

Kraków, 21.07.2024

## **Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Akasha Kundu pt. “Reinforcement learning-assisted quantum architecture search for variational quantum algorithms”**

Praca doktorska Pana mgr Akasha Kundu pt. “Reinforcement learning-assisted quantum architecture search for variational quantum algorithms” została przygotowana w Instytucie Informatyki Teoretycznej i Stosowanej Polskiej Akademii Nauk. Promotorem pracy był dr hab. Jarosław Miszczak.

Tematyka rozprawy dotyczy aktualnej problematyki badawczej, związanej z wykonywaniem kwantowych algorytmów wariacyjnych na komputerach kwantowych tzw. ery NISQ (ang. Noisy Intermediate-Scale Quantum), cechującej się relatywnie niską ilością kubitów ( $\sim 100$ ) i stosunkowo dużym poziomem błędów. Hybrydowe algorytmy wariacyjne, wykorzystujące zarówno klasyczne, jak i kwantowe przetwarzanie informacji, rozpatrywane są pod kątem możliwości osiągnięcia użyteczności obliczeń kwantowych w erze NISQ. Stosowanie metod wariacyjnych, w sposób nieodzowny wiąże się z koniecznością stosowania parametryzowanych obwodów kwantowych (tzw. ansatzów). Biorąc pod uwagę ograniczenia kwantowych zasobów obliczeniowych, niezwykle istotnym problemem jest optymalizacja przyjętego ansatzu, zarówno pod kątem rozwiązywanego problemu, jak i dostępnego procesora kwantowego.

Idea rozwinięta w pracy polega wykorzystaniu technik uczenia maszynowego w procesie optymalizacji parametryzowanych obwodów kwantowych, tak aby ich wykonanie wymagało zastosowania jak najmniejszych zasobów kwantowych. Wykorzystanie technik nienadzorowanego uczenia, umożliwiło Autorowi opracowanie metody optymalizacji ansatzów, cechującej się znacznie niższymi poziomami błędów wyznaczania funkcji kosztu, względem alternatywnych podejść. Rozwiązanie Autora pracy, umożliwiło także zredukować ilość użytych bramek, jak również zmniejszyć głębokość obwodu oraz ilość parametrów ansatzu. Rozwinięta metoda została przetestowana w przykładowych zastosowaniach, m.in. do wyznaczania energii stanów podstawowych prostych molekuł oraz w procesie certyfikacji zasobów kwantowych.

Otrzymane wyniki stanowią wkład do w trzech publikacjach:

[1] Akash Kundu, Przemysław Bedeleń, Mateusz Ostaszewski, Onur Danaci, Yash J. Patel, Vedran Dunjko, Jarosław A. Miszczak, “Enhancing variational quantum state diagonalization using reinforcement learning techniques”, *New Journal of Physics*, Vol. **26**, pp. 013034 (2024).

[2] Yash J. Patel, Akash Kundu, Mateusz Ostaszewski, Xavier Bonet-Monroig, Vedran Dunjko, Onur Danaci; “Curriculum reinforcement learning for quantum architecture search under hardware errors”; przyjęte do druku w *The Twelfth International Conference on Learning Representations*, 2024.

[3] Akash Kundu, Jarosław A. Miszczak, "Variational certification of quantum devices," Quantum Science and Technology, Vol. 7, No. 4, pp 045017 (2022).

Praca ma 154 strony i została napisana w języku angielskim. Dysertacja została podzielona na siedem rozdziałów (zawierających podrozdziały), uzupełnionych czterema dodatkami oraz obszerną bibliografią, zawierającą 170 pozycji literaturowych.

W Rozdziale 1, w sposób przejrzysty i zrozumiały, przedstawiony został zarówno problem będący przedmiotem rozprawy doktorskiej, jak i sposób jego podjęcia przez Autora. Problem ten dotyczy optymalizacji konstrukcji obwodów kwantowych, mających zastosowanie w kwantowych algorytmach wariacyjnych (ang. Variational Quantum Algorithms - VQAs). Podejście rozwinięte przez Autora oparte zostało na wykorzystaniu technik uczenia maszynowego, a precyzyjniej na tzw. uczeniu przez wzmacnianie (ang. Reinforcement Learning - RL). Autor przedstawia główne założenia stojące za zastosowanym podejściem oraz formułuje dwie hipotezy, wyłaniające się z otrzymanych w pracy wyników.

Rozdział 2, podsumowuje podstawowe koncepcje i metody które znalazły zastosowanie w otrzymanych wynikach naukowych. W pierwszej części tego rozdziału, Autor przywołuje podstawowe definicje związane z kwantowymi metodami wariacyjnymi. Na uwagę zasługuje, wzbogacenie definicji rysunkami, odwołującymi się do przykładowych problemów wariacyjnych. Następnie, Autor omawia zagadnienie uczenia przez wzmacniania (RL). W szczególności, przywołana została definicja procesu decyzyjnego opartego o proces Morkova, którą zobrazowano przykładem. Autor wprowadził również uczenie niezależne od modelu (ang. model-free learning), które zakłada minimalną wiedzę *a priori* na temat procesu uczenia, co znajdzie zastosowanie w dalszych rozważaniach Autora. Rozdział zwieńczony jest wstępną dyskusją zastosowania metod RL do procesu poszukiwania optymalnej architektury obwodów kwantowych.

Rozdział 3, zawiera pierwsze z oryginalnych wyników dysertacji, dotyczące zastosowania uczenia przez wzmacniania do problemu wariacyjnej kwantowej diagonalizacji stanów (ang. Variational Quantum State Diagonalization - VQSD). Wyniki te stanowią wkład do artykułu [1]. Problem VQSD pozwala na znalezienie bazy w której stan kwantowy, opisywany przez macierz gęstości  $\hat{\rho}$ , przyjmuje postać diagonalną. Problem ten znajduje szereg zastosowań w dziedzinie obliczeń kwantowych. Autor rozpoczyna dyskusję od omówienia i oceny znanych wyników dla problemu VQSD. Następnie, omówione zostają autorskie wyniki dotyczące zastosowania do tego problemu uczenia przez wzmacnianie. Jako przykład zużycia problemu VQSD, Autor dyskutuje zagadnienie określania poziomu splątania kwantowego w modelu Heisenberga. Istotnym rezultatem badań jest wykazanie przewagi opracowanej metody (RL-VQSD) nad znanymi podejściami alternatywnymi.

W Rozdziale 4, Autor rozszerza przeprowadzoną analizę do przypadku wariacyjnego algorytmu wyznaczającego wartości własne (ang. Variational Quantum Eigensolver - VQA). Algorytm ten znajduje ważne zastosowanie w obliczaniu energii stanów podstawowych układów kwantowych, w szczególności w ramach chemii kwantowej. Rozwinięte przez Autora

podejście pozwala na optymalizację ansatzu dla metody VQA, zarówno dla przypadku stanów czystych, jak i w obecności szumów. Opracowane podejście zastosowane zostaje do wyznaczania energii stanu podstawowego dla molekuł  $H_2$ ,  $LiH$  oraz  $H_2O$ . Przedstawione w tym rozdziale wyniki stanowią wkład do artykułu [2].

Rozdział 5 dostarcza dyskusji zastosowania, opracowanej przez Autora, metody RL-VQSD, do certyfikacji kanałów kwantowych. Wyniki te stanowią wkład do artykułu [3]. Idea przedstawionej metody polega na wykorzystaniu związku pomiędzy kanałami kwantowymi (reprezentującymi działanie komputera kwantowego) a stanami kwantowymi (reprezentowanymi przez macierze gęstości) w oparciu o izomorfizm Choia-Jamiołkowskiego. W tym podejściu, algorytm RL-VQSD wykorzystany zostaje do wyznaczenia wartości własnych oraz wektorów własnych odpowiedniej macierzy gęstości. Na tej podstawie, wyznaczane zostają dolne i górne ograniczenie na wierność stanu kwantowego dopowiadającemu danemu kanałowi kwantowemu. Opisany algorytm został przetestowany dla przypadków jedno- i dwukubitowych dla różnych modeli szumu. Wyniki przedstawione w Rozdziale 5, w mojej ocenie, stanowią szczególnie interesujący wynik, mogący znaleźć praktyczne zastosowanie w procesie charakteryzacji kwantowych systemów obliczeniowych.

Rozdział 6, zawiera syntezę wyników przedstawionych w poprzednich trzech rozdziałach. Nie zawiera on jednak istotnie nowych spostrzeżeń, względem tych już zawartych we wcześniejszej dyskusji. Następujący po nim, Rozdział 7 stanowi zwięźczenie pracy. W rozdziale tym, Autor podsumowuje argumenty, wyłaniające się z przeprowadzonych badań, stojące za dwiema hipotezami, sformułowanymi w Rozdziale 1. Hipotezy te dotyczą konstrukcji optymalnych ansatzów, z wykorzystaniem technik RL, dla przypadku wyidealizowanego (dla stanów czystych) oraz realistycznego (w obecności szumów). Co istotne, w tej części rozprawy, Autor wyraźnie podkreśla zarówno silne, jak i słabe strony otrzymanych wyników oraz opracowanych metod. Autor przywołuje również otwarte problemy, które mogą się stać przedmiotem kolejnych badań.

Reasumując, praca stanowi spójny ciąg rozumowania, zgodny z metodologią pracy naukowej. Rozprawa zawiera oryginalne wyniki, które stanowią wkład zarówno do podstawowego zrozumienia granic stosowalności kwantowych metod wariacyjnych, jaki i do zbioru praktycznych narzędzi, które mogą przyczynić się do szybszego wykorzystania, dostępnych obecnie oraz w niedalekiej przyszłości, systemów dedykowanych przetwarzaniu informacji kwantowej.

Przeprowadzone badania oraz powstała na ich podstawie dyskusja, przedstawiona w dysertacji, wskazują na szeroką i ugruntowaną wiedzę Autora w zakresie zarówno kwantowych metod wariacyjnych, kanałów kwantowych oraz metod uczenia maszynowego. Otrzymanie wyników nie byłoby możliwe bez wykonania rozbudowanych obliczeń, których implementacja wymagała płynnego posługiwania się technikami programistycznymi. To, całościowo ujmując, potwierdza wypracowanie solidnego warsztatu naukowego-informatycznego przez Pana mgr Akash Kundu, co stawia go w bardzo dobrej pozycji pod kątem podejmowania dalszych wyzwań naukowych.

Na podkreślenie wymaga fakt, iż badania przeprowadzone przez Autora dysertacji stanowią wkład na styku dwóch najbardziej dynamicznie rozwijających się obecnie kierunków badań w fizyce i informatyce. Obszar badawczy na przecięciu uczenia maszynowego oraz obliczeń kwantowych jawi się jako szczególnie ciekawy i zarazem obiecujący, zarówno od strony czysto poznawczej, jak i praktycznej. Interdyscyplinarne badania przeprowadzone przez mgr Akash Kundu wytyczają jedną z nowych ścieżek w tym nowym krajobrazie wiedzy.

Dysertacja, przedstawiająca wyniki badań mgr Akash Kundu, została przygotowana w sposób staranny i przemyślany. Natomiast, do nielicznych uwag jakie nasuwają się, zapoznając się z jej treścią, można zaliczyć:

- W Rozdziale 2 można znaleźć niedociągnięcia edytorskie. M.in. wzór (2.1) nie zawiera funkcji  $f_i$ , do których Autor odnosi się poniżej. Natomiast, znajdując się w nim, nie zdefiniowane przez Autora, stałe  $c_i$ . Odwołanie do funkcji  $f_i$  powinno się znaleźć pod wzorem (2.3). Nie jest także jasne jak, zgodnie z informacją zawartą w pracy, Fig. 2.1 ilustruje proces optymalizacyjny. Jest to jedynie wykres funkcji kosztu a nie procesu poszukiwania minimum globalnego tejże funkcji. W tekście zabrakło także odwołania do Fig. 2.2.
- W tekście nie znaleziono uzasadnienia wyboru funkcji nagrody, danej przez równanie (3.10). Wartościowe byłoby rozważanie zarówno znaczenia przyjętej parametryzacji, jak również omówienie możliwych innych wyborów tej funkcji.
- W pracy zabrakło informacji o klasycznych zasobach obliczeniowych niezbędnych do wykonania procedur optymalizacyjnych. Szczególnie ciekawe byłoby empiryczne zbadania skalowania tych zasobów w funkcji parametrów problemu (np. ilości kubitów). Pozwoliłoby to oszacować, jaki zakres problemów jest możliwy do objęcia przez opracowaną technikę, w ramach realistycznych zasobów obliczeniowych.
- W mojej ocenie, w pracy nie przedstawiono wystarczająco silnych przesłanek do postawienia Hipotezy 1. Fakt otrzymania przewagi nad rozwiązaniami alternatywnymi trudno uznać za argument wystarczający za postawieniem hipotezy o rozwiązaniu optymalnym. Autor powinien się w tym kontekście odnieść do rozważań opartych na teorii złożoności kwantowej lub teorii informacji w celu uzasadnienia postawionej hipotezy.
- Cenne byłoby przeprowadzenie analizy redukcji złożoności obliczeniowej dla przypadku obwodów otrzymanych z zastosowaniem technik RL.

Należy dodać, że artykuły [1,2,3], zawierające główne wyniki dysertacji, na podstawie bazy INSPIRE HEP, zostały, jak dotąd, cytowane łącznie 18 razy. Wskazuje to na zauważenie wyników badań mgr Akash Kundu przez środowisko naukowe. Warto także podkreślić, że New Journal of Physics oraz Quantum Science and Technology należą do cenionych czasopism fizycznych o współczynnikach Impact Factor IF odpowiednio 2.8 oraz 5.6.

Z informacji zawartych w tych publikacjach można wywnioskować, że mgr Akash Kundu odegrał kluczową rolę w ich przygotowaniu.

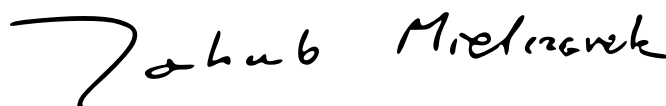
Ponadto, Pan mgr Akash Kundu jest Autorem i współautorem co najmniej 13 artykułów i preprintów. Wśród nich, można znaleźć prace opublikowane w takich czasopismach jak Physical Review A (IF = 2.6), Quantum Information Processing (IF = 2.2), czy Annalen der Physik (IF = 2.2).

Jest to wynik spełniający z nadlatkiem zwyczajowe oczekiwania stawiane przed kandydatem do stopnia doktora.

Należy dodać, że w trakcie realizacji studiów doktorskich, Pan mgr Akash Kundu, co najmniej ośmiokrotnie, prezentował otrzymane wyniki na seminariach oraz konferencjach naukowych w Polsce i za granicą. Odbył on również wizytę naukową w TUDelft oraz uczestniczył w szkołach fizycznych w Bad Honnef oraz w ETH w Zurichu. Całościowo, buduje to obraz mgr Akasha Kundu jako zaangażowanego młodego badacza, który śmiało i w sposób wybijający się na niezależność, podejmującego nowe wyzwania naukowe.

Podsumowując, stwierdzam, że praca Pana mgr Akash Kundu pt. "Reinforcement learning-assisted quantum architecture search for variational quantum algorithms" spełnia warunki określone w Art. 186 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. 2018 poz. 1668) i wnioskuję o przejście do kolejnego etapu procedury związanej z przyznaniem Panu mgr Akashowi Kundu stopnia doktora w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja.

Z poważaniem,



dr hab. Jakub Mielczarek, prof. UJ  
Instytut Fizyki Teoretycznej  
Uniwersytet Jagielloński