

Kraków, 20 lipca 2023

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Bartosza Rzepkowskiego pt.:
“Simulation of two-dimensional strongly correlated systems via
tree-like isometric tensor networks: From physical models to
quantum computers”**

Recenzowana rozprawa doktorska została wykonana w Instytucie Fizyki Teoretycznej Wydziału Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej, zaś jej promotorami są: Prof. dr hab. inż. Arkadiusz Wójs (PWr) oraz Dr. Gunnar Möller (Cavendish Laboratory, University of Cambridge, UK).

Tematem przewodnim rozprawy mgr. Bartosza Rzepkowskiego są poszukiwania wydajnych obliczeniowo metod przybliżonych, umożliwiających symulacje wybranych dwuwymiarowych układów spinowych opisanych hamiltonianami z niekomutującymi operatorami kwantowomechanicznymi, dla których rozwiązania ściśle (poza szczególnymi kombinacjami parametrów) nie są znane. Rozważane przez autora przykłady to anizotropowy model Heisenberga dla spinów $3/2$ na sieci typu plaster miodu (ang. *honeycomb lattice*) opisujący monowarstwę CrI_3 , w przypadku którego celem jest wyznaczenie diagramu fazowego, oraz struktura zawierająca losowe obwody kwantowe, rozważana w celu symulacji obliczeń kwantowych na komputerach klasycznych, co pozwala na szacowanie funkcji tzw. wierności (ang. *fidelity*), jedno- i wielokubitowej, dla założonych procedur obliczeniowych.

Rozprawa napisana jest w całości w języku angielskim i ma formę klasyczną, tj. zwartego tekstu podzielonego na sześć rozdziałów o łącznej objętości 102 stron, który

poprzedzony jest streszczeniami w języku angielskim i polskim, oraz spisami rysunków i tabel. Rozprawę zamyka spis literatury cytowanej liczący 122 pozycje.

Pracę otwiera zwięzłe wprowadzenie (2 strony), w którym doktorant przedstawia motywacje do podjęcia opisanych badań i omawia strukturę dalszych części tekstu. Niemal połowę objętości pracy stanowi liczący 45 stron Rozdział 2: *Isometric tensor networks in 1D*, w którym omówiono metody obliczeniowe oparte na sieciach tensorowych, zaczynając od diagramatycznej reprezentacji tensorów, metody numerycznej rozkładu według wartości osobliwych (ang. *singular value decomposition*), oraz idei stanów kwantowomechanicznych definiowanych iloczynami macierzy (ang. *matrix product states*). Stanowi to wprowadzenie niezbędne do — zawartego w tym samym rozdziale — omówienia metody decymacji bloków ewoluujących czasowo (ang. *Time Evolving Block Decimation* – TEBD) oraz grupy renormalizacji macierzy gęstości (ang. *Density Matrix Renormalization Group* – DMRG), wykorzystywanych do rozwiązywania wspomnianych wyżej problemów szczegółowych badanych numerycznie przez autora rozprawy. Rozdział zamyka omówienie sposobu wykorzystania zasady zachowania ładunku do redukcji czasu obliczeń w ramach wspomnianych metod oraz efektywnego mapowania układów dwuwymiarowych na jednowymiarowe, co umożliwia odwołanie do znanych z literatury algorytmów w badaniach nowych problemów. Kolejne dwa rozdziały rozprawy poświęcone są prezentacji wyników doktoranta dla układu spinów $3/2$ oraz symulacji obwodów kwantowych. Rozdział 5: *Isometric tensor networks in 2D*, wprowadza pojęcie izometrycznych sieci tensorowych (ang. *Isometric Tensor Networks* – isoTNS) i omawia algorytmy operujące na tej klasie struktur algebraicznych. Dalej, wprowadzone zostają dwie modyfikacje podstawowego formalizmu (isoTNS) oraz wspomnianych metod, z których pierwsza umożliwia przesunięcie całej tzw. przestrzeni ortogonalności do wnętrza układu, znacząco zmniejszając wymiary tensorów przechowywanych w pamięci komputera w trakcie obliczeń, druga zaś sprowadza się do modyfikacji przepływu entropii splątania przez układ, efektywnie przekształcając jego w strukturę w strukturę drzewiastą. Na koniec pokazano, w jaki sposób algorytm z opisanymi modyfikacjami można zastosować do symulacji działania obwodów kwantowych (zawierających, w przykładach symulowanych przez autora, do 25 kubitów) o dwuwymiarowej strukturze sprzężeń pomiędzy kubitami.

Niewątpliwie, opisane szczegółowo ulepszenia istniejących algorytmów, w połączeniu z oryginalnymi wynikami dotyczącymi diagramu fazowego monowarstwowego CrI_3 oraz symulacji obwodów kwantowych stanowią osiągnięcia

naukowe odpowiednie do nadania stopnia doktora. Praca została starannie zredagowana a skomplikowane wywody zapisano w sposób uporządkowany; tekst ilustrują także bardzo dobrze przygotowane rysunki. Lektura pracy nie pozostawia wątpliwości, że autor dogłębnie zna stosowane techniki obliczeniowe; uznanie należy się także z uwagi na sprawne zastosowanie tychże metod do rozwiązywania aktualnych i ważnych problemów naukowych z dwóch, stosunkowo odległych od siebie, dziedzin: tzw. "twardej" fizyki materii skondensowanej oraz problemów związanych z symulowaniem działania komputerów kwantowych na komputerach klasycznych.

Wśród dokumentów przysłanych mi wraz z rozprawą znalazła się lista artykułów naukowych, których współautorem jest doktorant. Po uaktualnieniu, lista zawiera trzy pozycje: pierwsza praca, opublikowana w 2021 roku w czasopiśmie *Quantum Information Processing* (B. Rzepkowski, K. Roszak, *A scheme for direct detection of qubit–environment entanglement generated during qubit pure dephasing*) dotyczy oddziaływania kubitu ze środowiskiem i utraty koherencji, jest zatem stosunkowo odległa od tematyki recenzowanej rozprawy. Pozostałe dwie prace, opublikowane w 2023 roku, to artykuł w czasopiśmie *Physica E* (B. Rzepkowski, M. Kupczyński, P. Potasz, A. Wójs, *DMRG and Monte Carlo studies of CrI3 magnetic phases and the phase transition*) cytowany w spisie literatury jako pozycja [59] oraz artykuł w *Physical Review A* (B. Rzepkowski, K. Roszak, *Signature of quantumness in pure decoherence control*). Widzimy zatem, że doktorant posiada dorobek publikacyjny, który można uznać za typowy dla osoby obiegającej się o stopień naukowy doktora w zakresie fizyki teoretycznej.

W podsumowaniu uważam, że przedłożona mi do oceny rozprawa spełnia wszelkie ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim, zaś doktorant posiada osiągnięcia naukowe, udokumentowane w szczególności publikacjami w bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych. Wnoszę zatem o dopuszczenie mgr. Bartosza Rzepkowskiego do dalszych etapów postępowania doktorskiego.



Prof. Adam Rycerz

