

Dr hab. inż. Bartłomiej Płaczek, prof. UŚ
Uniwersytet Śląski w Katowicach
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
ul. Będzińska 39, 41-200 Sosnowiec
bartlomiej.placzek@us.edu.pl

Sosnowiec, 04.12.2024 r.

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr Ludmily Botelho pt.
„Teoria i zastosowania hybrydowych algorytmów optymalizacji kwantowo-klasycznej”
(ang.: „Theory and Applications of Hybrid Quantum-Classical Optimization Algorithms”)

Niniejszą recenzję opracowano na zlecenie Instytutu Informatyki Teoretycznej i Stosowanej Polskiej Akademii Nauk, 44-100 Gliwice, ul. Bałtycka 5, reprezentowanego przez Dyrektora IITiS PAN dra hab. inż. Krzysztofa Grochłę z dnia 16.10.2024 r.

1. Uwagi wstępne

Recenzowana rozprawa pani mgr Ludmily Botelho została przygotowana pod kierunkiem promotora dra hab. Jarosława Miszczaka. Dysertacja napisana jest w języku angielskim i składa się ze 120 stron w 6 rozdziałach oraz obszernej bibliografii, zawierającej 132 pozycje literaturowe. Zawartość dwóch pierwszych rozdziałów obejmuje wprowadzenie do podejmowanego tematu (wstęp oraz omówienie najistotniejszych pojęć, koncepcji i problemów informatyki kwantowej). Rozdziały 3 – 5 prezentują rezultaty badań naukowych, które stanowią oryginalny wkład w rozwój dyscypliny. Wyniki przedstawione w rozprawie zostały opublikowane w dwóch artykułach w czasopiśmie z ministerialnej listy czasopism punktowanych, w formie rozdziału w monografii naukowej oraz jako jeden pre-print:

- [1] Akash Kundu, Ludmila Botelho, Adam Glos, *Hamiltonian-oriented homotopy quantum approximate optimization algorithm*. Phys. Rev. A 109, 022611 (2024),
- [2] Ludmila Botelho, Adam Glos, Akash Kundu, Jarosław Adam Miszczak, Özlem Salehi, and Zoltán Zimborás, *Error mitigation for variational quantum algorithms through mid-circuit measurements*, Phys. Rev. A 105, 022441 (2022),
- [3] Ashish Arya, Ludmila Botelho, Fabiola Cañete, Dhruvi Kapadia and Özlem Salehi, *Applications of Quantum Annealing to Music Theory*; In: Miranda, E.R. (eds), *Quantum Computer Music*, Springer, pp. 373-406, (2022),
- [4] Ludmila Botelho and Özlem Salehi, *Fixed interval scheduling problem with minimal idle time with an application to music arrangement problem*, arXiv: 2310.14825, (2023).

2. Czy tematyka rozprawy jest aktualna i jak jest związana z rozwojem dyscypliny?

Tematyka rozprawy dotyczy aktualnej problematyki badawczej, związanej z zastosowaniem tzw. komputerów kwantowych NISQ (ang. Noisy Intermediate-Scale Quantum) do rozwiązywania zadań optymalizacji kombinatorycznej. W ramach tej tematyki, szczególnie interesujące są możliwości wykorzystania rozwijanych obecnie hybrydowych klasyczno-

kwantowych algorytmów wariacyjnych (ang. Variational Quantum Algorithms, VQAs) oraz metod wyżarzania kwantowego (ang. Quantum Annealing). W przedstawionej do recenzji pracy Autorka podejmuje kilka ważnych problemów szczegółowych, które wpisują się we wspomniane wyżej, szerszy obszar problematyki badawczej. Pierwszym problemem szczegółowym jest redukcja błędów, które występują w przypadku zastosowań współczesnej technologii NISQ i mają istotny wpływ na jakość rozwiązań uzyskiwanych za pomocą kwantowych algorytmów wariacyjnych. Drugi problem szczegółowy dotyczy potrzeby udoskonalania istniejących kwantowych algorytmów wariacyjnych dedykowanych do zastosowań w optymalizacji kombinatorycznej, które bazują na adiabatycznej ewolucji stanu układu kwantowego i są wrażliwe na minima lokalne. Trzeci problem szczegółowy polega na zastosowaniu metod kwantowego wyżarzania do generowania muzyki i redukcji utworów muzycznych, co wymaga sformułowania odpowiednich problemów optymalizacji binarnej QUBO (ang. Quadratic Unconstrained Binary Optimization). O aktualności podejmowanej w rozprawie problematyki badawczej świadczy fakt, że stanowi ona temat coraz liczniejszych publikacji naukowych. Zaproponowanie oryginalnych rozwiązań wspomnianych wyżej problemów szczegółowych niewątpliwie wiąże się z rozwojem dyscypliny informatyka techniczna i telekomunikacja.

3. Jaki jest problem naukowy podejmowany przez Autorkę i czy został on trafnie sformułowany?

Podejmowane w rozprawie problemy dotyczą zastosowania hybrydowych (kwantowo-klasycznych) systemów komputerowych do rozwiązywania złożonych obliczeniowo problemów optymalizacji kombinatorycznej, takich jak problem maksymalnego przekroju, problem komiwojażera i harmonogramowania zadań. Niewątpliwie wykorzystanie obliczeń kwantowych do rozwiązywania tego typu problemów ma duży potencjał aplikacyjny, jednak wymaga pokonania szeregu barier i ograniczeń. W tym kontekście sformułowane problemy szczegółowe wiążą się z potrzebą eliminacji wpływu błędów występujących w przypadku technologii NISQ, jak również modyfikacji klasycznych algorytmów optymalizacyjnych w celu dostosowania ich do wymagań związanych z podejściem hybrydowym oraz do cech i ograniczeń tej technologii. Jeżeli spojrzymy z bliższej perspektywy na problemy szczegółowe, którym poświęcono w rozprawie rozdziały 3 - 5, wówczas możemy dostrzec, że nie są one ze sobą ściśle powiązane i dotyczą różnych aspektów zastosowania obliczeń hybrydowych w optymalizacji kombinatorycznej. Niemniej jednak, każdy z tych problemów został jasno zdefiniowany, precyzyjnie opisany i uzasadniony w odniesieniu do aktualnego stanu wiedzy i techniki. Fakt, że problemy zostały trafnie sformułowane potwierdza również zamieszczona w pracy analiza literatury.

4. Czy Autorka rozwiązała postawiony problem i czy wykorzystała w tym celu właściwe metody?

Dla każdego z podejmowanych problemów zaproponowano w pracy autorską metodę rozwiązania. Dokonano również oceny zaproponowanych metod w drodze eksperymentów obliczeniowych, realizowanych z wykorzystaniem odpowiednich technik symulacyjnych lub fizycznych zasobów sprzętowych. Ocena proponowanej metody polegała na porównaniu jakości wyników uzyskanych za pomocą tej metody z rezultatami otrzymanymi w przypadku zastosowania reprezentatywnych metod znanych z literatury. Jakość wyników była oceniana z uwzględnieniem obiektywnych kryteriów, dobranych adekwatnie do danego problemu. Dla problemu redukcji błędów w układach realizujących kwantowe algorytmy wariacyjne (w rozdziale 3) zaproponowano metody post-selekcji pośrednich wyników obliczeń, bazujące na

klasycznych metodach detekcji błędów dla kodowania binarnego. Przedstawiono strategię post-selekcji polegającej na detekcji nieprawidłowych kombinacji bitów dla wybranych sposobów kodowania, które są często wykorzystywane w algorytmach optymalizacji kombinatorycznej, tj. kodowania k-hot, one-hot, domain-wall, naturalnego kodu binarnego i kodu Graya. Zaproponowana metoda dla kodowania one-hot została zastosowana do rozwiązania problemu komiwożera przy pomocy algorytmu Quantum Alternating Operator Ansatz (QAOA+). W trakcie eksperymentów wykazano, że przedstawiona metoda pozwala poprawić rezultaty optymalizacji względem zaczerpniętej z literatury metody redukcji błędów, która nie uwzględnia post-selekcji pośrednich wyników obliczeń.

W rozdziale 4 zaproponowano metaheurystyczne podejście do problemu optymalizacji kombinatorycznej, które jest modyfikacją istniejącego kwantowego algorytmu wariacyjnego (Quantum Approximate Optimization Algorithm - QAOA). Przedstawione podejście stanowi kombinację algorytmu QAOA z klasyczną strategią optymalizacji homotopijnej. Opracowaną metodę zastosowano do poszukiwania maksymalnego przekroju w grafach. Wyniki tych prób potwierdziły, że metoda pozwala osiągnąć lepsze rezultaty w porównaniu do znanych algorytmów (QAOA i T-QAOA).

Rozdział 5 został poświęcony problemowi zastosowania kwantowych algorytmów optymalizacji kombinatorycznej do generowania muzyki i redukcji utworów muzycznych. Zaprezentowane podejście umożliwia przedstawienie zadania generowania muzyki w postaci problemu programowania całkowitoliczbowego. Wykazano również, że zagadnienie redukcji utworów może zostać przekształcone do postaci problemu harmonogramowania zadań. Sformułowane w ten sposób problemy optymalizacyjne mogą zostać rozwiązane przy użyciu dostępnych wyźarzaczy kwantowych. Opisane w pracy wyniki potwierdziły możliwość praktycznej realizacji zadań generowania muzyki i redukcji utworów w zaproponowanym podejściu, przy użyciu systemu D-Wave do wyźarzania kwantowego.

Na podstawie przedstawionych w rozprawie rezultatów należy oczekiwać, że proponowane rozwiązania mogą być przydatne w wybranych zastosowaniach hybrydowych algorytmów optymalizacji kwantowo-klasycznej.

5. Na czym polega oryginalny wkład Autorki w dyscyplinę?

Rezultaty badań naukowych opisane w recenzowanej rozprawie zostały przedstawione jako prace współautorskie w publikacjach wymienionych w pierwszym punkcie niniejszej recenzji. Indywidualny wkład Autorki można wskazać na podstawie deklaracji zawartych w dodatkowym dokumencie pt. „List of Publications and Author Contributions”, z którego wynika, że w ramach przygotowania publikacji [1] pani Botelho brała udział w formułowaniu koncepcji modyfikacji algorytmu QAOA i wyborze metod badawczych, była odpowiedzialna za przygotowanie kodu oprogramowania i przeprowadzenie eksperymentów obejmujących symulacje obwodów kwantowych z wykorzystaniem języka programowania Julia. W przypadku badań opisanych w artykule [2] Autorka opracowała przegląd literatury, projektowała obwody kwantowe i brała udział w pracach nad oprogramowaniem potrzebnym do wykonania eksperymentów. Pani Botelho jest także współautorką koncepcji badań i metod generowania muzyki, przedstawionych w publikacji [3]. Ponadto, jej wkład polegał na implementacji algorytmów w języku Python. Doktorantka jest główną autorką koncepcji redukcji utworów muzycznych, która została przedstawiona w pracy [4]. W ramach tej pracy pani Botelho odpowiadała za dobór metod, projektowanie algorytmów, oprogramowanie, przygotowanie i przeprowadzenie eksperymentów, w tym wykonanie obliczeń z użyciem wyźarzaczy kwantowych D-Wave.

Na podstawie przedstawionych wyżej informacji można stwierdzić, że najistotniejszym osiągnięciem Autorki, stanowiącym wkład w dyscyplinę informatyka techniczna i telekomunikacja, jest współautorstwo modyfikacji kwantowego algorytmu wariacyjnego, bazującej na wykorzystaniu strategii optymalizacji homotopijnej. Z punktu widzenia rozwoju dyscypliny ważne znaczenie mają również tworzone przez Autorkę implementacje algorytmów, które w formie kodów źródłowych zostały udostępnione innym badaczom w otwartych repozytoriach.

Podsumowując, scharakteryzowany powyżej oryginalny wkład Autorki w dyscyplinę oceniam jako dobry.

6. Jakie jest znaczenie poznawcze oraz znaczenie praktyczne wkładu Autorki?

Znaczenie poznawcze wkładu Autorki wynika ze sformułowania szeregu interesujących wniosków dotyczących ograniczeń systemów obliczeń kwantowych w erze NISQ i możliwości ich zastosowania w rozwiązywaniu problemów NP-trudnych. Rezultaty prac Autorki obejmują elementy nowej wiedzy w zakresie zaproponowanych modyfikacji algorytmów oraz ich skuteczności obserwowanej podczas eksperymentów. Przedstawione w pracy metody redukcji błędów w hybrydowych systemach kwantowo-klasycznych i algorytmy optymalizacji, w przyszłości mogą osiągnąć potencjał aplikacyjny w związku z przewidywanym rozwojem technologii kwantowych. Istotną wartość praktyczną mają opracowane modele obwodów kwantowych, implementacje algorytmów (m. in. na obecnie dostępnych komputerach kwantowych) oraz udostępnione publicznie kody źródłowe wytworzonego oprogramowania. Wskazane wyżej rezultaty dotychczasowych prac Autorki mogą znaleźć zastosowanie w wielu innych pracach ukierunkowanych na zastosowania praktyczne.

7. Czy rozprawa świadczy o dostatecznej wiedzy Autorki w zakresie nauk technicznych i w szczególowej wiedzy w odpowiadającej zakresowi badań?

Przygotowując rozprawę Autorka wykazała się wiedzą w zakresie nauk technicznych, zwłaszcza w obszarze związanym z tematyką badań nad hybrydowymi kwantowo-klasycznymi algorytmami optymalizacji kombinatorycznej. W drugim rozdziale rozprawy Doktorantka opracowała obszerny wstęp teoretyczny, omawiający zagadnienia złożoności obliczeniowej algorytmów, podstaw teorii grafów, formalizmów stosowanych w opisie problemów optymalizacyjnych, optymalizacji kombinatorycznej, podstaw informatyki kwantowej i kwantowych algorytmów optymalizacji. Doktorantka zaimplementowała również szereg algorytmów przygotowując oprogramowanie na potrzeby eksperymentów opisanych w pracy. W tym zakresie Autorka wykazała się bardzo dobrą znajomością zaawansowanych narzędzi programistycznych. Całościowo, przygotowanie rozprawy doktorskiej potwierdza dobry poziom wiedzy Autorki z zakresu nauk technicznych i szczególowej znajomości problematyki hybrydowych obliczeń kwantowo-klasycznych.

8. Jakie są słabe strony rozprawy?

Jak wykazano w punkcie 2 niniejszej recenzji, problemy badawcze, którym poświęcono w rozprawie rozdziały 3 – 5 dotyczą różnych aspektów zastosowania obliczeń hybrydowych w optymalizacji kombinatorycznej i nie są ze sobą ściśle powiązane. Zdaniem recenzenta każdy z tych problemów mógłby być przedmiotem odrębnej rozprawy doktorskiej, co pozwoliłoby na znacznie szersze opracowanie części eksperymentalnej i dokonanie wnikliwej oceny różnych wariantów proponowanych rozwiązań. Autorka zdecydowała się przedstawić w swojej rozprawie kilka pomysłów dotyczących rozwiązywania różnych problemów szczegółowych, co z jednej strony świadczy o szerokim rozpoznaniu podejmowanej

problematyki, jednak z drugiej strony powoduje, że zakres prezentowanych w pracy wyników eksperymentalnych i ich dyskusja są ograniczone i mogą budzić niedosyt. Na przykład w podrozdziale 4.5 wyniki eksperymentów, dotyczące połączenia algorytmu QAOA z klasyczną strategią optymalizacji homotopijnej, prezentowane są wraz z dyskusją na niespełna trzech stronach. Jednocześnie należy zauważyć, że istnieje wiele możliwych wariantów prezentowanego podejścia m. in. w zakresie doboru funkcji g_1 i g_2 (wzór 4.5). Autorka w tym kontekście przeprowadziła eksperymenty tylko dla jednego prostego wariantu, przyjmując, że $g_1 = 1 - \alpha$ i $g_2 = \alpha$.

Po lekturze rozprawy można również sformułować kilka innych uwag.:

Na stronie 70 Autorka odwołuje się do nieistniejącego załącznika („Details of the experiment can be found in Appendix....”).

Na stronie 10 wzór (2.3) nie jest w pełni poprawny, ponieważ nie opisuje w jakim zbiorze poszukiwane jest minimum.

Na stronie 31 we wzorze (2.10) zamiast $d|101\rangle$ powinno być $d|10\rangle$.

W kilku miejscach brakuje numerów rysunków, np. na stronie 57 w ostatnim akapicie: „A simplified version of the circuit is visualized in Fig....”.

W pracy występują nieliczne błędy w pisowni, np. „The problem can been see as” (str. 29), „We next subsections we” (str. 30), „this ensable os given by” (str. 31), “This argument is complies with” (str. 72), „We empiric analysed the impact” (str. 77), „we will defining a model” (str. 82).

Niektóre sformułowania błędnie sugerują, że czytelnik ma do czynienia z artykułem a nie rozprawą lub rozdziałem rozprawy, np. „throughout the paper” (str. 70), „In the article” (str. 73).

Przedstawione powyżej uwagi krytyczne nie negują pozytywnej oceny merytorycznej recenzowanej rozprawy.

9. Wnioski końcowe recenzji

Pani mgr Ludmila Botelho w rozprawie doktorskiej pt. „Theory and Applications of Hybrid Quantum-Classical Optimization Algorithms” przedstawiła oryginalne rozwiązania problemów naukowych. Recenzowana rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Autorki w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja. Pani Ludmila Botelho wykazała się również umiejętnością samodzielnego prowadzenia pracy naukowej, w szczególności w zakresie badań nad hybrydowymi kwantowo-klasycznymi algorytmami optymalizacji kombinatorycznej. W związku z powyższym, opiniowana rozprawa spełnia wymagania obowiązujących przepisów prawa. Wnoszę o jej przyjęcie oraz dopuszczenie do dalszych etapów przewodu doktorskiego.