

dr hab. inż. Marek Sawerwain, prof. UZ  
Instytut Sterowania i Systemów Informatycznych  
Wydział Informatyki, Elektrotechniki i Automatyki  
Uniwersytet Zielonogórski  
ul. Licealna 9  
65-417 Zielona Góra  
tel.: 68 328 2321  
e-mail: M.Sawerwain@issi.uz.zgora.pl

Zielona Góra, 09.08.2024r.

Recenzja rozprawy doktorskiej Pana mgra Akasha Kundu  
*Kwantowe wyszukiwanie architektury dla  
wariacyjnych algorytmów kwantowych  
wspomagane uczeniem ze wzmocnieniem*

Przedmiotem recenzji jest rozprawa doktorska pt. „Kwantowe wyszukiwanie architektury dla wariacyjnych algorytmów kwantowych wspomagane uczeniem ze wzmocnieniem” przygotowana przez mgra Akasha Kundu pod kierunkiem dra hab. Jarosława Miszczaka.

## 1 Ogólna charakterystyka pracy i jej tematyka

W pracy Autor przeprowadził badania związane z konstrukcją obwodów kwantowych dla wariacyjnych algorytmów kwantowych zdolnych do pracy przy wykorzystaniu tzw. zasumionych komputerów kwantowych średniej skali określanych obecnie skrótem NISQ (ang. NISQ – Noisy Intermediate-Scale Quantum, tj. zasumione komputery kwantowej średniej skali). Obecność szumów stanowi ważny problem utrudniający przeprowadzania obliczeń, które powinny charakteryzować się powtarzalnością oraz odpowiednią precyzją. Mimo tych ograniczeń obecnie podejmowane są wysiłki mające na celu takie opracowanie algorytmów kwantowych, które pomimo ograniczeń, obecnie i zapewne w niedalekiej przyszłości, pozwolą na istotne polepszenie jakości przeprowadzanych obliczeń na fizycznych implementacjach maszyn typu NISQ. Jednym z takich rozwiązań, i bezpośrednio odnosi się do tego Autor rozprawy w swojej pracy, jest zaproponowana w szerokiej literaturze grupa algorytmów opartych o wariacyjne algorytmy kwantowe (ang. VQA - Variational Quantum Algorithms). W tego typu algorytmach część kwantowa została wyposażona w dodatkowy zestaw parametrów wraz z funkcją kosztu. Zestaw parametrów podlega optymalizacji klasycznej, zatem algorytmy VQE są algorytmami hybrydowymi łączącymi obliczenia kwantowe wraz optymalizacją klasyczną.

Jakość, albo ogólnie rozumiana wydajność wariacyjnych algorytmów kwantowych jak podaje Autor rozprawy już bezpośrednio w streszczeniu swojej pracy, zależy od trzech elementów:

- (1) przyjętej strategii inicjalizacji obwodu wariacyjnego,
- (2) zastosowanej struktury obwodu ansatz w VQE,
- (3) określenia postaci funkcji straty.

Autor rozprawy proponuje poprawić wydajność wariacyjnych algorytmów kwantowych poprzez zastosowanie automatycznego wyszukiwania optymalnej struktury obwodów wariacyjnych z wykorzystaniem metody uczenia się ze wzmocnieniem (ang. RL – Reinforcement Learning). Do oceny proponowanych zmian w architekturze (strukturze) obwodu proponuje się ocenę poprzez następujące wielkości:

- (1) głębokość obwodu,
- (2) liczbę zastosowanych bramek do budowy obwodu,
- (3) osiągniętą dokładność w rozwiązaniu zadanego problemu.

Należy zwrócić uwagę, iż obecnie w szerokiej literaturze wiele podejmowanych badań dotyczących szukania właściwej architektury koncentruje się na przypadkach, gdzie nie jest brana pod uwagę obecność szumu. Zatem podjęcie w pracy zagadnienie szukania architektury w przypadku obecności szumu należy ocenić bardzo pozytywnie i niewątpliwie praca uzupełnia ten obszar badań.

Autor pracy skupił się na wprowadzeniu techniki łączącej kodowanie obwodów kwantowych opartego na tensorach, a także na podanie technik polegających na ograniczeniu dynamiki środowiska, aby efektywnie badać przestrzeń poszukiwań możliwych obwodów oferujących jak najwyższą jakość. Jak również przedstawiono schemat zatrzymywania epizodów uczenia, tak aby znaleźć płytsze obwody VQE. W pracy przedstawiono także schemat postępowania polegający na wykorzystaniu podwójnie głębokiej sieci neronowej (DDQN) z odpowiednią polityką  $\epsilon$ , aby osiągnąć lepszą stabilność rezultatów. Zrealizowane przez Autora eksperymenty numeryczne na bezszumowym symulatorze oraz zaszumionym sprzęcie kwantowym pokazują, że zaproponowana metoda wyszukiwania architektury pozwala na osiągnięcie lepszych rezultatów niż dotychczas dostępne rozwiązania opisane podczas pisania rozprawy (oraz recenzji) w szeroko dostępnej literaturze. Warty podkreślenia elementem jest także fakt, iż proponowane rozwiązania można stosować do szerokiej gamy metod opartych o podejście VQA.

Podsumowując ogólną tematykę pracy podjętą przez Autora pracy, należy ją ocenić jako ważną oraz istotną dla obecnego trendu badań w obszarze obwodów VQE i systemów NISQ. Metody analizowane przez Autora bezpośrednio dotyczą aspektów badawczych podejmowanych w obszarze aktualnych badań informatyki kwantowej dotyczącej algorytmów VQE i obwodów kwantowych dotyczących tej metody. Praca choć ma charakter analizy przypadku, nie mniej wnosi też istotnym wkład do części teoretycznej algorytmów VQE i maszyn NISQ, a zatem rozprawą doktorską można umieszczać w obszarze zainteresowania obliczeń kwantowych w ramach dziedziny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.

## 2 Zawartość rozprawy

Praca została napisana w języku angielskim, i składa się z siedmiu głównych rozdziałów, czterech dodatków, bibliografii. Łącznie liczy sto sześćdziesiąt stron. W pierwszej części po podziękowaniach, Autor rozprawy przedstawia także spis publikacji związanych z tematyką podejmowanych badań oraz streszczenia w języku polskim oraz w języku angielskim.

Rozdział pierwszy to wprowadzenie, gdzie zaprezentowana aktualny opis stanu wiedzy o obwodach VQE i maszynach NISQ wraz ze wskazaniem aktualnej literatury. Postawiono także Hipotezę 1, gdzie Autor zakłada iż zastosowanie techniki uczenia ze wzmocnieniem wraz z poprawnym zaprojektowaniem obwodu Ansatz pozwoli na podaniem lepszych konstrukcje VQE uwzględniając liczbę bramek, ilości parametrów i w wyniki stosowania tych technik niskiej wartości funkcji kosztu.

Rozdział zawiera także Hipotezę 2, w której Autor zakłada iż zastosowanie kodowania binarnego dla obwodu kwantowego wraz uczeniem ze wzmocnieniem pozwoli razem z technikami ograniczania przestrzeni przeszukiwań, oraz skróceniem czasu uczenia poprawić końcową jakość otrzymywaną za pomocą VQE w obecności szumu.

Rozdział drugi, w pierwszej części – podrozdział 2.1 – zawiera informacje wprowadzające dotyczące algorytmów z rodziny VQE. W prowadzone tam zostały definicje funkcji celu, obwodu Ansatz, sposobu trenowania obwodu, a także pojęcie kwantowego operatora aproksymującego (wraz z definicją jego obwodu – Quantum Approximate Optimization Ansatz - QAOA). Pokazano również jak aktualnie obwody Ansatz mogą być tłumaczenie na rzeczywiste aktualnie dostępne maszyny kwantowe.

Drużga część rozdziału drugiego – podrozdział 2.2 – jest poświęcona technice uczenia ze wzmocnieniem. Zagadnienia te są zaprezentowane z pomocą przykładu opartego o skończony decyzyjny proces markowa. Istotnym elementem jest podrozdział 2.3, gdzie Autor pokazuje jak technika uczenia ze wzmocnieniem może zostać zastosowana do problemu VQE oraz pokazano jak poszczególne etapy uczenia ze wzmocnieniem mogą zostać zrealizowane za pomocą odpowiednich obwodów kwantowych.

Rozdział trzeci, przedstawia osiągnięcia Autora. Zawiera omówienie podejścia do diagonalizacji poprzez zastosowanie algorytmu VQE oraz dołączenie metod uczenia maszynowego w celu optymalizacji sekcji obwodu która nazwana została RL-Action. Autor przedstawia najważniejsze składniki jego metody, porównuje ją z istniejącymi rozwiązaniami. Przyjęta struktura rozdziału: opis istniejących rozwiązań, przedstawienie własnego rozwiązania, porównanie wydajności/jakości na kilku przykładach, a także podsumowanie w postaci kilku komentarzy co do otrzymanego rozwiązania pozwoliło Autorowi na skuteczną prezentację własnego podejścia do procesu diagonalizacji.

Rozdział czwarty ma budowę podobną do rozdziału trzeciego. W tym rozdziale omawiany jest proces syntezy obwodu typu Ansatz. Po prezentacji istniejących rozwiązań, Autor pracy przechodzi do omówienia zastosowanego pojęcia Agenta oraz odniesienia do otoczenia, bowiem ważnym rezultatem przedstawianym w tej pracy jest uwzględnienie wpływu otoczenia tj. szumu na obwód. Na analizę wpływu szumu na postać obwodu Ansatz poświęcono sporo uwagi, i jest to ważny elementem tej części pracy. Obecnie w literaturze obwody Ansatz zazwyczaj testowane są tylko w środowisku idealnym, a oceniana praca poświęca wiele uwagi pracy obwodu Ansatz w środowisku z obecnym szumem. Potwierdza to podrozdział 4.5, bowiem omówione rezultaty jakości otrzymanego układu Ansatz są sprawdzane w dwóch przypadkach z szumem oraz bez szumu. Analogicznie jak w rozdziale trzecim, tu również Autor na koniec podaje systematyczne podsumowanie wskazują

dobre i nieco słabsze strony proponowanego rozwiązania.

Imy charakter ma rozdział piąty pt. "Variational certification of quantum channels: An application of RL-VQSD". Ten rozdział ma charakter aplikacyjny, ponieważ Autor wykorzystując omówione wcześniej rozwiązania stosuje je do procesu certyfikacji kanału kwantowego.

Przedstawiono algorytm certyfikacji, model zakłóceń. Omówiono dokładniej sposób realizacji eksperymentu. Eksperyment został przedstawiony w wersji numerycznej, ale omówione są także wybrane problemy związane z realizacją certyfikacji na rzeczywistym sprzęcie. Metoda RL-VQSD została użyta, aby wyznaczyć wierność kwantową (ang. quantum Fidelity). W tym celu zastosowano izomorfizm Jamiołkowskiego-Choia oraz diagonalizację. Pokazano iż pewne klasy szumu o niewielkiej intensywności nie przeszkadzają w przeprowadzeniu procesu certyfikacji. Naturalnie, jednak obecnie dostępne rozwiązania sprzętowe nadal cechują się obecnością szumu, co jednocześnie potwierdzają eksperymenty przeprowadzone przez Autora.

Pracę podsumowują dwa rozdziały numer sześć i siedem, gdzie przeprowadzana jest dyskusja nad osiągniętymi rezultatami oraz Autor wskazuje też dalsze uwagi co do stosowania zaprezentowanych rozwiązań w postaci sześciu dodatkowych punktów. Rolę podsumowania pełni ostatni rozdział, w którym to znajduje się komentarz łączący postawione hipotezy 1 oraz 2 z rozwiązaniami zaprezentowanymi w rozdziałach trzecim i czwartym.

Pracę kończy bibliografia zawierająca sto siedemdziesiąt pozycji, są to zarówno doniesienia konferencyjne, artykuły, w tym także prace o statusie preprint, otwarte recenzje w serwisie Open-Review, ale także wskazania do stron WWW. Bibliografia zatem zawiera szeroko przegląd publikacji jaki w ostatnich latach zostały opublikowane w kontekście tematyki podejmowanej przez Autora.

Autor przygotował także cztery dodatki. Dodatek A, zawiera podstawowe wprowadzające informacje dotyczące informatyki kwantowej. Dodatek B, przedstawia dowód dotyczący ograniczenia na wierność obciążoną stosowaną w pracy przez Autora. Krótkie informacje dotyczące pojęcia nielegalnych operacji zawiera dodatek C. Natomiast ostatni czwarty Dodatek D przedstawia wybrane fragmenty kodu źródłowego w języku Python wraz definicjami algorytmów, które są implementowane w środowisku języka Python.

### 3 Osiągnięcia zaprezentowane w rozprawie

Ocena rozprawy nastąpi poprzez analizę trzeciego, czwartego oraz piątego rozdziału, gdyż są najważniejsze dla całości rozprawy, bowiem to w nich Autor prezentuje osiągnięte rezultaty. Należy też dodać iż w rozdziale piątym dokonano implementacji opracowanych rozwiązań w postaci protokołu certyfikacji kanału kwantowego.

#### 3.1 Diagonalizacja

W rozdziale trzecim rozprawy Autor omawia metodę przeprowadzania diagonalizacji (ang. Variational Quantum State Diagonalization – VQSD), która została oparta o rozwiązanie bazujące na pracy [R. LaRose, A. Tikku, É. O’Neel-Judy, L. Cincio, and P. J. Coles. Variational quantum state diagonalization. npj Quantum Information, 5(1):57, 2019] wraz ze modyfikacjami proponowanymi przez Autora.

Metoda rozwijana przez Autora bazuje na utworzeniu dodatkowego obwodu Action i określeniu funkcji nagrody oraz dodaniu sieci głębokiej do procesu sterowania parametrami dodatkowego układu określonego jako Action. Całość propozycji wraz prezentacją proponowanych etapów została przedstawiona w podrozdziale 3.3, natomiast skuteczność diagonalizacji przedstawiono w podrozdziale 3.4 pt. „Diagonalizing quantum state with RL-VQSD”.

Dzięki przywołaniu w rozdziale 3.2 istniejących rozwiązań, Autor mógł w sposób bezpośredni odnieść się do istniejących rezultatów oraz przeprowadzić krytyczną analizę proponowanego własnego rozwiązania. Głównym rezultatem w tej części jest metoda RL-VQSD którą Autor rozszerzył względem typowego VQE o wymieniony dodatkowy pod obwód Action, obwód kanału „dephasing” oraz dodatkową sieć głęboką (DNN), która wspomaga proces doboru parametrów oraz postać obwodu Action.

Jest to istotna zmiana względem typowych zastosowań VQE, gdzie dane odczytywane za pomocą obserwabli były wielkościami przekazywanymi do optymalizatora, który na tej podstawie wskazywał kolejne wartości argumentów dla bramek obrotu w części obwodu ansatz. W proponowanym podejściu tą rolę pełni obwód Action, który oprócz samych parametrów również może zmieniać swoją postać oraz wykorzystuje sieć DNN do której kierujemy dane pozyskane z obserwabli.

Należy przyznać iż takie podejście poskutkowało poprawą jakości procesu diagonalizacji, co pokazano na kilku przykładach. Wyniki jednego z nich przedstawia Rys. 3.10. Opracowano także przykład odnoszący się do modelu Heisenberga (o trzech i czterech qubitach). W każdym przypadku ilustracje ze zrealizowanych eksperymentów, pokazują lepszą zbieżność szukanymi wartościami własnymi przy zastosowaniu podejścia RL-VQSD niż typowy algorytm VQE w wyposażony w standardową postać obwodu ansatz nazywaną przez Autora postacią LHEA.

Wbrew pozorom takie podejście ma bardzo dużą wartość w obszarze inżynierii algorytmów VQE, gdzie proces poszukiwania różnych postaci obwodów typu Ansatz (w przypadku metody Autora obwodu Action) ma fundamentalne znaczenie dla jakości całego algorytmu/obwodu.

Autor wskazuje w omawianiu przykładów liczbę warstw, bramek jakie są potrzebne, aby osiągnąć zadaną dokładność. Wartościowym elementem tej praktycznej analizy jest też przykład z rozdziału 3.4.4, gdzie pokazano jak zastosowanie RL-agentów polepsza systematyczne przeszukiwanie przestrzeni rozwiązań w podejściu szukania losowego.

Równie wartościowym elementem pracy jest też rozdział 3.5, gdzie podano uwagi wybrane przez Autora świadczące o dobrych i słabych stronach podczas doboru struktury obwodu ansatz, wyboru klasycznego optymalizatora. Podkreśla się też iż zastosowanie binarnego kodowania pozwala na efektywne tworzenie obwodu z wielomianową ilością qubitów.

Choć struktura rozdziału w ogólności jest klarowna, to Autor niestety nie przedstawia uwag do kilku ważnych aspektów. Brakuje bezpośredniego odniesienia do procedur numerycznych których są dołączone do pracy. Niestety, w rozdziale trzecim nie ma informacji o tym jak budowany jest Agent za pomocą sztucznej głębokiej sieci neuronowej, mamy niestety tylko odniesienia do literatury. Nie ma też informacji dokładniejszych o procesie uczenia. Proces kodowania binarnego obwodu RL-Action, także jest dość krótko przedstawiony. Wartościowym elementem byłoby dodatek, gdzie pokazano by więcej przykładów jak stosować ten sposób kodowania.

W sposób bardzo pobieżny potraktowano również kwestie złożoności obliczeniowej, a także czas trwania eksperymentów. Jedyne wielkość obwodu RL-action została opisana jako struktura ze skalowaniem wielomianowym. Używany zbiór stanów kwantowych, nie został podzielony na

stany splątane i separowalne, ma to dość istotne znaczenia w przypadku obwodów typu ansatz (dla stanów mieszanych dwukubitowych mamy jednoznaczne kryteria, które pozwalają na pełną ocenę obecności splątania, w przypadku trójkubitowych kryterium CCNR mogłoby by tu być bardzo przydatne). Struktura obwodu Ansatz, m.in. głębokość, liczba warstw jest wrażliwa ze względu na postać stanu. Oczywiście przyjęte przez Autora podejścia kreacji stanów zgodnie z miarą Haara naturalnie jest prawidłowe.

W tabeli 3.2 (strona 72) zastosowano średnią liczbę bramek, jednakże wielkości typu 41.13 naturalnie nie powinny odnosić się do liczby bramek, która mimo iż jest średnią powinna być wielkością całkowitą.

Wskazane braki, jednakże nie obniżają dobrej oceny rozdziału trzeciego. Opis dodatkowych przypadków np. innych spotykanych w literaturze postaci obwodu Ansatz wydłużyłyby i tak obszerną (160 stron) pracę.

### 3.2 Synteza obwodu ansatz

Struktura rozdział czwartego jest podobna do rozdziału trzeciego. Autor rozprawy przedstawia najważniejsze znane fakty stosowania obwodów Ansatz, w problemach chemii kwantowej. Algorytm VQE znajduje w tym obszarze ważne i liczne zastosowania. Zatem proponowane ulepszenia budowy obwodu Ansatz za pomocą technik uczenia maszynowego są naturalnie bardzo ważne dla obszaru zastosowań VQE.

W proponowanej metodzie Autor proponuje zastosowanie kodowania tensorowego obwodu kwantowego (tensor based quantum circuits encoding) w sposób podobny jak w metodzie diagonalizacji. Jednakże, jakość działania obwodu Ansatz jest naturalnie oparta o łatwość budowy stanów kwantowych jakie aktualnie są przetwarzane przez całość danego algorytmu VQE. W tym celu zaproponowano mechanizm o nazwie „illegal action”, w którym to podczas procesu budowy i szukania właściwej postaci obwodu ansatz można wykryć nieporządne konstrukcje obwodów. Metoda Autora powoduje, iż podczas procedury budowy niepożądane postacie obwodów kwantowych są pomijane w trakcie syntezy końcowej postaci obwodu ansatz. Autor stosuje także mechanizm losowego zatrzymywania (ang. random halting), aby wcześniej przerywać proces syntezy, szczególnie jeśli aktualna postać obwodu cechuje się już odpowiednio wysoką dokładnością.

Również postać funkcji nagrody jest przez Autora pracy analizowana, poświęcony jest temu podrozdział 4.3.3. Osiągnięte rezultaty zostały porównane ze standardową definicją obwodu ansatz, i przedstawione m.in. w postaci tabeli 4.2 oraz tablic 4.3 na stronach 92 – 94 podrozdziale 4.5. Głównym przykładem jakie wykorzystał Autor jest szukanie stanu o najniższej energii (ground state) molekuł  $H_2$ ,  $LiH$  oraz  $H_2O$ . Przykłady związane z tym zagadnieniem są szeroko dyskutowane w literaturze, zatem ogranicznie wielkości obwodu Ansatz, które prezentuje Autor są znaczące, szczególnie w ujęciu praktycznym, co powoduje iż istotnie można stosować zaprezentowane obwodu Ansatz w niedalekich maszyn NISQ ale również i w eksperymentach numerycznych. bowiem omawiana technika poprawy jakości i dokładności oznacza także niższą liczbę niezbędnych bramek do budowy odpowiednich wersji obwodu ansatz.

Autor wskazuje też rezultaty osiągnięte w przypadku obecności szumu. W podsumowaniu do rozdziału czwartego (strona 96, pkt. pt. „Solving molecules under physical noise and connectivity constrained”), wskazuje jakie liczby powtórzeń wykonana obwodu są potrzebne aby otrzymać odpowiednio dokładności w ramach modelu zakłóceń dostępnych dla jednej z dostępnych publicznie

maszyn kwantowych. Niewątpliwie, zaproponowana metoda szukania i adaptowania postaci obwodu Ansatz jest dość skuteczna, i stanowi wartościowe rozwiązanie w obszarze algorytmów typu VQE.

W przedstawionej analizie, podobnie jak w przypadku rozdziału trzeciego brakuje opisu złożoności obliczeniowej, zarówno w przypadku teoretycznym ale także i praktycznym. Na stronie nr 82 Autor podał kilka informacji o tym jak budowany jest Agent w oparciu o sztuczną sieć neuronową. Podano wielkości sieci, oraz jaki typ sprzętu do symulacji został użyty, jednakże brakuje rezultatów czasowych z wykonania eksperymentów numerycznych.

W obu przypadkach tj. metody diagonalizacji oraz syntezy obwodu ansatz brakuje dyskusji nad uniwersalnością otrzymanych postaci obwodów. Uzyskane rezultaty w syntezie obwodu pokazują znaczące uproszczenie konstrukcji obwodu wraz z otrzymaniem bardzo dobrych przybliżeń, jednak w tekście pracy nie ma dyskusji dotyczącej uniwersalności budowanych obwodów.

### 3.3 Certyfikacja kanału kwantowego

W rozdziale piątym metody zaproponowane w dwóch poprzednio omówionych rozdziałach zostały użyte, aby zaimplementować protokół certyfikacji kanału kwantowego, nie tylko poprzez eksperymenty numeryczne ale również podano jego realizację na obecnie dostępnych fizycznych maszynach kwantowych.

Algorytm certyfikacji został opisany w rozdziale 5.2.2 i bazuje na metodzie estymacji wartości Fidelity. Podobnie jak poprzednio omawiane podejście uwzględnia szum modelowany przez kanał typu depolaryzacja (noise depolarizing) oraz tłumienie amplitudy (amplitude damping). Autor wskazuje też na jakie poziomy błędów można było oczekiwać od sprzętowego urządzenia na którym przeprowadzano fizyczną realizację certyfikacji.

Osiągnięte rezultaty wydajności tj. dokładności wyrażonych za pomocą wartości Fidelity zaprezentowano w rozdziale 5.3. Autor zaprezentował kilka wariantów testów certyfikacji dla jedno-qubitowego kanału (podrozdział 5.3.1), czy dwóch qubitów (podrozdział 5.3.2). Testowane były także różne bramki splatające CZ, CX i ich wpływ na wartość błędów wartości Fidelity.

Ważny komentarz do osiągniętych rezultatów stanowi podrozdział 5.4, gdzie przedyskutowano jak opracowana wcześniej metoda RL-VQSD pozwala na osiągnięcie wysokiej dokładności przy mniejszych rozmiarach układu kwantowego oraz zastosowaniu agentów. Podejście RL-VQSD bowiem jest centralnym elementem efektywnego wyznaczania wartości Fidelity stosowanej w procesie certyfikacji kanału kwantowego.

Autor wykazał że stosowanie diagonalizacji przedstawionej w rozdziale trzecim pozwala na osiągnięcie bardzo dobrej dokładności wartości, co zostało zaprezentowane na rysunkach 5.5 oraz 5.9. Istotnym rezultatem w tym kontekście jest pokazanie jak dodatkowy szum wpływa na wydajność realizacji protokołu certyfikacji. Obrazowo zostało to zaprezentowane poprzez wykres na rysunku 5.7, gdzie Autor potwierdził iż dodatkowa procedura uczenia maszynowego oraz krótkie (płytkie) obwody kwantowe przyczyniają się do wysokiej jakości całości procesu certyfikacji. Potwierdzenie to zostało osiągnięte zarówno na drodze eksperymentów numerycznych oraz realizacji na fizycznym urządzeniu kwantowym.

### 3.4 Reprodukacja rezultatów

Ważnym elementem w pracy jest także dostarczenie kodów źródłowych proponowanych rozwiązań oraz dostępu do repozytorium gdzie znajdują opracowane rozwiązania dla języka Python. Taki rozwiązanie, pozwala na pełną weryfikację proponowanych rozwiązań a także reprodukcję wyników, co ma znaczenie dla ostatecznej bardzo dobrej oceny pracy Autora jako całości.

### 3.5 Uwagi krytyczne oraz pytania

W pracy występują uchybienia techniczne np. zbyt duża tabela na stronie 92, podpis do tabeli wchodzi w stopkę w strony. Na stronie 107 wskazać można zbyt duże odstępki między poszczególnymi akapitami tekstu. We wzorze 5.16 Autor powołuje się na symbol oznaczony dużą literą „N”, ale taki symbol nie występuje w tym wzorze. Niektóre pozycje w bibliografii również nie mają wszystkich informacji np. pos. 66, brakuje wskazania iż jest to recenzja.

W tekście pracy przytrafiają się też przeoczenia, przykładem jest strona 77. W tekście wprowadzającym do rozdziału Autor wskazuje trzy główne punkty oznaczając pierwszy jako (i), jednakże brakuje wskazania dla punktów (ii) oraz (iii).

Numeracja algorytmów zaproponowanych w dodatku również nie jest spójna, po Algorytmie 3 na stronie 150, następny algorytm nosi numer 1, strona 154.

Jednakże wspomniane uchybienia mają charakter techniczny i dotyczą składu tekstu.

W pracy, mimo iż jest dość obszerna, pozostały także otwarte pytania, które zostały zarysowane w poprzednich rozdziałach. Jednakże najważniejsze pytania i dodatkowe problemy do Autora pracy, jakie tu można nakreślić przedstawiałyby się następująco:

- (P1) W pracy nie ma zbyt wielu informacji o tym jak budowana jest sztuczna sieć neuronowa w metodzie diagonalizacji prezentowanej w pracy. Nie ma również informacji jak przedstawia się proces uczenia takiej sieci.
- (P2) W pracy nie ma również przykładowych czasów wykonania się przykładów diagonalizacji, np. eksperymentów z Rys. 3.10.
- (P3) Wartościowym elementem uzupełniającym analizę, byłaby także próba oszacowania złożoności obliczeniowej procesu diagonalizacji np. w zależności od oczekiwanej dokładności lub potrzebnej głębokości obwodu kwantowego.
- (P4) Pytanie (P2) można powtórzyć w kontekście procesu syntezy obwodu ansatz w rozdziale nr 4. Przy czym Autor rozprawy wskazuje iż stosował też pakiet Qulacs, do symulacji obwodów kwantowych, dodatkowe pytanie dotyczyłoby potrzebnej ilości pamięci operacyjnej, aby taką symulację przeprowadzić?
- (P5) Niezwykle ważnym aspektem w przypadku obwodu ansatz jest jego uniwersalność dla dowolnego stanu kwantowego, w pracy nie było na ten temat uwag, dlatego pytanie o dodatkowy komentarz dotyczący uniwersalności Autorskiej procedury syntezy obwodu ansatz wydaje się tu zasadna.



- (P6) W procesie certyfikacji obliczana jest wielkość Fidelity w odmianie obciętej, ale znanym obwodem od wyznaczenia stopnia podobieństwa dwóch stanów jest też tzw. SWAP-Test, wobec tego czy jest możliwe zastosowanie podejścia VQE opracowanego przez Autora do przeprowadzenia SWAP-Testu?
- (P7) W dodatkach znajdują się dwa algorytmy podane w postaci pseudokodu, niestety nie ma komentarza o potencjalnej złożoności obliczeniowej. Zasadne byłoby przedstawienie próby jej wyznaczenia w sensie czasu, ale także i złożoności pamięciowej.

### 3.6 Pytanie bezpośrednie do rozprawy

W tej części recenzji znajdują się odpowiedzi na ankietowe pytania krótko charakteryzujące całość recenzowanej rozprawy.

- (PO1) Czy tematyka rozprawy jest aktualna i jak jest związana z rozwojem dyscypliny?  
Tak, informatyka kwantowa to nowoczesny dział informatyki którego dynamiczny rozwój można obserwować w ciągu ostatnich dwudziestu, trzydziestu lat.
- (PO2) Jaki jest problem naukowy podejmowany przez Autora i czy został on trafnie sformułowany?  
Problem naukowy został wskazany w Rozdziale 1 recenzji. Autor rozprawy określił niezbędne hipotezy i wskazał ważność podejmowanego problemu.
- (PO3) Czy Autor rozwiązał postawiony problem i czy wykorzystał w tym celu właściwe metody?  
Tak, zaproponowane metody charakteryzują się lepszym wykorzystaniem kwantowych zasobów obliczeniowych. Zastosowane techniki jak uczenie maszynowe, kodowania obwodów i dobór funkcji kosztu są dobrane właściwie do rozwiązywanego problemu.
- (PO4) Na czym polega oryginalny wkład Autora w dyscyplinę?  
Autor zaproponował hybrydowe rozwiązanie poprzez wykorzystanie m.in. metod uczenia maszynowego celem zwiększenia wydajności implementacji algorytmów typu VQE. Opracowanie metody obliczeniowej, o lepszych cechach niż obecnie znane rozwiązania w obszarze algorytmów typu VQE naturalnie bezpośrednio wpisuje się w obszar dyscypliny.
- (PO5) Jakie jest znaczenie poznawcze oraz znaczenie praktyczne wkładu Autora?  
Zaproponowana metoda bierze pod uwagę obecność szumu w układzie kwantowym, a dostarczone przez Autora repozytorium kodu źródłowego pozwala na pełną odtworzenie proponowanych metod oraz ich zastosowanie do szeregu innych problemów jakie próbuje się rozwiązywać za pomocą metod VQE.
- (PO6) Czy rozprawa świadczy o dostatecznej wiedzy Autora w zakresie nauk technicznych i szczególnej wiedzy w odpowiadającej zakresowi badań?  
Tak, Autor zrealizował wiele eksperymentów w praktyce potwierdzających jakość otrzymanych rezultatów. W przypadku certyfikacji podano także najważniejsze elementy teoretyczne. Zatem Autor rozprawy swobodnie porusza się w obszarze zastosowań algorytmów VQE.

(PO7) Jakie są słabe strony rozprawy?

Praca mimo iż dość obszerna, nie porusza kilku aspektów np. uniwersalność obwodu ansatz. Techniczne aspekty składu tekstu, w kilku przypadkach powinny zostać lepiej rozwiązane.

## 4 Podsumowanie oraz konkluzja końcowa

W rozprawie doktorskiej Pan mgr Akash Kundu podjął się przeprowadzania analizy oraz eksperymentów numerycznych, sprzętowych dotyczących analizy wariacyjnych obwodów kwantowych. Obszar ten jest aktualny i ważny dla dalszego rozwoju technik obliczeń kwantowych, szczególnie przy założeniu obecności szumów. Zatem bezpośrednio wpisuje się w zakres dyscypliny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.

Należy także podkreślić iż dorobek publikacyjny Autora, wskazany w pracy liczy trzynaście pozycji. A prace bezpośrednio odnoszące się do tematyki podejmowanej w rozprawie to praca pt. Enhancing variational quantum state diagonalization using reinforcement learning techniques, New Journal of Physics, Vol. 26, pp. 013034 (2024), praca konferencyjna: Curriculum reinforcement learning for quantum architecture search under hardware errors, ICLR 2024, The Twelfth International Conference on Learning Representations, oraz praca pt. Variational certification of quantum devices; Quantum Science and Technology, Vol. 7, No. 4. W przedstawione w liście publikacji Pan mgr Akash Kundu jako pierwszy Autor występuje siedem razy. Na wskazanej liście znajdują się też odwołania do repozytorium kodu źródłowego.

W mojej ocenie wyniki przedstawione w rozprawie wynoszą wartościową i ciekawą analizę w budowie algorytmów typu VQE oraz oryginalny i wartościowy wkład do dyscypliny naukowej Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.

### 4.1 Konkluzja końcowa

W konkluzji końcowej należy zatem stwierdzić, że rozprawa doktorska Pana mgr Akasha Kundu pt. „Kwantowe wyszukiwanie architektury dla wariacyjnych algorytmów kwantowych wspomagane uczeniem ze wzmocnieniem” (ang. Reinforcement learning-assisted quantum architecture search for variational quantum algorithms) spełnia wymagania ustawowe i wnoszą o jej przyjęcie oraz dopuszczenie do publicznej obrony.

Marek Sawerwain

(dr hab inż. Marek Sawerwain, prof. UZ)