

Recenzja Rozprawy Doktorskiej mgra Mateusza Ostaszewskiego
Application of machine learning in quantum computer science
Wykorzystanie uczenia maszynowego w informatyce kwantowej

Przedmiotem recenzji jest wyżej wymieniona rozprawa doktorska mgra inż. Mateusza Ostaszewskiego. Promotorem rozprawy jest dr hab. Jarosław Adam Miszczak, a promotorem pomocniczym dr Przemysław Sadowski. Przewód doktorski jest prowadzony przez Radę Naukową Instytutu Informatyki Teoretycznej i Stosowanej PAN w Gliwicach. Recenzja została opracowana na prośbę Zastępcy Dyrektora Instytutu ds. Naukowych dr hab. Jarosława Miszczaka (pismo RN-0003-01/2010).

Współczesna informatyka znajduje się w przededniu rewolucji w sposobie realizacji algorytmów o dużym stopniu złożoności. Nowe platformy obliczeniowe oparte na systemach kwantowych, staną się już w niedalekiej przyszłości katalizatorem niezwykłych przemian w różnorodnych dziedzinach nauki i techniki wymagających coraz większych mocy obliczeniowych. Głównym problemem w rozwoju informatyki kwantowej są jednak ograniczenia fizyczne, które skutkują powstawaniem błędów w wykonywaniu algorytmów opartych na zasadach mechaniki kwantowej. Opracowane już liczne architektury komputerów kwantowych zakładają ich pracę w środowisku odizolowanym od wpływu zakłóceń zewnętrznych, co jednak nie jest w pełni możliwe. Dlatego wyłoniła się potrzeba stosowania mechanizmów korekcyjnych, pozwalających na realizację obliczeń w rzeczywistych układach fizycznych.

Zasady przetwarzania kwantowego zostały opracowane już w latach osiemdziesiątych ubiegłego wieku, ale mimo upływu kilkudziesięciu lat, w dalszym ciągu nie pokonano trudności związanych z koniecznością stworzenia bardzo specyficznych warunków, które pozwalają zminimalizować wpływ błędów przetwarzania. Ogromny wprost wzrost wydajności systemów kwantowych okupiony jest skomplikowanym procesem zabezpieczania funkcjonowania maszyny kwantowej.

Tematem rozprawy doktorskiej jest opracowanie algorytmów umożliwiających optymalny dobór parametrów sterujących ewolucją dynamiki systemu kwantowego. W rozprawie skupiono się na wykorzystaniu metod uczenia maszynowego do ekstrakcji impulsów sterujących umożliwiających doprowadzenie systemu kwantowego do pożądanego stanu. Poddano także analizie systemy typu Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ), w których niezwykle istotne

jest zapewnienie korekcji błędów, będących wynikiem procesów zakłócających stany elementów systemu kwantowego. W pracy skupiono się na klasyczno-kwantowym algorytmie Variational Quantum Eigensolver (VQE) i wykazano, że zaproponowane algorytmy optymalizacyjne mogą z powodzeniem zostać zastosowane w procesach chemii kwantowej. Tematyka rozprawy jest niezwykle aktualna i bardzo dobrze wpisuje się we współczesne trendy badawcze.

Autor rozprawy postawił dwie hipotezy badawcze:

1. *Techniki uczenia maszynowego mogą zapewnić wydajne metody generowania kwantowych impulsów kontrolnych dla dowolnych operacji unitarnych.*

2. *Okresowa struktura funkcji celu optymalizacji może być wykorzystana do przyspieszenia procedury optymalizacji w algorytmie VQE.*

Przedłożona do recenzji rozprawa liczy w sumie 100 stron. Została ona przygotowana w języku angielskim i opatrzona wstępem w języku polskim. Rozprawa została podzielona na sześć rozdziałów. Towarzyszy jej także spis publikacji, których autor jest współautorem, zawiera podziękowania i kończy się spisem cytowanych w rozprawie prac. Rozprawa jest przygotowana z dużą starannością. Język rozprawy jest dojrzały, rysunki i wykresy zostały przygotowane z dużą dbałością. Widoczne jest duże doświadczenie autora w przygotowywaniu publikacji naukowych. Spis cytowanych publikacji zawiera najistotniejsze prace z zakresu tematyki rozprawy, co świadczy o bardzo dobrej orientacji autora dysertacji w bogatej literaturze tematu. Wykorzystanie cytowanych źródeł jest poprawne, a wnioski z analizy wyciągane są i formułowane w prawidłowy sposób.

Dysertacja rozpoczyna się streszczeniem, w którym autor formułuje swoje tezy badawcze i omawia pokrótce treść poszczególnych rozdziałów. Rozdział pierwszy stanowi wprowadzenie do tematyki rozprawy. Autor analizuje obecny stan rozwoju informatyki kwantowej i wskazuje na osiągnięty w ostatnim okresie duży postęp badawczy. Przedstawia także szczegółowo dwie tezy rozprawy oraz omawia kolejno rozdziały rozprawy. Wskazuje przy tym, że wyniki badawcze przedstawione w rozdziałach 3-5 zostały opublikowane w kolejnych artykułach:

M. Ostaszewski, J.A. Miszczak, L. Banchi, P. Sadowski, *Approximation of quantum control correction scheme using deep neural networks*, Quantum Information Processing, 18(5), (2019) 126.

M. Ostaszewski, J.A. Miszczak, P. Sadowski, *Geometrical versus time-series representation of data in learning quantum control*, (2018). arXiv:1803.05169

M. Ostaszewski, E. Grant, M. Benedetti, *Quantum circuit structure learning*, (2019), arXiv:1905.09692

Rozdział drugi stanowi zwięzłe wprowadzenie do tematyki obliczeń kwantowych. Autor formułuje standardową notację i podaje podstawowe definicje. Przedstawia także formuły określające ewolucję stanu kwantowego oraz proces przeprowadzania pomiaru. Wprowadzone zostały także systemy wielokubitowe, podano postać macierzy Pauliego i przedstawiono koncepcję operacji sterujących. Przedstawiono także model obwodów kwantowych. Wiele uwagi poświęcono na kluczową dla rozprawy kwestię modelu sterowania systemem kwantowym, wprowadzając odpowiedni aparat formalny oraz skupiając się na wykorzystywanej w rozprawie mierze jakości procesu sterowania, określonej poprzez miarę podobieństwa pomiędzy dwoma superoperatorami. W rozdziale tym przedstawiono także wykorzystywane w rozprawie metody

uczenia maszynowego (k-means oraz kNN) a także przedstawiono strukturę rekurencyjnej sieci neuronowej typu Long Short-Term Memory (LSTM).

W rozdziale trzecim poddano analizie powiązanie pomiędzy impulsami kontroli kwantowej w niezakłócanym przypadku idealnym, a pulsami sterującymi w obecności niepożądanego dryftu układu. W rozdziale tym wykazano, że klasa sieci neuronowych (LSTM) umożliwia modelowanie systemu korekcji przeciwstawiającego się szkodliwym efektom związanym z niepożądaną trajektorią systemu kwantowego.

W następnym rozdziale rozszerzono zastosowanie sieci LSTM do celów sterowania procesem kwantowym. W celu poprawy jakości systemu sterowania wykorzystano dwie standardowe metody klasteryzacji k-means i kNN. Szczegółowe wyniki eksperymentalne potwierdziły hipotezę, że wykorzystanie struktury geometrycznej impulsów sterujących pozwala na osiągnięcie wysokiej wierności zaimplementowanej ewolucji stanów kwantowych. Zademonstrowano także, że rekurencyjne sieci neuronowe stanowią skuteczne narzędzie do generowania impulsów sterujących w układach o zmiennej sile kontaminacji. W rozdziale tym wykazano także, że w pewnych zagadnieniach kontroli kwantowej, klasyczne algorytmy uczenia maszynowego zapewniają wysoką skuteczność w tłumieniu niepożądanych zakłóceń.

W rozdziale piątym poddano analizie funkcję kosztu problemu VQE i zaproponowano szybkie algorytmy optymalizacyjne Rotoselect i Rotosolve, które cechują się wysoką efektywnością w przypadku obecności znaczących zakłóceń. Na podkreślenie zasługuje zaimplementowanie tych algorytmów w pakiecie Penny Lane, co świadczy o docenieniu autora rozprawy przez środowisko informatyków kwantowych. W rozdziale tym wykazano, że opracowane metody mogą zostać zastosowane w zagadnieniach chemii kwantowej, w symulacji stanów podstawowych wodoru litu i znajdowania stanu podstawowego gazu wodorowego.

Rozdział szósty stanowi podsumowanie rozprawy. Autor przedstawił swoje główne osiągnięcia i krótko nakreślił kierunek przyszłych badań.

Praca jest napisana bardzo starannie. Liczba drobnych literówek jest bardzo niska. Autor rozprawy dysponuje już dużym doświadczeniem w prowadzeniu badań naukowych, co potwierdza struktura i kształt rozprawy jak i duża liczba artykułów, których jest on współautorem.

Podczas zapoznawania się z treścią rozprawy Recenzentowi nasunęło się kilka uwag o charakterze dyskusyjnym i nieco krytycznym, które jednakże nie wpływają w żadnym istotnym stopniu na ogólną pozytywną ocenę rozprawy.

1. Autor we wstępie stwierdza, że *„Wyniki przedstawione w tej rozprawie można streścić w dwóch hipotezach”*, *„The results presented in this dissertation can be summarized by two hypotheses”*. Zdaniem recenzenta, hipotezy badawcze powinny być stawiane przed przeprowadzeniem właściwych badań, a nie po ich zakończeniu. Wynikiem rozprawy powinno być wykazanie prawdziwości (konfirmacja) lub falsyfikacja wcześniej postawionych hipotez. Oczywiście pokłosiem przeprowadzonych badań mogą być nowe hipotezy, które są siłą napędową wszelkich dociekań naukowych.

2. W rozdziale trzecim wykorzystano algorytm Gradient Ascent Pulse Engineering (GRAPE), który jest obecnie jedną ze standardowych metod optymalizacji stanu kwantowego. Jednakże nie przedstawiono nawet w ogólnym zarysie mechanizmu jego działania. Ponieważ w rozprawie przedstawiono dość szczegółowo bardzo popularne algorytmy, warto byłoby także omówić krótko GRAPE. W rozprawie nie omówiono także sposobu generowania macierzy unitarnych Haara, odsyłając czytelnika do odpowiedniej strony internetowej przygotowanej przez autora rozprawy. Podobnie nie przedstawiono pakietu QuTiP ani nie wskazano z jakich konkretnie funkcji korzystano. Zdaniem recenzenta, takie skrótowe potraktowanie kwestii implementacyjnych jest akceptowalne w publikacjach konferencyjnych lub w czasopiśmie, w których konieczna zwięzłość nie pozwala na podawanie szczegółowych informacji, natomiast nie powinno mieć miejsca w dysertacji, w której brak jest takich ograniczeń, a zewnętrzna implementacja koncepcji przedstawionych przez autora rozprawy jest przez to utrudniona, pomimo udostępnienia końcowego kodu źródłowego.
3. W rozprawie nie poświęcono dostatecznej uwagi analizie wykresów przedstawiających cztery histogramy (Fig. 3.4). Pojawia się tam indeks 31. Można się domyślać, że to indeks przedziału czasowego, ale takie detale są istotne i nie powinny być pozostawiane dociekaniom czytelnika. W rysunku 3.5, także nie zaznaczono, że slotów czasowych jest 30. Skala na osi poziomej jest niefortunnie oznaczona i ponownie czytelnik, jest w rozterce.
4. Wykorzystując algorytm k-średnich nie podano sposobu inicjalizacji klastrów. Czy można zarekomendować ich optymalną liczbę?
5. Algorytm VQE można było przedstawić bardziej przystępnie, niekoniecznie rozpoczynając wywód od bardzo formalnego zapisu.
6. Podpisy pod wykresami powinny być krótkie, w przypadku gdy ilustracja zawiera ich większą liczbę. Przykładowo w Fig. 4.2 i 4.4 można było nieznacznie skrócić podpisy, co znacznie zwiększyłoby czytelność wykresów. Ponadto w Fig. 4.2 powinna być zamieszczona legenda, która pozwoliłaby na uniknięcie opisu zastosowanej konwencji graficznej. Podobnie w Fig. 4.7, ogólne stwierdzenia zamieszczone pod rysunkami (subcaptions) powinny być w podpisie głównym (caption).

Przedstawione uwagi mają charakter głównie dyskusyjny i nie wpływają na pozytywną ocenę rozprawy.

W rozprawie wykazano, że techniki uczenia maszynowego umożliwiają wydajne generowanie impulsów sterujących, zapewniających odporną na zakłócenia ewolucję operacji unitarnych. Ponadto, opracowane algorytmy optymalizacyjne pozwalają na przyspieszenie procedur optymalizacyjnych stosowanych w algorytmie VQE.

Do oryginalnych osiągnięć autora rozprawy należy przede wszystkim zastosowanie rekurencyjnej sztucznej sieci neuronowej typu LSTM, a także metod kNN oraz k-means do kreowania impulsów sterujących układem kwantowym typu NISQ. Przeprowadzone symulacje wykazały, że zastosowanie wypracowanych w rozprawie metod pozwala na osiągnięcie stanów

bliskich zadaniem, pomimo obecności silnych efektów zakłócających dynamikę badanych układów. Ponadto, dużą wartością naukową cechują się opracowane narzędzia umożliwiające optymalizację procesu realizacji algorytmu VQE. Opracowane narzędzia optymalizacyjne zostały włączone do pakietu Penny Lane, co potwierdza ich oryginalność oraz użyteczność.

Zakres merytoryczny zakres rozprawy dowodzi, że jej autor wykazał umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej w bardzo aktualnym i ważnym obszarze badań, do którego wniósł swój znaczący wkład. Należy stwierdzić, że zawartość pracy jest zgodna z najnowszym stanem wiedzy w zakresie informatyki kwantowej, a osiągnięcia własne autora są nowatorskie.

Reasumując uważam, że w opiniowanej rozprawie doktorskiej pod tytułem: *Application of machine learning in quantum computer science*, (*Wykorzystanie uczenia maszynowego w informatyce kwantowej*) mgr Mateusz Ostaszewski samodzielnie rozwiązał postawione zadanie naukowe i wykazał się wiedzą oraz umiejętnościami wymaganymi dla uzyskania stopnia doktora nauk technicznych w dyscyplinie *Informatyka Techniczna i Telekomunikacja*. Stwierdzam, że recenzowana praca w pełni spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim określone w ustawie z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595, z 2003 r. z późniejszymi zmianami) i wnioskuję o dopuszczenie jej do publicznej obrony. Jednocześnie, zważywszy na to, że praca spełnia w mojej ocenie z nadmiarem wymagania stawiane rozprawom doktorskim, wnioskuję o jej wyróżnienie.

Bogdan Smółka