

ВІДГУК

**офіційного опонента Крячка Євгена Сергійовича
на дисертацію Ракова Михайла Володимировича
“ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
КВАНТОВИХ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ
З ВИКОРИСТАННЯМ ТЕНЗОРНИХ МЕРЕЖ”,
представленої на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук
зі спеціальності 01.04.02 – теоретична фізика**

Дві останні декади, що межують з міленіумом - перша з яких завершила двадцяте століття, друга розпочала двадцять перше - були ознаменовані парадигматичним зсувом всередині квантово-інформаційної спільноти до більш масштабних задач – з багатьма модами і фотонами, - які можуть бути вирішені на менш універсальних комп'ютерах, що вимагають менше ресурсів і можуть бути побудовані з використанням сучасних технологій. Ці задачі з необхідністю привели до нових класичних комп'ютерних підходів поза стандартним фазово-просторовим формулюванням квантової механіки. Такою є мова станів тензорних мереж, яка стала потужним теоретичним підходом, що дозволяє достатньо ефективно представляти нетривіальні квантові стани, операції та вирішувати різноманітні оптимізаційні проблеми: основна серед останніх – наближене знаходження енергії основного стану. По суті, це є іншим формулюванням квантово-механічного варіаційного принципу, який, з одного боку, застосовується до реальних систем на нано-, мікро- та мезорівнях, а з іншого – лежить в основі створення різних моделей квантових багаточастинкових систем, які широко використовуються в фізиці твердого тіла і характеризуються заданими параметрами на оптичних ґратках.

Дисертаційна робота Ракова Михайла Володимировича саме присвячена розробці методів чисельного моделювання квантових багаточастинкових систем, що ґрунтуються на методі тензорних мереж, та їх вдосконаленню.

Я почну свій відгук з деякої полеміки, а вже потім говоритиму щось більш змістовне.

Метою цієї дисертаційної роботи Ракова М. В. є, по-перше, розробка швидкісних чисельних методів для розрахунку одновимірних систем в геометрії кільця; по-друге, отримати значення одно- і дво-частинкових мір заплутаності для власних станів квантової системи в XXZ моделі [щодо вибраної моделі та демонстрації її актуальності я хотів би процитувати зовсім недавню роботу P. Baselhaç, S. Belliard, *Non-Abelian symmetries of the half-infinite XXZ spin chain*. Nucl. Phys. B **916**, 373-385 (2017)] частинок зі спіном $1/2$ з різними значеннями проекції спіну в ферромагнітній фазі, яка, в принципі, повністю діагоналізується в Бете-анзатці [L. Thomas, *Ground state representation of the infinite one-dimensional Heisenberg ferromagnet*. I. J. Math. Anal. Appl. **59**, 392-414 (1977)]; та, по-третє, чисельно отримати енергії чотирьох-пяти найнижчих мультиплетів білінійно-біквдратної моделі Гайзенберга (ББГ) зі спіном 1 за відсутності білінійного члена взаємодії в усьому інтервалі значень параметра анізотропії. Тема такого дослідження безумовно є актуальною водночас з фундаментальної та прикладної точок зору.

Я згадую, що коли мене попросили опонувати дану дисертацію, я був дещо сконфужений, якщо не збентежений: яке я маю відношення до мереж, які в мене спершу асоціювались як чисто транспортні; де я, а де транспорт? Вже потім, прочитавши вступ, я зрозумів, що все, що в дисертації має відношення до транспорту, - а воно в основному вміщається в її назву – це данина моді, моді на квантові комп'ютерні технології. В цілому

і по суті, - це я теж почерпнув зі вступу – дана дисертація присвячена варіаційній проблемі в квантовій теорії багатьох тіл. По суті, побудові правильної пробної хвильової функції, що автору дисертації вдалося, незважаючи на наявну множину анзаців, яких багато у вступі: я нарахував там 10 додаткових скорочень (FQH, BEC, BCS, BH, PSE, SCF, QIT, PEPS, MERA, TTN), які не ввійшли в список скорочень, що складається з сімнадцяти.

Але мова не про це. А про те, що в дисертаційній роботі, в її вступі, на мій погляд, відсутній деякий зв'язок епох: основний варіаційний анзац роботи – це MPS, що означає матрично-добутковий стан; стан, який описується матричним добутком, який є найбільш загальним класом квантових станів, а саме – станів тензорних мереж [див., наприклад, недавні оглядові статті: 1. F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac, *Adv. Phys.* **57**, 143 (2008); 2. J.I. Cirac and F. Verstraete, *J. Phys. A: Math.Theor.* **42**, 504004 (2009); 3. J. Eisert, *Modeling and Simulation* **3**, 520 (2013); 4. R. Orús, *Ann. Phys.* **349**, 117158 (2014)], а по суті є не що інше, як анзац Хартрі (або хартрієвський добуток) або Хартрі-Фока, або, більш загально, анзац антисиметризованих геміальних (двохчастинкових) добутків (АГП). Тим не менше, це зрозуміло, оскільки дисертація присвячена бозе-системам, що досліджуються в наступних розділах. Масштабність і глибина дисертаційних досліджень Ракова Михайла Володимировича вражає.

Зміст дисертації Ракова М. В. викладено у вигляді рукопису, - англійською, що також вражає: я маю на увазі не англійську саму по собі – вона-то якраз залишає бажати кращого, - який складається із вступу, трьох розділів, висновків, додатка та переліку використаних джерел. Загальний обсяг роботи – 182 с. Вона містить 34 рисунки, 14 таблиць, а перелік першоджерел налічує 157 найменувань.

У **вступі** підкреслено актуальність та доцільність теми досліджень та сформульовано мету, предмет і методи досліджень, наукову новизну і наукову та практичну цінність одержаних результатів, надано відомості про апробацію роботи й особистий внесок автора. **Вступ** дає стислий огляд сучасних теоретичних методів досліджень спінових одновимірних квантових моделей в геометрії кільця, обґрунтовує необхідність вдосконалення варіаційного чисельного методу ренорм-групи матриці густини з використанням матрично-добуткових станів (МДС), та аналізує вже наявні результати щодо фазової структури та властивостей заплутаності XXZ моделі частинок зі спином 1/2 та моделі ББГ зі спином 1 за наявності однойонної анізотропії (квадратичного ефекту Зеємана) з параметром анізотропії D.

У **першому розділі** дисертації викладено короткий огляд відомих чисельних методів, які використовуються та вдосконалюються в дисертації, введено поняття трансферних матриць, та пояснюється представлення варіаційних матрично-добуткових станів та гамільтоніанів у формі матрично-добуткових операторів (МДО). Це, так би мовити, додатковий розділ.

Другий розділ присвячено розробці вдосконалених чисельних методів в рамках МДС з періодичними крайовими умовами. Він поділений на три наступних підрозділи. В підрозділі 2.1 розробляється метод розрахунку одновимірних систем зі 100 і більше частинок та описуються підходи пришвидшеного розрахунку скороченого розкладу добутку великої кількості трансферних матриць за сингулярними числами, та обчислення матриць для задачі на власні значення.

В наступному підрозділі автор розробляє метод утворення U(1)-симетричного власного МДС для періодичних крайових умов, який у випадку спінової системи має визначену проекцію спіну S_z . Цей метод дозволяє описати МДС резонного розміру (розмір МДС $m \leq 60$) і розрахувати на практиці навіть стан з великою заплутаністю. В підрозділі 2.3 дисертант розробляє спосіб утворення SU(2)-симетричного власного МДС для періодичних крайових умов та виводить, за допомогою використання тільки зведених

тензорів, формулу для розрахунку спостережуваної величини $SU(2)$ -інваріантного оператора.

Третій розділ «Результати» є найбільшим за обсягом - 46 сторінок, шість підрозділів, - який присвячено розрахункам фізичних характеристик двох квантових моделей: XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ та моделі ББГ зі спіном 1 . Перша - це структура заплутаності в феромагнітній фазі, де Бете-анзатц не працює; друга - це межі димерної фази; зокрема, наявність п'ятої фази на фазовій діаграмі моделі за відсутності анізотропії, яка досі не підтвержена і не спростована чисельними розрахунками в інших роботах.

Перший підрозділ «Загальні міркування» проводить аналіз властивостей двох вище згаданих моделей, використовуючи алгоритми, запропоновані в другому розділі. Ключовими тут виступають наступні три параметри: (i) розмір МДС m ; (ii) число сингулярних значень в розкладі трансфер-матриць p і p' ; (iii) кількість ітерацій, що забезпечують збіжність.

Основна мета *другого і третього підрозділів* - перевірка розроблених чисельних методів для описання властивостей зазначених квантових моделей. Для цього досить ретельно проведено порівняння відомих значень енергій цих моделей та їхніх інших відомих характеристик. Так, наприклад, для XXZ моделі зі спіном $1/2$ при $\Delta > -1$ порівняння охоплює значення енергії, чергової намагніченості та z - z -корелятора, які відомі в рамках Бете-анзатцу. Точність чисельного методу вражаюча: 10^{-4} ! Приблизно така сама точність, $< 2 \cdot 10^{-4}$, для моделі ББГ.

Четвертий підрозділ досліджує межі фази димеризації моделі ББГ з квадратичним ефектом Зеємана, що характеризується існуванням двох вироджених синглетів. Отримано ці межі: так, при $D < D'$ лінія $\theta = -\pi/2$ розмежовує критичну фазу та фазу Нееля - димеризація при цьому залишається ненульовою. *П'ятий підрозділ* аналізує збіжність трьох вдосконалених чисельних методів. **Третій розділ** завершує *шостий підрозділ*, який досліджує універсальність факту швидкого спадання сингулярних чисел добутків трансферних матриць для алгоритму з i без $U(1)$ -симетрії. Цікавим є приклад використання моделі ББГ зі спіном 1 , де сингулярні числа можуть спадати на 4-6 порядків повільніше у випадку з $U(1)$ -симетрією, що змусило автора припустити, що швидке спадання насправді зумовлене наявністю неперервної симетрії гамільтоніана, яка априорі не була врахована в конструкції власних станів.

Висновки узагальнено представляють матеріали дослідження і стисло подають основні результати.

В цілому слід вважати, що отримані автором результати є важливими для розуміння властивостей станів одновимірних квантових систем, які описують поведінку одновимірних магнітних кристалів на основі перехідних металів та одновимірних ультраохолодних газів лужних металів. Крім того, дисертант, по-перше, розробив алгоритм пришвидшеного розрахунку власних станів систем з великою кількістю частинок та перевіряв його універсальність, та по-друге, визначив характеристики заплутаності XXZ моделі в феромагнітній фазі за допомогою розробленого в дисертації алгоритму для використання симетричних МДС як варіаційних станів в системах з геометрією кільця.

Результати дисертаційної роботи містять новизну і представляють наукову цінність. Найважливішим практичним результатом дисертації слід вважати широке застосування модифікованих теоретичних методів та наближень варіаційного методу з використанням тензорної мережі - матрично-добуткових станів з періодичними крайовими умовами - для вивчення властивостей одновимірних магнітних кристалів на основі перехідних металів та одновимірних ультраохолодних газів лужних металів. Значно більшу практичну цінність представлені чисельні методи обіцяють для опису широкого класу раніше не досліджених одновимірних квантових систем.

До недоліків та прогалин дисертаційної роботи Ракова М.В. можна вказати на наступні:

1. Вже згадана вище велика кількість скорочень, які не ввійшли в список скорочень.
2. Можна було б дати невеличкий огляд особливостей розробки чисельних алгоритмів.
3. Очевидно, варто було однаково визначити параметр анізотропії: або як Δ (як в 2. на стор.2 автореферата), або як D , в 4. там же.

Проте, перелічені недоліки зовсім не мають принципового значення та не впливають на високу оцінку основних результатів дисертації М. В. Ракова.

Загалом, дисертаційна робота Ракова М.В. може бути оцінена як високоякісне дослідження в області теоретичної фізики багаточастинкових систем з виходом до широкого практичного застосування. Результати цього дослідження є взаємоузгодженими і взаємодоповнюючими та слугують додатковим аргументом на користь якості і достовірності отриманих даних. В результаті виконаної дисертаційної роботи теоретично та практично розвинуто наукову проблему адекватного опису одновимірних квантових систем.

Кількість публікацій за темою дисертації є достатньою як за кількістю – 8, так і за якістю – 5 журнальних статей та 3 - у працях конференцій.

Основні результати дисертації опубліковані у фахових наукових журналах. Частина робіт вже отримала міжнародне визнання: так, згідно з Google Scholar, робота [1] (за авторефератом), опублікована в Українському фізичному журналі в 2013 році, цитувалась 8 разів як препринт arXiv'у; [3] - 5 разів; [2] - 4 рази; і [4], що датується 2017-м роком - 1 раз. Дві з них, [3] і [2], вийшли в 2016-му, що, звісно, говорить про їхню наукову цінність, значимість і актуальність. Автореферат дисертації повністю відображає її зміст.

Можна з упевненістю стверджувати, що дисертація Ракова М.В. за обсягом виконаних досліджень, наукової і практичної цінності отриманих результатів, відповідає та задовільняє усім вимогам ДАК України щодо кандидатських дисертацій за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, а її автор Раков Михайло Володимирович, безумовно, заслуговує, за рівнем кваліфікації та рівнем виконаних досліджень, присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Провідний науковий співробітник
Інституту теоретичної фізики
ім. М.М. Боголюбова НАН України,
доктор фіз.-мат. наук

Крячко

Крячко Є.С.

Підпис Крячка Є.С. засвідчую:

Вчений секретар Інституту теоретичної фізики
ім. М.М. Боголюбова НАН України,
канд. фіз.-мат. наук



Перепелиця

Перепелиця С.М.