan wiedzy uwzględniając sprzeczne poglądy środowiska z całą pewnością stanowiło spore wyzwanie, z którym doktorant poradził sobie znakomicie. Sformułowania dotyczące występowania *MBL* zostały zredagowane w sposób precyzyjny i wyważony.

W pierwszej części wprowadzenia przytoczone zostały najważniejsze informacje dotyczące teorii macierzy losowych, hipotezy termicznych stanów własnych (*eigenstate thermalization hypothesis, ETH*), całkowalności, blizn kwantowych oraz fragmentacji przestrzeni Hilberta. Moim zdaniem dobór prezentowanego materiału jest bardzo rozsądny a zamieszczone opisy są zrozumiałe i precyzyjne. Jednak opis kilku fragmentów mógł być nieco obszerniejszy:

- Omawiając zagadnienie związane z *ETH* na stronie 19.tej Autor wskazuje, że stosowalność *ETH* nie zależy od lokalności operatorów. Zamieszczony tekst mógłby sugerować, że *ETH* jest słuszna dla dowolnych operatorów, które nie są projektorami na stany własne Hamiltonianu. Nie jestem pewny czy zamieszczenie tak silnego stwierdzenia było intencją Autora.

-Kilka linii poniżej, w tekście poświęconym całkowalności czytamy, że układy całkowalne zawierają wykładniczo wiele całek ruchu. Takie stwierdzenie może być słuszne w przypadku *MBL* (jeśli udowodnimy, że *MBL* istnieje w granicy termodynamicznej) lecz w przypadku wielu dobrze znanych układów całkowalnych, liczba lokalnych całek ruchu rośnie liniowo z rozmiarem układu.

- W tekście poświęconym fragmentacji przestrzeni Hilberta warto było umieścić informację dotyczącą liczby podprzestrzeni i bazy przestrzeni Hilberta, w której fragmentacja zachodzi.

Druga część wprowadzenia poświęcona jest omówieniu lokalizacji wielociałowej. Szczególną uwagę poświęcono kwazilokalnym całkom ruchu, statystyce poziomów, czasowym zależnościom wybranych funkcji korelacyjnych oraz tzw. “ergodycznym bąblom”, które były badane w dalszej części rozprawy. Biorąc pod uwagę bardzo bogatą literaturę dotyczącą *MBL*, taki wybór materiału wydaje się być bardzo trafny. Obejmuje on zagadnienia fundamentalne (całki ruchu), najczęściej badane (statystykę poziomów energetycznych, entropię splątania stanów własnych) oraz wielkości, które można powiązać z eksperymentami dotyczącymi dynamiki badanych układów (funkcje korelacyjne). Czytając tę część wprowadzenia dostrzegłem drobny problem, któremu można było poświęcić nieco więcej uwagi. Moim zdaniem kolejność granic w równaniu (2.1) nie odzwierciedla wielkości, którą chcielibyśmy wyznaczyć w celu scharakteryzowania własności makroskopowego układu, lecz wielkość, którą możemy wyznaczyć na podstawie dostępnych metod numerycznych.

W dalszej części wprowadzenia omówione zostały pierwsze trzy publikacje tworzące recenzowaną rozprawę doktorską, które dotyczą *MBL*. Oryginalne prace opublikowane w *Physical Review B* napisane są w bardzo przejrzysty i przystępny sposób. Zakładam, że z tego powodu omówienia tych prac mają formę krótkich podsumowań, w których przedstawione zostały najważniejsze wyniki oraz koncepcja dalszych badań. Przedostatnia część wprowadzenia prezentuje najważniejsze informacje dotyczące blizn kwantowych oraz omawia publikację mgr. Tomasza Szoldry, w której rodziny blizn zostały zidentyfikowane przy pomocy sieci neuronowych. Oczywiście błąd edytorski występuje w definicji macierzy Pauliego na stronie 37. Ostatnia część wprowadzenia zawiera trafne podsumowanie najważniejszych wyników opisanych w cyklu publikacji, które stanowią rozprawę doktorską i które omówię w dalszej części recenzji.

Dwie pierwsze prace dotyczą sytuacji, w której podukład nieuporządkowanego łańcucha jest ergodyczny (tworzy tzw. ergodyczny bąbel, *ergodic bubble*). W trakcie ewolucji taki podukład może powodować termalizację sąsiadujących z nim węzłów. Węzły te stają się wówczas częścią ergodycznego bąbla, który staje się co raz większy. Prowadzi to do termalizacji kolejnych podukładów w procesie, który nazywany jest lawiną kwantową (*quantum avalanche*). Mechanizm ten ma bardzo istotne znaczenie dla określenia stabilności *MBL*. Niestety trudno jest precyzyjnie zdefiniować jaka część podukładu może być traktowana jako ergodyczny bąbel. W rozprawie doktorskiej Pana Tomasza Szoldry znajdujemy dwa ciekawe rozwiązania tego problemu. W pierwszej pracy zaproponowano aby bąble ergodyczne identyfikować przy pomocy sieci neuronowej typu autoenkodera, która analizuje funkcje korelacyjne spin-spin wyznaczone dla najbliższych i kolejnych najbliższych węzłów sieci. Sieć jest uczona na funkcjach korelacyjnych wyznaczonych dla układu, o którym wiemy, że znajduje się w reżimie ergodycznym. W reżimie silnego nieporządku prawdopodobieństwo występowania ergodycznego bąbla zawierającego n

kolejnych węzłów sieci maleje wykładniczo z n . To bardzo rozsądny wynik potwierdzający, że sieć neuronowa poprawnie identyfikuje ergodyczne bąble. Zależność inna niż eksponencjalna raczej wykluczyłaby poprawną klasyfikację podukładów przez sieć neuronową. Najciekawszy wynik tej pracy dotyczy logarytmicznego w czasie wzrostu rozmiaru ergodycznych bąbli. Zależność ta została połączona ze znaną od dawna dynamiką entropii splątania.

Wyjątkowo ciekawe i eleganckie podejście zastosowano w drugiej pracy. Ponieważ trudno jest jednoznacznie zidentyfikować ergodyczne bąble w układzie z losowym nieporządkiem, przeanalizowano sytuację gdy ergodyczny podukład (bąbel) został wprowadzony w określonym miejscu, poprzez odpowiednią modulację nieporządku. Badano czy ewolucję funkcji korelacyjnych spin-spin można powiązać z występowaniem lawin kwantowych. Najciekawszym i najbardziej zaskakującym wynikiem tej pracy jest silna zależność dynamiki układu od wyboru stanu początkowego. W przypadku najczęściej analizowanego stanu początkowego (stanu Neela) długość korelacji spinowych rośnie logarytmicznie dla dowolnie długich czasów nawet przy ekstremalnie silnym nieporządku. W przypadku, gdy stan początkowy jest stanem własnym silnie nieuporządkowanego podukładu, logarytmiczny wzrost długości korelacji ma miejsce jedynie dla krótszych czasów ewolucji, zależnych od rozmiaru ergodycznego bąbla. W trakcie czytania tej części rozprawy nasuwa się pytanie: dla jakich stanów początkowych są słuszne wyniki, które zostały uzyskane w pierwszej pracy przy pomocy sieci neuronowej. Wówczas stanem początkowym był stan Neela.

W kolejnej pracy badany był wpływ modyfikacji hamiltonianu na lokalne funkcje korelacji spin-spin, które zależą od czasu t . Badano w jaki sposób wyniki zależą od odległości, d , pomiędzy miejscem, w którym dokonujemy modyfikacji hamiltonianu, a miejscem, w którym wyznaczamy funkcje korelacyjne. W pracy analizowana była modyfikacja hamiltonianu polegająca na usunięciu wybranego wiązania, co efektywnie prowadziło do zmniejszenia rozmiaru układu. Stwierdzono, że w przypadku układów ergodycznych izolinie zmian odpowiadają zależności potęgowej pomiędzy czasem t a odległością d . W przypadku układów w których występuje lokalizacja Andersona zaobserwowano zależność wykładniczą. Podobne zachowanie uzyskano także w przypadku układów mogących wykazywać MBL, a podobieństwa są szczególnie wyraźnych w przypadku bardzo silnego nieporządku.

Ostatnia praca poświęcona jest klasyfikacji nietermicznych stanów własnych hamiltonianu PXP (tzw. blizn kwantowych) przy pomocy algorytmu wariacyjnego autoenkodera kwantowego. Entropia splątania wyznaczona dla takich stanów jest niższa niż w przypadku stanów termicznych. W modelu PXP znane były dwie rodziny blizn. Cechą charakterystyczną stanów należące do jednej rodziny jest duża projekcja na specyficzne stany bazowe, jednak własność ta nie pozwala w prosty sposób przeprowadzić klasyfikacji tych stanów. Pokazano, że klasyfikację taką można wykonać stosując wariacyjny autoenkoder, który kompresuje stan kwantowy. Blizny należące do jednej rodziny można skompresować stosując tę samą sekwencję bramek kwantowych. Blizny kwantowe testowane są więc parami, przy czym jeden ze stanów jest wykorzystywany do uczenia autoenkodera, którego działanie jest następnie sprawdzane a drugim ze stanów. Takie podejście pozwoliło zidentyfikować znane rodziny blizn kwantowych w modelu PXP oraz wyznaczyć nowe rodziny. W pracy podkreślono, że wyznaczona w ten sposób przynależność dwóch stanów do

jednej rodziny blizn jest relacją przechodnią. Nie jest dla mnie oczywiste czy przechodniość tej relacji jest obserwacją wynikającą z badania modelu PXP, czy też jest ona ogólniejszą własnością zastosowanego algorytmu. Pokazano także, że podobne podejście można wykorzystać do wyznaczenia niskowymiarowych podprzestrzeni niezmienniczych w modelach wykazujących fragmentację przestrzeni Hilberta.

Uważam, że rozprawa doktorska Pana mgr. Tomasza Szoldry spełnia wszystkie wymagania stawiane kandydatom w Ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i Nauce* (t.j. Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.) W szczególności rozprawę stanowi zbiór opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, w których zaprezentowano oryginalne rozwiązania kilku istotnych problemów naukowych związanych z dynamiką nieergodycznych układów kwantowych. Rozprawa prezentuje szeroką wiedzę kandydata w dyscyplinie oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Z tego powodu wnioskuję o przyjęcie recenzowanej rozprawy i dopuszczenie jej Autora do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Wnioskuję też o wyróżnienie recenzowanej rozprawy. Poniżej zamieszczam uzasadnienie tego wniosku.



Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pana mgr. Tomasza Szoldry

W mojej ocenie rozprawa doktorska Pana mgr. Tomasza Szoldry wnosi istotny wkład do fizyki nieergodycznych układów kwantowych. Przed przeczytaniem rozprawy dość sceptycznie oceniałem potencjalne korzyści wynikające z zastosowania uczenia maszynowego w tej części fizyki, jednak wyniki prezentowane w rozprawie skłoniły mnie do zmiany tej opinii. Pan Tomasz Szoldra wykorzystał uczenie maszynowe aby zidentyfikować ergodyczne podukłady występujące w nieergodycznym łańcuchu. Takie ergodyczne podukłady nie są precyzyjnie zdefiniowane, jednak odgrywają ważną rolę w fenomenologicznym opisie dynamiki badanych układów. Bez określenia, jaka część podukładu jest ergodyczna trudno byłoby zweryfikować znaczenie tzw. lawin kwantowych, które mogą decydować o stabilności lokalizacji wielociałowej. Rozprawę stanowi cykl czterech prac opublikowanych w *Phys. Rev. B* w latach 2021-2024, które w stosunkowo krótkim okresie czasu były cytowane 40 razy (wg. *Google scholar*) a jedna z prac została wyróżniona jako *Editor's suggestion*. Potwierdza to istotne znaczenie wyników naukowych Pana mgr. Tomasza Szoldry. Wprowadzenie do rozprawy napisane jest w sposób przejrzysty i precyzyjny wskazując na szeroką i dobrze ugruntowaną wiedzę Autora dotyczącą dynamiki układów kwantowych.

