

dr hab. inż. Łukasz Paweła
Instytut Informatyki
Teoretycznej i Stosowanej PAN
ul. Bałtycka 5, 44-100 Gliwice

Gliwice, 11 maja 2022 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej mgra Palasha Pandya „Application of chosen optimization algorithms for recognition of nonclassical effects”

Uwagi wstępne

Forma drukowana recenzowanej rozprawy obejmuje 116 stron. Praca jest napisana w języku angielskim i zawiera: • wykaz artykułów naukowych, na podstawie których rozprawa została przygotowana, • 5 rozdziałów, • podsumowanie, • załącznik **A**, zawierający wprowadzenie macierzy Pauliego oraz Gell-Manna, • wykaz literatury.

Tytuł pracy oddaje jej zawartość, a przyjęty układ pracy jest właściwy. Praca zawiera dwa podejścia do analizy zjawisk nielokalnych. Pierwsze jest numeryczne, oparte o algorytm Gilberta, natomiast drugie jest analityczne, oparte o nierówności Bella.

Pierwszy rozdział pracy wprowadza czytelnika w podstawowe pojęcia wykorzystywane w dalszej części rozprawy. W drugim rozdziale Autor wprowadza kluczowy element części numerycznej pracy, algorytm Gilberta. W trzecim rozdziale zaprezentowane zostało wykorzystanie tego algorytmu do problemu znajdowania najbliższego stanu separowalnego. W czwartym rozdziale Autor wykorzystuje algorytm Gilberta i wyniki w poprzednim rozdziale w konstrukcji świadków splątania.

Rozdział piąty zawiera wyniki analityczne dotyczące samo-testowania splątania wielocząstkowego. W odróżnieniu od poprzednich wyników, prezentowane w tym rozdziale mają charakter analityczny. Ostatni rozdział zawiera podsumowanie zaprezentowanych wyników oraz omówienie płynących z nich wniosków.

Praca zawiera wyniki opublikowane wcześniej przez Autora w formie artykułów naukowych:

- [1] P. Pandya, O. Sakarya, M. Wieśniak, Hilbert-Schmidt distance and entanglement witnessing, *Physical Review A* 102, 012409 (2020).
- [2] M. Wieśniak, P. Pandya, O. Sakarya, B. Woloncewicz, Distance between Bound Entangled States from Unextendible Product Bases and Separable States, *Quantum Reports* 2(1), 49–56 (2020).

W formie artykułów naukowych złożonych do publikacji:

- [3] E. Panwar, P. Pandya, M. Wieśniak, An elegant proof of self-testing for multipartite Bell inequalities, arXiv:2202.06908 (2022).

Przedmiot rozprawy

Pierwszy rozdział skupia się na wprowadzeniu podstawowych pojęć związanych ze splątaniem kwantowym. Niestety, ta część pracy sprawia wrażenie napisanej na przędkę „opowieści o splątaniu”. Już w początkowych zdaniach możemy przeczytać kategorię stwierdzenie, że znalezienie algorytmu o wielomianowej złożoności dla rozwiązywania problemów NP-trudnych jest niemożliwe. Jest to nadużycie. Faktycznie, nawet jeśli $P = NP$, nie oznacza to automatycznie, że dla problemów NP-trudnych istnieją algorytmy wielomianowe. Nie można jednak stwierdzić, że one nie istnieją. W tej chwili po prostu nie wiemy.

Następnie Doktorant przechodzi do omówienia kryteriów separowalności. Pierwszym z nich jest częściowa transpozycja. Następnie następuje wzmianka o odwzorowaniach dodatnich i całkowicie dodatnich. Na początku strony Autor stwierdza, słusznie, że stan PPT nie musi być separowalny, następnie w części poświęconej odwzorowaniom pojawia się stwierdzenie o stanach „PPT, a zatem separowalnych”. Proszę o wyjaśnienie w trakcie obrony. Kolejnym stwierdzeniem, w tej samej części tekstu, wymagającym wyjaśnienia jest dyskusja dotycząca odwzorowań dodatnich i całkowicie dodatnich. W niej Autor stwierdza, że odwzorowania dodatnie mają dodatnie spektrum, a całkowicie dodatnie ściśle dodatnie. O jakim spektrum mowa? Proszę o wyjaśnienie, tym bardziej że pojęcie całkowitej dodatniości jest związane z rozszerzaniem odwzorowań.

Następnie pojawia się dyskusja o miarach splątania. Te sekcje wydają się nadmiarowe w kontekście całej pracy. Jako że dysertacja opiera się na odległościach Hilberta-Schmidta, wystarczyłaby tylko część odnosząca się do tej wielkości.

W rozdziale drugim znajdujemy szczegółowe omówienie algorytmu Gilberta wraz z jego adaptacją do celu znajdowania stanu separowalnego najbliższego danemu stanowi ρ . Sekcja jest poprawnie napisana, kluczowe wielkości są dobrze

opisane. Dodatkowo pewne intuicje za rozważaniami są zilustrowane za pomocą licznych rysunków. W celu przyspieszenia obliczeń, Autor pewien etap algorytmu Gilberta zastępuje próbkowaniem losowych stanów kwantowych oraz sprawdzeniem czy mają szansę poprawienia wyniku. Jeśli tak, przechodzi do kolejnych kroków, jeśli nie następuje ponowne losowanie. Podejście, szczególnie w dzisiejszych czasach, kiedy możemy szybko wylosować wielką liczbę stanów ma spore plusy. Jednakże, w miarę zbiegania algorytmu, będziemy odrzucać coraz więcej stanów. Czy Doktorant przeprowadzał jakąś analizę, opartą o teorię macierzy losowych, ile takich odrzuceń nastąpi w miarę zbiegania do rozwiązania?

Największym mankamentem tego i następnych rozdziałów, opierających się na obliczeniach numerycznych, jest brak załączonego kodu. W tego typu pracach, silnie opartych na obliczeniach numerycznych, kod stanowi integralną część publikacji. Jego brak można porównać do pominięcia dowodu twierdzeń. Co więcej, oprócz samego kodu źródłowego, przyjęło się udostępniać skrypty umożliwiające jego uruchomienie oraz reprodukcję wyników. W przypadku programów wymagających próbkowania liczb pseudolosowych ustawia się też stan początkowy generatora na z góry znane parametry.

Na moją prośbę, Doktorant udostępnił kod źródłowy w serwisie GitHub. Nie stanowi on integralnej części pracy, więc jego analiza nie ma wpływu na ocenę końcową, chciałbym jednak przekazać garść swoich uwag. Po pierwsze dokumentacja uruchomienia i interpretacji zwracanych wyników jest niejasna. Po drugie format danych wejścia/wyjścia jest niestandardowy. Dlaczego Doktorant nie zdecydował się na jakiś ugruntowany format jak HDF albo chociaż CSV?

Parametry przekazywane do programu przyjęło się przekazywać za pomocą jakiegoś parsera argumentów, nie bezpośrednio odczytując zmienną `argv`. Tutaj rodzi to dodatkowy problem, ponieważ zmiana nazwy pliku wyjściowego, ze względu na sposób jej wczytywania, bardzo łatwo prowadzi do naruszenia ochrony pamięci, a w konsekwencji do przedwczesnego zamknięcia programu.

Sam wybór jako silnika numerycznego GNU Scientific Library też budzi zdziwienie. Obecnie mamy dostępnych wiele ugruntowanych bibliotek numerycznych w innych językach, które są łatwiejsze w użyciu tak dla programisty, jak i dla potencjalnego użytkownika naszych wyników, nie tracąc wydajności. Najpopularniejszym w chwili obecnej wydaje się język Python z jego całym otoczeniem numerycznym oraz możliwością wykorzystania technologii *just-in-time compilation*.

Największe zdziwienie budzi wybrany przez Doktoranta sposób próbkowania liczb pseudolosowych z rozkładu normalnego. W tekście dysertacji opisywany jest algorytm Boxa-Mullera, a jego użycie jest potwierdzone w udostępnionym kodzie źródłowym. Jaka była motywacja za użyciem tego algorytmu zamiast dostarczanego przez biblioteki numeryczne? Bardzo proszę o wyjaśnienie tego wyboru.

W trzecim rozdziale Doktorant przedstawia wyniki uzyskane przy zastosowa-

niu zaproponowanego algorytmu. Początek rozdziału poświęcony jest problemowi tempa zbieżności algorytmu. W tej części, rysunek 3.2 zdaje się sugerować eksponencyjny wzrost liczby koniecznych do wylosowania stanów kwantowych wraz z kolejnymi iteracjami algorytmu. Czy tak jest faktycznie?

Następnie Autor przechodzi do sprawdzenia działania algorytmu na przykładach o znanych rozwiązaniach, otrzymując zadowalające wyniki. Po tej części następuje analiza stanów separowalnych najbliższych stanom W . Bardzo interesujący wydaje się otrzymany wynik tej analizy rysunek 3.4. Widzimy tam, że rysunek 3.4a pojawia się jako bloki diagonalne rysunku 3.4b, rysunek 3.4b jako bloki diagonalne rysunku 3.4c. Czy w ten sposób możemy konstruować najbliższe stany separowalne do stanów W dla dowolnego wymiaru?

Kolejna część rozdziału trzeciego poświęcona jest badaniu bi-separowalności w układach złożonych. Wynikiem tej analizy jest rysunek 3.6 prezentujące bardzo ciekawy szkic przekroju stanów trójkubitowych.

W rozdziale czwartym Doktorant wykorzystuje wyniki poprzedniego rozdziału oraz twierdzenie Bertlmana-Nernhofera-Thirringa do konstrukcji świadków splątania. W tym celu algorytm wymagał pewnej modyfikacji, aby znaleziona płaszczyzna nie przecinała zbioru stanów separowalnych. Ogólne podejście do badań jest podobne jak w poprzednim rozdziale, najpierw przeprowadzona została analiza dla przypadków, gdy optymalni świadkowie splątania są znani, następnie Doktorant przeszedł do analizy stanów W . W tej części, na stronie 72, pojawia się zdanie o użyciu metody optymalizacyjnej dla problemu z 6 parametrami. Proszę o wyjaśnienie, jaka metoda została użyta. Można się domyślać, że jakaś gradientowa, ale nie jest to jasne. A jeśli tak faktycznie było, to która?

Dalsza część rozdziału skupia się na wykorzystaniu zaproponowanych metod do badania stanów PPT, które mimo to są splątane. Doktorant przedstawia metodę konstrukcji świadków splątania dla tych stanów.

Piąty rozdział ma zupełnie inny charakter niż poprzedni, ponieważ zawiera wyniki czysto analityczne. W tym rozdziale Autor opracował nową technikę pozwalającą na uzyskanie stwierdzeń samo-testujących dla liniowych i, co ważniejsze, kwadratowych nierówności Bella. Zaprezentowane podejście można zastosować w najogólniejszym przypadku dowolnych układów wymiarowych o dowolnej liczbie podukładów i nie opiera się na żadnych założeniach poza tym, że wszystkie uczestniczące podsystemy są rozdzielone przestrzennie.

Uwagi techniczne niewypływające na część merytoryczną

W przedstawionej pracy pojawiają się miejsca, gdzie można znaleźć niedociągnięcia formalne, przykładowo:

- Na stronach 3 oraz 4 pojawiają się przestrzenie Hilberta zapisywane jako \mathcal{H}_d oraz \mathcal{H}_{AB} , gdzie d oznacza wymiar przestrzeni, A, B oznaczają podsystemy. Niestety ta notacja nie jest konsystentna.
- Na stronie 4 pojawia się stwierdzenie, że maksymalna liczba składników kombinacji wypukłej tworzącej stan mieszany wynosi $\dim(\mathcal{H}_{AB})^2$. Jednak wcześniej stany na całej przestrzeni są rozważane jako czyste. Proszę o wyjaśnienie.
- Na stronie 5 we wzorze (1.4) pojawia się definicja częściowej transpozycji poprzez notację czteroindeksową. Nie jest jasne, które indeksy odnoszą się do których systemów.
- Na stronie 5 pojawia się wzór $\mathbb{1} \otimes T_B$. Sugeruje to rozszerzenie częściowej transpozycji o operację identycznościową, podczas gdy z kontekstu wynika, że wzór powinien brzmieć $T_B = \mathbb{1} \otimes T$.
- Na stronie 7 we wzorze (1.6) zdefiniowana jest operacja *reshuffling*. Znowu niejasna jest notacja czteroindeksowa.
- We wzorze (1.7) pojawia się Λ_{con} . Proszę o definicję.
- Na stronie 14 w sekcji 1.5.1 pojawia się wielkość $\dim(\mathcal{H})^2$ bez wyjaśnienia jaka to przestrzeń.
- We wzorze (1.27) pojawiają się wielkości p_i^2 natomiast na marginesie na stronie 15 pojawia się $\sum_i p_i = 1$. Wtedy wielkość we wzorze (1.27) ma ślad mniejszy niż jeden. Proszę o wyjaśnienie.
- We wzorze (3.1) granice sumowanie są niepoprawne, górna powinna wynosić $d - 1$.
- Przy dyskusji o stanach Wernera brakuje odniesienia do literatury.
- Na stronie 48 następuje zmiana notacji częściowej transpozycji.
- Rysunek 4.3 ma nieopisane osie, proszę zaprezentować wersję z opisami.

Ocena końcowa i wnioski

Rozprawa doktorska mgra Palasha Pandya pt.: „*Application of chosen optimization algorithms for recognition of nonclassical effects*” dotyczy ważnego zarówno poznawczo, jak i aplikacyjnie problemu oraz stanowi wartościowe osiągnięcie naukowe Autora.

Dysertacja stanowi istotny wkład mgra Palasha Pandya w rozwój dyscypliny naukowej – nauki fizyczne. Przeprowadzone przez Doktoranta analizy pokazują, że Autor posiada wiedzę teoretyczną oraz zacięcie programistyczne do przeprowadzania analiz numerycznych. Dodatkowo rozdział zawierający wyniki dotyczące samo-testowania pokazuje, że Autor potrafi przeprowadzić dowody twierdzeń matematycznych zachowując odpowiedni rygor.

Pomimo uwag podniesionych w tej recenzji, uważam że przedstawiona rozprawa spełnia wymogi ustawowe stawiane pracom doktorskim w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne. Wnoszę o przyjęcie jej przez Radę Dyscypliny Nauki fizyczne Uniwersytetu Gdańskiego oraz o dopuszczenie do publicznej obrony.

dr hab. inż. Łukasz Paweła