Prof. dr hab. Maciej M. Maśka
Katedra Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska

Katowice, 14.01.2022

Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr. Anny Francuz p.t.:

"Determining topological order with tensor networks"

Recenzowana rozprawa doktorska łączy w sobie bardzo aktualne zagadnienie topologicznych własności materii z nowoczesną techniką obliczeniową, jaką jest metoda sieci tensorowych. Jest to metoda o tyle ciekawa, że jako jedna z niewielu może być skutecznie zastosowana do badania kwantowych układów, w których oddziaływania powodują, że do ich opisu nie wystarcza landauowska teoria cieczy Fermiego. Z kolei własności topologiczne materii są trudne do uchwycenia z powodu braku możliwości ich opisu przy pomocy lokalnych wielkości. Choć jedno z pierwszych zdań rozprawy, mówiące, że sieci tensorowe wydają się być jedyną numeryczną metodą oferującą taki opis, jest nieco na wyrost, to trzeba przyznać, że jest to metoda dobrze dopasowana do badania topologii układów.

Recenzowana rozprawa jest cyklem trzech artykułów opublikowanych w latach 2020-21 w Physical Review B, co jest jedną z możliwości oferowanych przez ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym. Składają się na nią następujące publikacje:

1. Anna Francuz, Jacek Dziarmaga, Guifre Vidal, Lukasz Cincio, *„Determining topological order from infinite projected entangled pair states"*, Phys. Rev. B **101**, 041108(R) (2020)
2. Anna Francuz, Jacek Dziarmaga, *„Determining non-Abelian topological order from infinite projected entangled pair states"*, Phys. Rev. B **102**, 235112 (2020)
3. Anna Francuz, Laurens Lootens, Frank Verstraete, Jacek Dziarmaga,

„Variational methods for characterizing matrix product operator symmetries", Phys. Rev. B **104**, 195152 (2021)

Jak widać z powyższego zestawienia, doktorantka jest pierwszym autorem wszystkich prac i wszystkie one zostały napisane są we współpracy z promotorem, prof. Jackiem Dziarmagą.

Publikacje uzupełnione są 37-stronicowym wprowadzeniem w zagadnienia i metody, którym powyższe artykuły są poświęcone. W szczególności wprowadzenie to zawiera rozdział poświęcony stanom topologicznie nietrywialnym, w którym omawiane są zagadnienia takie jak związek topologii z dalekozasięgowym splątaniem, statystyka anyonów i jej związek z macierzami modularnymi *S* i *T* czy formalizm *string-nets* oraz *fusion category.* Drugi zasadniczy rozdział wprowadzenia dotyczy sieci tensorowych. Zaprezentowane tam zostało jak przy ich pomocy opisać funkcję falową stanu podstawowego czy nisko leżących stanów i jak przeprowadzić procedurę optymalizacji tej reprezentacji. Omówione zostały tam także role splątania oraz symetrii w używanym podejściu. Wreszcie zostało tam przedstawione jak sieci tensorowe mogą być użyte do opisu stanów topologicznych. Wprowadzenie to zawiera mieszaninę dobrze ugruntowanej wiedzy z dotychczasowych publikacji czy nawet podręczników z oryginalnymi wynikami doktorantki. Z punktu widzenia typowego czytelnika jest to bardzo dobre zestawienie aktualnego stanu wiedzy, natomiast recenzentowi bardziej przydałby się przewodnik pokazujący globalne spojrzenie na całość dorobku doktorantki lub choćby wyraźne wydzielenie jej oryginalnych wyników. Oczywiście sprawdzając umieszczone w tekście liczne odwołania do bibliografii można stosunkowo łatwo ten dorobek wydzielić. Ponadto, ta część nie podlega ocenie, więc powyższe uwagi należy potraktować jako zupełnie poboczne.

Jak już wyżej zostało stwierdzone, na rozprawę składają się trzy publikacje. W pierwszej z nich, *„Determining topological order from infinite projected entangled pair states"*, doktorantka proponuje użycie iPEPS (*infinite projected entangled pair state*) rozpoznawania stanu topologicznego silnie skorelowanego dwuwymiarowego układu. Wykorzystywane są do tego celu macierze *S* i *T* wyliczone z pojedynczego iPEPS.

W pracy zademonstrowano wyższość tej metody nad „tradycyjnym” podejściem opartym o metodę grupy renormalizacyjnej macierzy gęstości (DMRG). DMRG jest podejściem, które bardzo efektywnie działa w przypadku układów jednowymiarowych, natomiast identyfikacja faz topologicznych wymaga obliczeń dla układów o skończonej szerokości. W takiej sytuacji złożoność obliczeniowa bardzo szybko rośnie wraz ze wzrostem szerokości, uniemożliwiając zastosowanie tego podejścia do układów, w których długość korelacji przekracza parę stałych sieci. Jak pokazano w pracy, użycie iPEPS pozwala znacząco złagodzić to ograniczenie. Zostało to w praktyce zademonstrowane poprzez użycie proponowanego podejścia do analizy fazy kodu torycznego realizowanej w *string-net model* z zaburzeniem oraz w modelu Kiteva na sieci typu plastra miodu. Możliwość przeprowadzenia obliczeń w pobliżu punktu krytycznego potwierdza, że metoda ta jest efektywna nawet dla dużych długości korelacji.

Zaproponowane podejście jest w drugiej z prac, „*Determining non-Abelian topological order from infinite projected entangled pair states*”, rozszerzone na przypadek nieabelowy. Także w tym przypadku macierze S i T posłużyły do charakteryzacji faz topologicznych. Rozszerzenie to zostało zilustrowane poprzez porównanie użycia proponowanej w pracy metody na przykładzie abelowego kodu torycznego oraz nieabelowych modeli *string-net* Fibonacciego i Isinga. Wyliczono także topologiczną entropię splątania, a w jednym z dodatków także pokazano że jest ona nietrywialna dla modelu Kitaeva w zewnętrznym polu magnetycznym.

Trzecia z prac składających się na rozprawę, *„Variational methods for characterizing matrix product operator symmetries”*, jest kolejnym krokiem w kierunku generalizacji zaproponowanego podejścia do charakteryzacji stanów topologicznych. Podobnie jak w dwóch wcześniejszych pracach punktem wyjścia jest iPEPS i symetrie, których składanie definiuje reguły fuzji anyonów. W tym przypadku jednak klasyfikacja faz topologicznych odbywa się w ramach teorii kategorii, a konkretnie struktur matematycznych zwanych *fusion categories*. Do opisu fuzji anyonów, a więc i do charakteryzacji porządku topologicznego, używane są tzw. symbole F. Także w tym podejściu wyznaczone zostały macierze topologiczne S i T. Skuteczność metody została zademonstrowana poprzez jej zastosowanie do modeli używanych w dwóch wcześniejszych pracach, a dodatkowo także do paru nowych. Okazało się, że w niektórych przypadkach metoda daje o rząd wielkości dokładniejsze wyniki. Nie jest natomiast dla mnie jasny zakres jej stosowalności, jako że w podsumowaniu pracy autorzy stwierdzają, że dokładne wyniki otrzymują dla stanów z długością korelacji do 2.3, podczas gdy w pierwszej z prac była mowa o długości korelacji około 25.

Doktorantka rozwiązała w swoich pracach trudny i ambitny problem obliczeniowy, dzięki czemu stanowią one oryginalny i wartościowy wkład w rozwój metod badania własności topologicznych silnie skorelownych układów wielociałowych z wykorzystaniem sieci tensorowych. I nie dochodząc jeszcze do końcowych konkluzji już można bez wątpliwości stwierdzić, że złożona z nich rozprawa spełnia wymagania stawiane pracom doktorskim. Niemniej jednak prace napisane są bardzo precyzyjnym i matematycznie zaawansowanym językiem, co z jednej strony jest narzucone przez charakter przeprowadzonych badań, z drugiej niestety powoduje ich pewną hermetyczność. Załączone wprowadzenie ułatwia poruszanie się w tej trudnej materii, ale w dalszym ciągu dla czytelnika niebędącego ekspertem w tej szczególnej tematyce pozostaje pewien niedosyt wynikający z trudności ulokowania badań doktorantki w pełnym obrazie topologii układów fizycznych. Ponieważ we wprowadzeniu doktorantka posługuje się zupełnie ogólnymi sformułowaniami dotyczącymi topologii, można odnieść wrażenie, że metody oparte na sieciach tensorowych są jedynymi technikami obliczeniowymi pozwalającymi badać własności topologiczne, a macierze S i T, ładunek centralny czy symbole F są jedynymi wielkościami potrafiącymi scharakteryzować stan topologiczny. Tymczasem w wielu podręcznikach topologii, włącznie z tymi dotyczącymi topologii w fizyce, macierze S i T czy symbole F w ogóle nie pojawiają się. Pojawiają się za to na przykład krzywizna Berry’ego czy niezmienniki topologiczne. Podobnie stany topologiczne to nie tylko (kwantowe) ciecze spinowe, bo przecież w modelu Su-Schrieffer’a–Heeger’a czy w łańcuchu Kitaeva mamy do czynienia z *bezspinowymi* cząstkami. To oczywiście nie są zarzuty w stosunku do publikacji składających się na rozprawę, a raczej do braku ulokowania prowadzonych badań w szerszym obrazie topologii układów fizycznych. Takie ulokowanie, które mogłoby być zawarte we wprowadzeniu, z jednej strony ułatwiłoby czytelnikowi spojrzenie na uzyskane wyniki z odpowiedniej perspektywy, a z drugiej wskazałoby na szerokie horyzonty doktorantki. Rozumiem, że rozprawa poświęcona jest wyłącznie topologii układów oddziałujących, ale pewniew warto było to wspomnieć na samym jej początku.

Dlatego też chciałbym spytać o relację pomiędzy prowadzonymi badaniami, a bardziej „tradycyjnym" podejściem do topologii. Chodzi głównie o to, że znane są silnie skorelowane układy topologiczne (np. *f*-elektronowe izolatory topologiczne czy izolatory Cherna na skręconej dwuwarstwie grafenowej). Czy stany topologiczne tych układów można by próbować scharakteryzować wykorzystując zaproponowaną metodę? W większości nie są to układy dwuwymiarowe, ale może są szanse na uogólnienie podejścia na więcej wymiarów? I bardziej ogólnie, chciałbym spytać do jakich fizycznych (realnych) układów – prócz wspomnianych w pracy układów hallowskich – można by proponowane podejście użyć?

Na początku rozdziału 3. wprowadzenia doktorantka pisze, że sieci tensorowe dają najlepszy wariacyjny stan podstawowy modeli takich jak *t-J* czy model Hubbarda. Parę lat temu Carleo i Troyer pokazali, że sieci neuronowe dają stan o niższej energii (Science 355, 602 (2017), np. Fig. 3). Czy postęp w sieciach tensorowych w ostatnich latach sprawił, że one znów dają najlepszy wynik?

Jak już wspomniałem, wytknięcie braku szerszego kontekstu badań doktorantki absolutnie nie jest zarzutem w stosunku to prac składających się na rozprawę. Jest ono raczej wyrazem frustracji wywołanej bardzo silnym rozczłonkowaniem nawet stosunkowo wąskich obszarów badawczych i bardzo hermetycznego ich rozwoju. Podręczniki „tradycyjnej" topologii nie wspominają o macierzach S i T czy symbolach F, a te, które koncentrują się na sieciach tensorowych czy dalekozasięgowym splątaniu topologicznym zapominają o niezmiennikach topologicznych czy dziesięcioelementowej „tablicy okresowej" stanów topologicznych. A przecież mimo że w wielu przypadkach oddziaływania niszczą pewne metody klasyfikacji, to często można skonstruować adiabatyczną ścieżkę łączącą te dwa reżimy.

Pomijając część powyższych dywagacji i koncentrując się na zaprezentowanych wynikach, z pełnym przekonaniem stwierdzam, że Pani mgr Anny Francuz wykonała ogromną pracę opracowując metodę (a w zasadzie kilka metod) klasyfikacji stanów topologicznych oddziałujących układów w oparciu o iPEPS, że otrzymane wyniki są ważne i wartościowe i wnoszą znaczący wkład w rozwój metod obliczeniowych. Tym samym stwierdzam, że jej rozprawa doktorska w pełni spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim w *Ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym*, jednocześnie wnosząc o dopuszczenie doktorantki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Maciej Maśka