



**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Gerardo Suáreza
p.t. *Open Quantum Systems Beyond the Markovian Regime***

Rozprawę doktorską mgr. Gerardo Suáreza, przygotowaną pod opieką prof. dr. hab. Michała Horodeckiego, stanowi praca pisemna o charakterze monografii, której treść oparta jest częściowo na opublikowanych wcześniej artykułach naukowych. Tematyka rozprawy należy do ważnego aktualnie obszaru kwantowej teorii układów otwartych, a głównym jej wątkiem jest opracowanie, implementacja i ocena metod umożliwiających numeryczny, a w niektórych przypadkach również analityczny, opis dynamiki takich układów, a w szczególności efektów wykraczających poza przybliżenie Markowa.

Pierwsze dwie części pracy, stanowiące łącznie ponad połowę jej objętości, stanowi wprowadzenie w podstawowe pojęcia mechaniki kwantowej wykorzystywane w dalszej części tekstu (Część I) oraz bardzo obszerny przegląd wybranych metod opisu dynamiki kwantowego układu otwartego, zarówno przybliżonych, jak i „numerycznie dokładnych”, czyli zbieżnych w jakiś w miarę kontrolowany i dostatecznie szybki sposób do rozwiązania dokładnego (Część II). Ten fragment pracy zawiera pewne elementy oryginalne: wkład autora w opracowanie metod aproksymacji gęstości spektralnych (co skutkuje znaczącym przyspieszeniem symulacji) oraz wyprowadzenia równania Redfielda i równania kumulantowego z funkcjonatu wpływu Feynmana-Vernona, a także drobniejsze usprawnienia pod kątem symulacji, jak w rozdz. 7.2. Części I i II napisane są z bardzo praktycznej perspektywy i zwracają do efektywnej numerycznej implementacji prezentowanych metod, co uważam za zaletę. Doktorant jest współautorem procedur do symulacji dynamiki układów otwartych, które wchodzi w skład dość powszechnie używanego pakietu QuTiP. Jest to znaczące osiągnięcie o potencjalnie dużym wpływie na rozwój tego obszaru wiedzy, ale ma ten negatywny skutek uboczny, że niektóre fragmenty omawianej części rozprawy pisane są w stylu podręcznika do oprogramowania, a nie tekstu naukowego, z którego dałoby się prześledzić rozumowanie – tzn. raczej w celu zdefiniowania i udokumentowania niż wytłumaczenia czegośkolwiek. Dotyczy to w największym stopniu właśnie najbardziej oryginalnego (i dla fizyka zapewne najciekawszego) rozdziału o aproksymacji (rozdz. 1.6), którego ogólnikowość kontrastuje z przesadną szczegółowością prezentacji niektórych zagadnień z pierwszego kursu mechaniki kwantowej, jak np. obraz oddziaływania. Przeważnie jednak wyjaśnienia są kompletne, a ich zwartość bardzo mi się podoba. Zaletą tej przeglądowej części tekstu jest też adekwatnie dobrana literatura.

Tak szerokie, systematyczne i zasadniczo poprawne ujęcie metod zarówno fizycznych, jak i – w niezbędnym zakresie – matematycznych i numerycznych, wydaje się niezmiernie pożyteczne, tym bardziej, że doktorant porządkuje nie tylko notację i nazewnictwo, ale



też pewne pojęcia i podejścia. Mogłoby to czynić z rozprawy mgr. Gerardo Suáreza znakomity tekst wprowadzający w tematykę, gdyby nie jeden poważny feler tego tekstu: jego redakcja jest niestety daleka od ideału. Zbyt wiele tu urwanych albo niegramatycznych zdań, nielogicznej interpunkcji (zwłaszcza w zdaniach obejmujących eksponowane równania), niezdefiniowanych wielkości w równaniach, niepoprawnie oznaczonych argumentów funkcji pod całkami i niespójności w notacji. Pojawiają się błędy i pomyłki drobne, ale też merytorycznie nieco poważniejsze, a nawet mylące komentarze pomiędzy równaniami, które utrudniają śledzenie wyводу. W niektórych miejscach brakuje precyzji w dość istotnych sformułowaniach bądź fizycznej interpretacji czy też uzasadnienia stwierdzeń lub założeń podanych w sposób bardzo formalny – przykładem jest np. zastąpienie przeszłego stanu rezerwuaru stanem aktualnym w toku wyprowadzenia równania Redfielda (powyżej równania 6.12). Podobnie formalnie wprowadzona jest transformacja wprowadzająca współrzedną reaktywną w rozdziale 10 i nie jest jasne, czy wybór wyróżnionego stopnia swobody jest dla danego układu jedyny, czy też jest tu jakaś dowolność pozwalająca być może na optymalizację. Również na końcu tego rozdziału miałem poczucie, że na kilka zasadniczych pytań nie znalazłem odpowiedzi: Jaka jest korzyść z tej operacji? Czy np. nowy rezerwuár jest sprzężony słabiej, ma prostszą strukturę albo jest bliższy markowskiemu? Definicja pracy i ciepła na początku rozdziału 11 także mogłaby zostać uzasadniona od strony fizycznej. Nie rozumiem też, dlaczego ograniczenie dyskusji do konkretnego układu w rozdz. 10.3 nie ogranicza ogólności. Wykaz zauważonych błędów dołączam na końcu recenzji po części na poparcie swoich uwag, głównie jednak w nadziei, że uda mi się pomóc w poprawieniu redakcyjnej jakości tego skądinąd wartościowego tekstu.

Część III rozprawy zawiera oryginalne wyniki dotyczące stanu stacjonarnego układu otwartego. Jest to istotne zagadnienie w teorii kwantowych układów otwartych, którego zapewne nie da się „rozwiązać”, niemniej mgr Gerardo Suárez uzyskał tu ciekawe rezultaty przyczyniające się do lepszego zrozumienia tego aspektu teorii, podając w ogólnej postaci wyniki, które dotąd znane były jedynie dla szczególnych modeli. Centralnym punktem rozdziału (i powiązanej z nim publikacji) jest ogólne, jednolite ujęcie stanu równowagi układu otwartego w języku Hamiltonianu średniej siły (*mean-force Hamiltonian*) w granicy słabego sprzężenia oraz ogólna charakterystyka efektywnego hamiltonianu odtworzonego ze stanu stacjonarnego różnych równań ewolucji układu otwartego, co pozwala porównać ze sobą te dwa rodzaje poprawek do stanu równowagi, a także zestawzić wyniki uzyskane z różnych przybliżonych metod opisu układu otwartego i ocenić ich dokładność.

W części IV mgr Gerardo Suárez stosuje zaproponowane bądź zaprezentowane wcześniej metody do symulacji dynamiki standardowych modeli układu otwartego: spinowo-bozonowego i Caldeiry–Leggetta. W tej części wyróżnia się rozdział 16 dotyczący transportu ciepła i zawierający oryginalny i istotny wynik: nie da się poprawnie opisać transportu ciepła w początkowej fazie ewolucji bez uwzględnienia poprawek Lamba i to poza przybliżeniem Markowa, jako że istotne są ich składowe niekomutujące z hamiltonianem



układu. Rozdziały 14 i 15 poświęcone są badaniu modelu spinowo-bozonowego o różnej strukturze sprzężeń z rezerwuarem. Część wyników dotyczy wariantów modelu (gęstości widmowych), które nie były analizowane wcześniej. Znaczącym rezultatem są tu względnie proste analityczne formuły opisujące równanie kumulantowe dla tego modelu. Wnioski dotyczące stosowalności i wiarygodności różnych metod w poszczególnych zakresach parametrów uważam za ważne. Doktorant wykazał tu, w szczególności, że niemarkowskie równania fundamentalne (Master) dają poprawne wyniki dla silnie strukturyzowanych rezerwuarów, oczywiście w granicach ich stosowalności. W rozdziale 17 doktorant dowodzi stosowalności i dobrej dokładności równań kumulantowych w przypadku modelu C–L zarówno standardowego, jak i rozszerzonego o nieliniowość typu Kerra. Wskazuje przy tym, że przybliżone podejście kumulantowe jest numerycznie znacznie mniej kosztowne od numerycznie dokładnej metody hierarchicznych równań ruchu. Spektakularny jest zysk na szybkości obliczeń wynikający z aproksymacji wykładniczej gęstości widmowych, w którą doktorant wniósł swój oryginalny wkład. W rozdziałach 14, 15 i 17 nie dostrzegam nowych wyników fizycznych, jednak przedstawiona tu analiza metodologiczna jest cenna, ponieważ kompromis pomiędzy dokładnością a kosztem obliczeniowym metod numerycznych jest centralnym problemem praktycznym w modelowaniu kwantowych układów otwartych.

Części III i IV nie są wolne od usterek, o których pisałem wcześniej, a niektóre wymieniam w załączniku. Ponadto bardzo źle opisane są tu rysunki prezentujące wyniki: ich podpisy nie zawierają informacji, co dany rysunek przedstawia ani jakie są istotne cechy symulacji (np. wartości parametrów), które ma ilustrować. Skrajnym przykładem są rys. 15.3 i 15.4, których podpisy w ogóle nie odnoszą się do zawartości wykresów. Skąpa informacja na rys. 15.3 wydaje mi się wręcz niespójna z tekstem, gdzie wspomniana jest niewystępująca na rysunkach stała sprzężenia. Nawet obszerne podpisy, jak rys. 15.7 i 15.10, nie zawierają kluczowych informacji definiujących, co powoduje, że te dwa różne rysunki mają praktycznie identyczne podpisy, mimo że są różne, bo odnoszą się do różnych modeli (trzeba odszukać odwołania w tekście, żeby się o tym dowiedzieć). Wydaje mi się też, że czytelność tej części bardzo by wzrosła, gdyby każdy rozdział zaczynał się od wprowadzenia definiującego jego główne cele i wyniki, najlepiej z wyraźnym podziałem na oryginalne i literaturowe (w tym uzyskane przy współudziale autora rozprawy).

W moim przekonaniu rozprawa doktorska mgr. Gerardo Suáreza dowodzi bardzo dobrej wiedzy teoretycznej dotyczącej szerokiej gamy metod badania dynamiki kwantowych układów otwartych. Wysoko oceniam wkład doktoranta w rozwój powszechnie dostępnych bibliotek do symulacji numerycznych, co potwierdza jego biegłość w tworzeniu kodu do symulacji komputerowych. Wyniki prezentowane w rozprawie stanowią oryginalne rozwiązania cząstkowych problemów naukowych zarówno o charakterze poznawczym (stan ustalony układu otwartego), jak i praktycznym (efektywna implementacja symulacji numerycznych), co stanowi istotny wkład w poznanie własności dynamicznych kwantowych układów otwartych oraz w rozwój metod ich badania.



Instytut Fizyki Teoretycznej

Choć zakres przedstawionej rozprawy, jej ciekawa koncepcja, a także uzyskane rezultaty wskazują na kompetencje doktoranta do prowadzenia pracy badawczej, to jakość redakcyjna tekstu rodzi wątpliwości co do jego pełnej samodzielności jako naukowca. Z tego względu na obecnym etapie nie mogę stwierdzić, że rozprawa mgr. Gerardo Suáreza spełnia warunki określone w art. 187 ust. 1–3 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, a w szczególności dowodzi umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Ponadto, biorąc pod uwagę obszerność rozprawy, jej wartość merytoryczną i dydaktyczną, ilość włożonej pracy, a nawet estetykę rysunków ilustrujących podstawowe koncepcje, mogłaby ona stanowić cenne wprowadzenie w temat, lecz nagromadzenie różnego rodzaju błędów i pomyłek czyni ją w znacznie mniejszym stopniu użyteczną. Jestem przekonany, że względnie niedużym wysiłkiem można doprowadzić do sytuacji, w którym wprowadzona do obiegu publicznego rozprawa będzie spełniała wszelkie naukowe standardy, również pod względem redakcyjnym.

Dlatego też, działając w oparciu o §29 ust. 4 Procedury nadania stopnia naukowego doktora w Uniwersytecie Gdańskim (uchwała Senatu UG nr 12/23 ze zm.) stawiam wniosek o poprawę rozprawy w zakresie warstwy redakcyjnej tekstu.

Prof. Paweł Machnikowski

Paweł Machnikowski



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Załącznik: wykaz dostrzeżonych błędów i pomyłek redakcyjnych

(bez gwarancji kompletności i pomijający błędy czysto językowe)

Niezdefiniowane wielkości w równaniach:

S w (1.7);

H w (1.87);

n_n w (9.2)-(9.3) (zbieżność indeksu z oznaczeniem rozkładu Bosego też niezbyt szczęśliwa);

w_k w (10.1);

Z po lewej stronie (15.4) (co czyni to równanie zupełnie bezużytecznym);

Hamiltonian (16.1)-(16.2) jest nieobjaśniony, występujące w nim symbole są niezdefiniowane, a notacja jest niespójna z rys. 16.1.

Niespójności w notacji:

τ_B z rozdz. 6.4 to chyba to samo, co τ_C z rozdz. 6.3;

w równaniu (8.14) suma rozdzielona jest na składniku m , a nie n ;

nie jest jasne, jak stosować notację wprowadzoną w (8.29) w przypadku $n = n'$;

γ_n w równaniu (9.2)-(9.3) wydaje się być tym samym, co Γ_n w (9.10).

Błędy i pomyłki drobne w równaniach:

nadmiarowe g_k w (1.9), skoro jest już w (1.7);

w (2.8) powinno być $U(t', t_0)$

iteracja całek w (5.76) powinna się kończyć na t_{2n} , a nie na t_4 ;

w (7.6) brakuje całki po t_4 ;

w (7.23) pominięto gęstość widmową J ;

w (7.47) w wykładnikach pod całkami nie powinno pojawiać się t (zapewne $t_1 - t_2$);

indeksy nie zgadzają się po prawej i lewej stronie (10.8);

w (13.7) ślad w liczniku powinien zapewne być tylko po stopniach swobody rezerwuaru;

w (17.19) brak elementu całkowania dt pod całką, a na końcu argument powinien być t .

Błędy merytorycznie nieco poważniejsze:

gęstość widmowa (1.93) nie jest omowa dla s różnego od 1;

na s. 19 mianowana wielkość znacznie większa do zera („ $T \gg 0$ ”) – nasuwa się pytanie, co naprawdę jest charakterystycznym parametrem, z którym należy tę temperaturę porównać; na s. 46 założenie 4 chyba wynika z silniejszego od niego założenia 3.

na rys. 7.1d logarytm odchylenia od wartości dokładnej nie jest błędem względnym, a podane wartości same w sobie są bez sensu, gdyż jest to wielkość mianowana, a więc logarytm zależy od wyboru jednostki;

Mylące komentarze pomiędzy równaniami, które utrudniają śledzenie wywodu:



Politechnika Wrocławska

Instytut Fizyki Teoretycznej

reguła Leibniza zastosowana jest dopiero w równaniu (8.24), a nie w (8.20);
w równaniu (8.27)-(8.28) chyba po prostu podstawia się W , więc poprzedzający to równanie komentarz jest mylący.

Brak precyzji w dość istotnych sformułowaniach:

przypis 1 na s. 46: chodzi chyba o operatory kreacji/anihilacji modów rezerwuaru, bo układ może być np. spinowy;

pierwsze zdanie drugiego akapitu rozdziału 9 jest prawdą tylko dla rezerwuarów gaussowskich;

w tekście pod równaniem (16.4): szczelina zapewne pojawia się w widmie, a nie w hamiltonianie.

Równania (17.8-9) są dokładną kopią (17.2-3), wywód się zapętla.

Równanie (17.28) powtarza (17.27), przy czym nagle od tego momentu zmienia się oznaczenie gęstości widmowej.

Podwójna numeracja w jednym równaniu: 8.27-8.28, 9.2-9.3, 16.1-16.2.

Rysunki:

Brak opisu osi na rys. 15. 4.

Na rys, 16.4 dla paneli a i b podano tę samą wartość parametru.

Czytanie pracy bardzo utrudnia zbyt mała czcionka użyta na wykresach.

Na wielu rysunkach w opisie osi jest log, a na osi są wyjściowe wartości a nie ich logarytmy (czyli wykładniki) – oczywiście są to wykresy w skali logarytmicznej, a nie wykresy logarytmów tych wielkości.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wrocławska

Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Instytut Fizyki Teoretycznej

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

T: +48 71 320 25 79

wppt.ift@pwr.edu.pl
www.ift.pwr.edu.pl
www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Nr konta:

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434