

dr hab. inż. Michał Wroński
NASK-PIB

Recenzja rozprawy doktorskiej

przygotowanej w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia
doktora

Tytuł rozprawy: Neural and Tensor Networks in the Study of Quantum Annealing Processors

Autor rozprawy: mgr inż. Tomasz Śmierzchalski

Dyscyplina naukowa: Informatyka Techniczna i Telekomunikacja

Jednostka prowadząca postępowanie: Instytut Informatyki Teoretycznej i Stosowanej
Polskiej Akademii Nauk

1 Aktualność tematyki rozprawy i jej związek z rozwojem dyscypliny

Podejmowana tematyka dotyczy oceny jakości algorytmów optymalizacyjnych, w tym wyżarzania kwantowego. Z mojego punktu widzenia jest ona bardzo aktualna, ponieważ na dzień dzisiejszy to właśnie wyżarzacze kwantowe posiadają najwięcej kubitów fizycznych, znacznie więcej niż aktualnie dostępne komputery kwantowe ogólnego przeznaczenia. Z tego też względu znajdują one zastosowanie w wielu bardzo zróżnicowanych dyscyplinach, począwszy od logistyki, poprzez analizę rynków finansowych, a na kryptografii kończąc.

W związku z tym, uważam, że tematyka rozprawy ściśle się wiąże z aktualnym rozwojem dyscypliny informatyka techniczna i telekomunikacja.

2 Problem naukowy podjęty przez Autora i jego sformułowanie

Głównym problemem naukowym podjętym w rozprawie jest opracowanie i zastosowanie spójnej metodologii oceny procesorów wyżarzających oraz metod klasycznych i kwantowo inspirowanych rozwiązujących problemy typu Isinga/QUBO. Ocena ta obejmuje nie tylko

jakość znajdowanych rozwiązań, lecz także czas ich uzyskania, różnorodność próbek niskoenergetycznych, koszt termodynamiczny obliczeń oraz wpływ błędów sprzętowych.

Autor w celu poprawnej oceny analizowanych rozwiązań wykorzystuje między innymi sieci neuronowe oraz tensorowe. Znaczną część rozprawy doktorskiej stanowią opisy zastosowania tych narzędzi w praktyce.

3 Ocena rozwiązania postawionego problemu oraz zastosowanych metod

Mgr Śmierzchalski w swojej rozprawie doktorskiej, jak też wskazuje tytuł, skupił się głównie na zastosowaniu sieci neuronowych oraz tensorowych do oceny jakości, przede wszystkim, wyżarzaczy kwantowych.

Zanim Autor przeszedł do metod opisujących rozwiązanie postawionego w rozprawie problemu, przedstawił on dość bogaty wstęp teoretyczny. W szczególności, opisał on:

- w rozdziale 1 - podstawowe pojęcia z zakresu problemu Isinga oraz QUBO;
- w rozdziale 2 - model adiabatyczny obliczeń kwantowych oraz wyżarzanie kwantowe;
- w rozdziale 3 - pakiet SpinGlassPEPS.jl – pakiet realizujący opartą na sieci tensorowej heurystyczną optymalizację problemów typu Isinga;
- w rozdziale 4 - sposób oceny różnych narzędzi służących do rozwiązywania problemów optymalizacyjnych z wykorzystaniem wyżarzania, zarówno kwantowego, jak i realizowanego klasycznie;
- w rozdziale 5 - powiązanie prawdopodobieństwa znalezienia poprawnego rozwiązania z kosztem termodynamicznym;
- w rozdziale 6 - sposób postprocessingu oraz mitygacji błędów;
- w rozdziale 7 - symulację wyżarzania kwantowego dla małych instancji problemów;
- rozdział 8 - podsumowanie pracy.

Analiza rozprawy pozwala stwierdzić, że zaproponowany przez Autora sposób rozwiązania postawionych problemów jest poprawny i odpowiednio uzasadniony. Z mojego punktu widzenia szczególnie ciekawe jest przedstawienie i porównanie ze sobą różnych metod realizacji wyżarzania, zarówno klasycznych, jak i kwantowych. Generalnie, lektura rozprawy pokazuje, że oczywiście część problemów została przez Autora rozwiązana, natomiast otworzyła też „drzwi” do analizy innych problemów, których nie udało się w niniejszej pracy rozwiązać. Przede wszystkim, głównym celem Autora w trakcie oceny jakości narzędzi było określenie, czy rozwiązania skupiają się w niskoenergetycznym spektrum dopuszczalnych rozwiązań. Z drugiej strony, dla szeregu problemów, np. kryptologicznych, jedynie globalnie minimalne rozwiązania mają jakikolwiek sens. Ostatecznie należy

więc wspomnieć, że pomimo, że rozprawa jest ciekawa i rozwiązuje niektóre problemy, to nie stanowi uniwersalnego rozwiązania wszystkich ograniczeń metod wyżarzania, w tym wyżarzania kwantowego. Nie jest to zarzut z mojej strony, ale czyste stwierdzenie faktów.

Przechodząc teraz już do ściśle merytorycznej oceny, to najważniejszym elementem rozprawy jest rzeczywiste porównanie różnych narzędzi pod względem osiągnięcia akceptowalnego poziomu rozwiązań, jak i ich różnorodności. W szczególności, wyniki pokazują, że dla dużych natywnych instancji w topologii Pegasus i Zephyr bardzo silnym punktem odniesienia jest symulowana bifurkacja, podczas gdy D-Wave działa jako szybki heurystyczny sampler, lecz często osiąga plateau błędu aproksymacji. Z kolei pakiet SpinGlassPEPS.jl pełni natomiast rolę dobrze interpretowalnego, topologicznie dopasowanego klasycznego narzędzia, choć jego konkurencyjność czasowa maleje dla największych losowych instancji.

4 Oryginalny wkład Autora w dyscyplinę

Za najważniejsze elementy oryginalnego wkładu Autora należy uznać:

- 1) utworzenie pakietu opartego na sieci tensorowej do optymalizacji i próbkowania algorytmów uruchamianych na QPU, w zależności od wykorzystywanej topologii;
- 2) opracowanie metodyki oceniania jakości różnych algorytmów służących do znajdowania minimum dla problemu Isinga;
- 3) charakteryzację termodynamiczną wyżarzaczy kwantowych;
- 4) opracowanie metod postprocessingu, opartych na uczeniu się przez wzmacnianie;
- 5) stworzenie symulacji wyżarzania kwantowego dla małych instancji problemów optymalizacyjnych.

Wkład ten ma charakter zarówno czysto implementacyjny, jak i bardziej koncepcyjny i teoretyczny. W ogólności, lektura rozprawy ukazuje dużą interdyscyplinarność prowadzonych badań, w szczególności na styku fizyki i informatyki technicznej, co w tym przypadku nie jest zarzutem z mojej strony, ale raczej czymś, co działa na korzyść recenzowanej pracy.

Wkład implementacyjny Autora wykracza poza przygotowanie programu rozwiązującego wybrane instancje modelu Isinga. SpinGlassPEPS.jl stanowi modularny pakiet obliczeniowy, który obejmuje m.in. przekształcanie grafów odpowiadających topologiom sprzętowym do modelu Potts'a, konstrukcję sieci tensorowych typu PEPS, wykonywanie przybliżonych kontrakcji z wykorzystaniem CPU i GPU, heurystyczne przeszukiwanie metodą branch-and-bound oraz analizę stanówiskoenergetycznych. Tak szeroki zakres prac implementacyjnych ma istotne znaczenie praktyczne dla oceny problemów zdefiniowanych na grafach odpowiadających topologiom współczesnych procesorów wyżarzających.

Poza tym należy docenić wkład mgr. Śmierchalskiego w szereg artykułów naukowych, których był współautorem, a które ukazały się w bardzo dobrych czasopismach i na bardzo

dobrych konferencjach. Spośród czterech artykułów wpisujących się w tematykę rozprawy wszystkie mają, według aktualnej ministerialnej listy punktowanych czasopism i konferencji, co najmniej 140 pkt, a jeden z nich jest wart 200 pkt. Uważam, że ten fakt dobrze rokuje w kontekście dalszej kariery naukowej mgr. Śmierzchalskiego.

5 Znaczenie poznawcze i praktyczne wkładu Autora

Wysoko oceniam znaczenie wkładu Autora w kontekście rozwoju metod optymalizacyjnych opartych na wyżarzaniu, w szczególności kwantowym. Na dzień dzisiejszy główną piętą achillesową praktycznych rozwiązań opartych na wyżarzaniu, jak chociażby wyżarzaczy kwantowych D-Wave, jest mocno ograniczona topologia i bardzo krótki czas dekoherencji. Oczywiście jest, że badania mgr. Śmierzchalskiego nie rozwiązują wszystkich tych problemów, ale przede wszystkim pokazują pewne ścieżki, które można obrać, aby uzyskiwać lepsze, dokładniejsze i bardziej stabilne wyniki w trakcie rozwiązywania problemów optymalizacyjnych. Z tego punktu widzenia, rozprawa spełnia swoją zasadniczą rolę.

6 Ocena wiedzy Autora w zakresie nauk technicznych oraz szczegółowej wiedzy w zakresie badań

Jako, że nie miałem do tej pory praktycznie żadnej styczności z mgr. Śmierzchalskim, nie jestem w stanie obiektywnie ocenić jego wiedzy z szeroko pojętej dyscypliny ITiT, gdyż po prostu nie mam do tego narzędzi. Mimo tego, czytając i analizując jego rozprawę doktorską, śmiem stwierdzić, że mgr Śmierzchalski jest dobrze przygotowany do prowadzenia badań w zakresie zastosowania i oceny narzędzi kwantowych w szeroko pojętej informatyce, a także posiada do tego niezbędną wiedzę.

7 Słabe strony rozprawy

Jeżeli chodzi o słabsze strony rozprawy, to jej częściową zaletą, a częściowo problemem, jest podjęcie się bardzo szerokiej tematyki. Świadczy o tym chociażby liczba różnych elementów przedstawionych jako wkład Autora. I o ile szeroko pojęta interdyscyplinarność oraz wkład w różne elementy, często tylko luźno ze sobą związane, jest plusem pracy, z drugiej strony praca traci na tak dużym rozstrzale analizowanej tematyki. Z mojego punktu widzenia chyba lepiej byłoby się skupić na odrobinie mniejszym zakresie badań, ale wykonać je dokładniej i opisać trochę bardziej szczegółowo.

Rozprawa w swojej aktualnej formie, pomimo że jest poprawna metodycznie i często ciekawa, jest zbyt rozproszona tematycznie. Miejscami sprawia ona wrażenie próby objęcia bardzo szerokiego zakresu dotychczasowych prac Autora, co odbywa się częściowo kosztem spójności narracji.

Wobec powyższych uwag, oczekiwałbym od mgr. Śmierzchalskiego w trakcie obrony, odpowiedzi na następujące pytania:

- Którą część rozprawy Autor uważa za swoje najważniejsze osiągnięcie naukowe i dlaczego?
- Jak Autor widzi możliwość mocniejszego powiązania poszczególnych części rozprawy w jedną spójną metodologię oceny wyzarzaczy kwantowych?
- Czy zaproponowane w rozprawie metody można dostosować do problemów, w których znana jest energia minimum globalnego, lecz nie jest znane samo rozwiązanie, a użyteczne są wyłącznie konfiguracje podstawowe, nie zaś rozwiązania jedynie niskoenergetyczne?
- Jak Autor uzasadnia rolę rozbudowanej części implementacyjnej w rozprawie i jej związek z wynikami koncepcyjnymi oraz eksperymentalnymi?

8 Wniosek końcowy

Biorąc pod uwagę przedstawione w rozprawie wyniki, ich oryginalny charakter, zastosowane metody badawcze oraz znaczenie poznawcze i praktyczne pracy, stwierdzam, że przedłożona rozprawa doktorska spełnia wymagania ustawowe stawiane rozprawom doktorskim w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych, w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja.

W związku z powyższym wnoszę o dopuszczenie mgr. Tomasza Śmierzchalskiego do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora.