

Kraków, dn. 22 sierpnia 2016 r.

dr hab. Przemysław Piekarczyk
Instytut Fizyki Jądrowej
Polskiej Akademii Nauk
ul. Radzikowskiego 152
31-342 Kraków

Recenzja pracy doktorskiej magistra Piotra Czarnika
pt. "TIME EVOLUTION OF QUANTUM TENSOR NETWORKS"
wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. Jacka Dziarmagi
na wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytetu Jagiellońskiego

Praca doktorska Pana magistra Piotra Czarnika dotyczy zastosowania sieci tensorowych do badania kwantowych stanów termicznych i przejść fazowych w układach dwuwymiarowych. Rozprawa doktorska składa się z sześciu rozdziałów. Pierwsza część wprowadza podstawowe informacje o sieciach tensorowych i definiuje najważniejsze pojęcia używane do ich opisu. W drugiej części opisane są nowe metody obliczeniowe zaproponowane w pracy doktorskiej. Trzecia część zawiera najważniejsze wyniki uzyskane w pracy doktorskiej, czwarta podsumowuje rozprawę. Rozdział piąty to spis literatury zawierający 28 publikacji. Ostatnia część zawiera pięć artykułów opublikowanych w Physical Review B w latach 2012 - 2016. We wszystkich pracach mgr Piotr Czarnik jest pierwszym autorem.

Kwantowe sieci tensorowe stosowane były dotychczas z dużym powodzeniem do opisu stanu podstawowego układów jednowymiarowych (matrix product states - MPS) i dwuwymiarowych (projected entangled pair states - PEPS). Stany kwantowe w skończonych temperaturach mogą być również reprezentowane przez sieci tensorowe, ale ścisły opis jest możliwy jedynie dla układów jednowymiarowych. Zastosowanie takiego podejścia do układów dwuwymiarowych jest znacznie trudniejsze i wymaga wypracowania odpowiednich metod przybliżonych, które umożliwiają w miarę dokładny opis układu, uwzględniając zachowanie krytyczne blisko przejścia fazowego. Zaproponowanie i opracowanie takich metod oraz zastosowanie ich do kilku modeli układów spinowych i fermionowych stanowi

najważniejsze osiągnięcie niniejszej rozprawy doktorskiej. W każdym przypadku do opisu stanów termicznych zastosowano rozszerzoną przestrzeń Hilberta, która oprócz stanów fizycznych zawiera stany pomocnicze (ancilla states). Układ w temperaturach skończonych opisywany jest przy pomocy operatora Gibbsa, który reprezentowany jest przez odpowiednio skonstruowaną trójwymiarową sieć tensorową. Wymiar tensorów zależy od ilości wiązań między danym węzłem sieci i najbliższymi sąsiadami i od wymiaru wiązań D . W pierwszych trzech pracach zaproponowano metodę, w której ewolucja stanu w funkcji odwrotności temperatury (czasu urojonego) rozłożona jest na kolejne małe kroki z wykorzystaniem dekompozycji Suzuki-Trottera. Głównym problemem jest podwajanie się wymiaru wiązań z każdym krokiem czasowym, co zwiększa rząd tensorów i prowadzi do eksponencjalnego wzrostu czasu obliczeniowego. Aby obliczenia były efektywne konieczna jest renormalizacja tensorów w każdym kroku i redukcja wymiaru wiązań do poprzedniej wartości. W pierwszej pracy z 2012, zaproponowano renormalizację tensorów przy pomocy izometrii, które redukują wymiar wiązań z $2D$ do D i zastosowano tę metodę do kwantowego modelu Isinga z poprzecznym polem magnetycznym. W przypadku klasycznym (bez zewnętrznego pola) pokazano, że wymiar wiązania $D=2$ jest wystarczający do otrzymania idealnej zgodności z dokładnym rozwiązaniem Onsagera. Również dla stanu kwantowego, otrzymano przejście fazowe i zachowanie krytyczne dla niewielkich wartości D . W drugiej pracy, zastosowano to samo podejście do bezspinowego modelu Hubbarda z międzywęzłowym oddziaływaniem przyciągającym. Metodę przetestowano dla układu bez oddziaływania i otrzymano bardzo dobrą zgodność z rozwiązaniem analitycznym. Dla silnego oddziaływania układ posiada ciągle przejście fazowe, które zostało poprawnie opisane w podejściu sieci tensorowych. Metoda obliczeniowa została udoskonalona w trzeciej pracy, gdzie wprowadzono i przetestowano dokładniejszą, samouzgodnioną procedurę optymalizacyjną.

W czwartej pracy zaproponowano wariacyjne podejście, które umożliwia renormalizację sieci tensorowej dla danej temperatury bez konieczności przechodzenia kolejnych kroków w ewolucji czasowej. Pokazano, że nowa procedura optymalizacji tensorów zastosowana do kwantowego modelu Isinga jest bardziej efektywna i daje dokładniejszy opis układu w obszarze krytycznym. Wyznaczono zależność parametru porządku i funkcji korelacji w obszarze krytycznym. W ostatniej pracy z 2016 roku, nową metodę wariacyjną zastosowano do zbadania izotropowego modelu kompasu i przejścia fazowego do niskotemperaturowej fazy nematyka. Wyznaczono temperaturę krytyczną w bardzo dobrej zgodności z poprzednimi badaniami oraz zbadano zależność parametru porządku i podatności od temperatury. W pracy doktorskiej przedstawiono dodatkowo nieopublikowane wyniki dla modelu Hubbarda, które

pokazały bardzo dobrą zgodność otrzymanej energii i wartości podwójnych obsadzeń z najlepszymi wynikami uzyskanymi metodami kwantowego Monte Carlo.

Wyniki zaprezentowane w pracy doktorskiej stanowią bardzo ważny wkład do badania kwantowych stanów układów elektronowych w skończonych temperaturach. W rozprawie doktorskiej zaprezentowano dwie metody renormalizacji sieci tensorowej i pokazano, że druga z nich, iteracyjna metoda wariacyjna jest dokładniejsza i bardziej efektywna. Przeprowadzone badania udowodniły, że zaproponowane podejście może być z sukcesem stosowane zarówno do sfrustrowanych układów spinowych, jak i układów fermionowych z silnymi korelacjami. Wydaje się, że głównym ograniczeniem metody jest rozmiar sieci i związany z tym problem wykonywaniem obliczeń dla niższych temperatur, w których obserwuje się wiele ciekawych faz w układach silnie skorelowanych. Nasuwa się tutaj pytanie, które elementy procedury renormalizacyjnej można jeszcze poprawić i zwiększyć efektywność obliczeń, zachowując ich dokładność?

Prezentacja wyników w rozprawie doktorskiej jest bardzo klarowna. Na szczególne wyróżnienie zasługuje graficzne przedstawienie sieci tensorowych i schematów procedury renormalizacyjnej. Zamieszczone rysunki dokładnie odzwierciedlają kolejne etapy obliczeń, co bardzo ułatwia zrozumienie złożonej metody wariacyjnej. Znalazłem tylko kilka drobnych błędów redakcyjnych, które nie wpływają na ocenę rozprawy. Prace nie są cytowane w takiej kolejności jak występują na liście publikacji i nie wszystkie prace z tej listy zostały zacytowane. Jest kilka drobnych błędów w języku angielskim i notacji matematycznej. W podsumowaniu jedno zdanie jest powtórzone.

W mojej opinii przedstawiona do oceny rozprawa doktorska obejmuje bardzo szeroki i dobrze opracowany materiał badawczy oraz stanowi znaczny wkład do badań teoretycznych nad własnościami termicznymi układów spinowych i silnie skorelowanych. Dlatego uważam, że rozprawa spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim i wnoszę do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego o dopuszczenie Pana magistra Piotra Czarnika do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

dr hab. Przemysław Piekarz



Wniosek o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Piotra Czarnika
pt. "Time evolution of quantum tensor networks"

Ponadto, wnoszę do Rady Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr Piotra Czarnika. Mój wniosek uzasadniam bardzo wysokim poziomem i szerokim zakresem badań przeprowadzonych w ramach pracy doktorskiej. O wysokim poziomie tych badań świadczy pięć bardzo dobrych artykułów opublikowanych w czasopiśmie Physical Review B. Szczególnie ważnym osiągnięciem jest zaproponowanie nowej metody wariacyjnej do renormalizacji sieci tensorowej, która daje możliwość efektywnego badania układów elektronowych w skończonych temperaturach. Przeprowadzone obliczenia pokazały, że metoda jest uniwersalna i może być stosować do sieciowych układów spinowych i silnie skorelowanych układów fermionowych, unikając problemów występujących w innych metodach (np. problem znaku w kwantowym Monte Carlo). Uważam, że Piotr Czarnik ma odpowiednie predyspozycje do pracy jako fizyk teoretyk, którą powinien kontynuować po otrzymaniu stopnia doktora nauk fizycznych.

dr hab. Przemysław Piekarz

