

Recenzja

rozprawy doktorskiej mgr. Konrada Jałowieckiego pt.: „Walidacja i testowanie porównawcze technologii kwantowego wyżarzania”

Podstawa opracowania: Uchwała Rady Naukowej Instytutu Informatyki Teoretycznej i Stosowanej Polskiej Akademii Nauk nr RN/05/2024 z dnia 24.04.2024 roku.

Dokumentację merytoryczną do sporządzenia recenzji stanowi egzemplarz rozprawy doktorskiej Pana mgr. Konrada Jałowieckiego pt. „*Validation and benchmarking of quantum annealing technology*”.

Promotorem rozprawy jest dr hab. Bartłomiej Gardas profesor instytutu, a promotorem pomocniczym dr hab. inż. Łukasz Paweł profesor instytutu.

1. Uwagi ogólne o doborze tematu rozprawy

Recenzowana praca będąca przedmiotem rozprawy dotyczy problematyki doboru efektywnej strategii walidacji i testowania współczesnej generacji wyżarzaczy kwantowych firmy D-Wave.

W tym celu mgr Konrad Jałowiecki proponuje analizę dwóch algorytmów służących do rozwiązywania rzeczywistych problemów oraz sprawdza, ich skuteczność na obecnej generacji wyżarzaczy kwantowych. Doktorant postanowił w tym celu:

- wykorzystać algorytm pozwalający na rozwiązywanie dynamiki kwantowych układów, a de facto dowolnych układów dynamicznych;
- przeanalizować i zastosować algorytm służący rozwiązywaniu pewnego podzbioru kolejowych problemów dyspozytorski.

Uważam, że podjęty przez mgr. Konrada Jałowieckiego problem badawczy w rozprawie jest w pełni uzasadniony i aktualny, a samo sformułowanie tematu rozprawy za właściwe.

Rozprawa w całości składa się ze 118 stron, zasadnicza część pracy to 102 strony w języku angielskim. Dodatkowo praca zawiera streszczenie w języku angielskim, streszczenia w jęz. polskim, bibliografię, 3 załączniki oraz wyszczególnione 5 artykułów naukowych powiązanych tematycznie, będących podstawą dysertacji. Spis materiałów

źródłowych zawiera 102 pozycje, nie uwzględniając bogatej bibliografii użytej w artykułach.

2. Analiza struktury rozprawy – podział treści na rozdziały

Recenzowana rozprawa składa się z dwóch części, rozwiniętego podsumowania będącego syntetycznym opisem problematyki podjętej w pracy i 5 artykułów powiązanych tematycznie, w których omawiane są szczegółowo problemy badawcze.

Zasadnicza część pracy składa się z 7 rozdziałów, druga zawiera 5 artykułów powiązanych tematycznie:

1. K. Jałowiecki, A. Więckowski, P. Gawron and B. Gardas, Parallel in time dynamics with quantum annealers, *Scientific Reports* 10, 13534 (2020)
2. M. M. Rams, M. Mohseni, D. Eppens, K. Jałowiecki and B. Gardas, Approximate optimization, sampling and spin-glass droplet discovery with tensor networks, *Physical Review E* 104, 025308 (2021)
3. K. Jałowiecki, M. M. Rams and B. Gardas, Brute-forcing spin-glass problems with CUDA, *Computer Physics Communications* 260, 107728 (2021)
4. K. Domino, M. Koniorczyk, K. Krawiec, K. Jałowiecki, S. Deffner and B. Gardas, Quantum annealing in the NISQ era: railway conflict management, *Entropy* 25, 191 (2023)
5. K. Jałowiecki and Ł. Paweł, Omnisolver: An extensible interface to Ising spin-glass and QUBO solvers, *SoftwareX* 24, 101559 (2023)

Główną część pracy rozpoczyna **rozdział 1** „*Introduction*” (4 str.), w którym Autor rozprawy przedstawił przesłanki podjęcia tematyki badań oraz opis zagadnień omawianych w pracy. Doktorant omawia wpływ rewolucji cyfrowej na naukę, szczególnie fizykę obliczeniową. Zwraca uwagę na wyzwania związane z symulacją systemów kwantowych na komputerach klasycznych oraz na rolę obliczeń kwantowych jako potencjalnego rozwiązania. Omówiono algorytmy kwantowe, takie jak faktoryzacja Shora i przeszukiwanie Grovera, oraz pojawienie się sprzętu kwantowego, ale zaznaczono również ograniczenia obecnych urządzeń. Autor podsumowuje ewolucję obliczeń kwantowych, od teorii po praktykę, podkreślając ciągłe dążenie do wykorzystania ich potencjału.

W **rozdziale 2** (11 str.) zatytułowanym „*Ising model and QUBO problem*” mgr Konrad Jałowiecki wyjaśnił pojęcia dotyczące modelu Isinga i jego zastosowań w optymalizacji binarnej. Autor rzetelnie definiuje pojęcia, omawia kluczowe problemy i prezentuje odpowiednie algorytmy. Szczególnie docenić należy skupienie się na aspektach obliczeniowych. Struktura i selekcja materiału świadczą o głębokim zrozumieniu tematu

przez autora oraz jego znajomości literatury z dziedziny. Prezentacja materiału jest jasna, zwięzła i przystępna dla osób bez pogłębionej wiedzy z zakresu fizyki. Rozdział stanowi dobry punkt wyjścia do dalszych studiów nad modelami Isinga i ich zastosowaniami.

Rozdział 3 (22 str.) to „*Quantum annealing and GPU computing*”. Rozdział trzeci analizuje techniczne aspekty wykorzystanych technologii, w tym kwantowych wyżarzaczy firmy D-Wave oraz architektury CUDA procesorów NVIDIA. Autor przedstawia ewolucję topologii wyżarzaczy D-Wave, zwracając uwagę na ich stopień skomplikowania oraz konieczność dodatkowego mapowania z uwagi na fizyczne defekty. Omawia także architekturę CUDA, która umożliwia bardziej wydajne rozwiązywanie problemów numerycznych. Mgr Konrad Jałowiecki wprowadza czytelnika w adiabaticzne obliczenia kwantowe, opisując komputery kwantowe D-Wave. Pomimo pewnej nadmiarowości szczegółów, rozdział ten świadczy o dogłębnym zrozumieniu tematu przez autora oraz jego gruntownej analizie literatury.

W **rozdziale 4** (9 str.) zatytułowanym „*Simulating dynamics of quantum systems using quantum annealing*” porusza interesujący problem symulacji dynamiki kwantowej na wyżarzaczach kwantowych. Autor prezentuje nowatorską metodę opartą na zegarze Feynmana, która pozwala na sformułowanie problemu jako zadanie optymalizacyjne. Niestety, metoda ta ma znaczny narzut obliczeniowy i jest obecnie ograniczona do prostych układów. Autor rzetelnie opisuje ograniczenia obecnych kwantowych wyżarzaczy i wskazuje na potencjalne źródła błędów w wynikach symulacji. Brakuje analizy skalowania metody, co utrudnia ocenę jej przydatności w przypadku bardziej złożonych układów. Autor sugeruje, że metoda ta może nie mieć praktycznych zastosowań, ale jednocześnie podkreśla jej wartość jako narzędzia do analizy porównawczej.

Rozdział 5 (9 str.) zatytułowany „*Solving spin-glass problems using tensor networks*” opisuje klasyczny algorytm oparty na sieciach tensorowych do znajdowania widm niskoenergetycznych szkieł spinowych Isinga, polegający na reprezentacji rozkładu Boltzmana przez sieć tensorową, zwłaszcza przez Projected Entangled Pair States (PEPS). Doktorant prezentuje nowatorskie podejście do poszukiwania stanu podstawowego modelu Isinga z wykorzystaniem sieci tensorowych. Algorytm PEPS okazuje się być konkurencyjny, a w niektórych przypadkach nawet przewyższać klasyczne metody i kwantowe wyżarzacze pod względem dokładności i skalowalności. Autor rzetelnie opisuje działanie algorytmu PEPS, podkreślając jego zalety, takie jak zdolność do opisywania dużej degeneracji stanu podstawowego. Wyniki testów porównawczych potwierdzają skuteczność algorytmu PEPS w rozwiązywaniu problemów z modelem Isinga, zarówno na zestawach kropelek, jak i na zwodniczych instancjach klastrów. Algorytm

PEPS wykorzystuje nowoczesne techniki sieci tensorowych, co czyni go obiecującym narzędziem do rozwiązywania innych problemów optymalizacyjnych.

W rozdziale 6 (19 str.) zatytułowanym „*Brute-forcing spin-glass problems with CUDA*” Autor zgłębia rozwiązania typu brute-force dla problemów szkła spinowego, wykorzystując wcześniej wprowadzoną równoległą architekturę CUDA. Wyniki osiągnięte w tym rozdziale są równie imponujące jak te przedstawione w poprzednim. Algorytm autora efektywnie odnajduje stan podstawowy instancji problemów o rozmiarze $N = 50$ w ciągu godziny na standardowych GPU i w kilka minut na GPU klasy serwerowej. Aby osiągnąć ten wynik, konieczne jest przeglądanie 250 stanów oraz obliczanie energii dla każdej konfiguracji. Autor szczegółowo opisuje swoje podejście do przeglądania wszystkich konfiguracji. Ponadto, algorytm służy do oceny wydajności solvera MPS, który również został opisany w pracy. W kolejnych ulepszeniach algorytmu zawiera się optymalizacja oceny energii. Zamiast obliczać energię dla każdej konfiguracji od podstawy, autor wykorzystuje fakt, że jeśli dwie konfiguracje różnią się tylko jednym bitem, to energia drugiej konfiguracji może być znacznie efektywniej uzyskana z pierwszej. Taka strategia, wraz z innymi usprawnieniami technicznymi, takimi jak zastosowanie kodu Graya do różnych układów konfiguracji, znacząco skraca czas obliczeń i pozwala na radzenie sobie z bardzo dużymi rozmiarami systemów. Dodatkowo, w tym samym rozdziale autor szczegółowo omawia implementację na procesory graficzne metody wyszukiwania wyczerpującego stanu podstawowego modelu Isinga, będącej treścią publikacji [3]. Wybór tego koncepcyjnie najprostszego algorytmu wynika z jego trywialnego paralelizmu, co pozwala na maksymalne wykorzystanie potencjału masywnie równoległej architektury. Główną zaletą tej metody jest gwarancja sukcesu w odnalezieniu rozwiązania, chociaż kosztem ograniczenia rozmiaru układu. W związku z tym, optymalna implementacja tego algorytmu ma duże znaczenie praktyczne dla walidacji i testowania nowych metod rozwiązywania modelu Isinga.

Rozdział 7 (22 str.) zatytułowany „*Application to railway conflict management*” prezentuje dyskusję zastosowania wcześniej opisanych metod w kontekście zarządzania ruchem kolejowym na trasach Nidzica – Olsztynek oraz Goleiszów – Wisła Uzdrowisko przez PKP Polskie Linie Kolejowe. Szczególnie interesujące jest wykorzystanie kwantowego wyźarzacza D-Wave, które zostało przeanalizowane w publikacji [4]. Autor wykazał, że ówczesna generacja kwantowych wyźarzaczy nie była w stanie osiągnąć optymalnego rozwiązania tego problemu. Jednakże mgr Konrad Jałowiecki dowiódł, że nowsze generacje kwantowych wyźarzaczy D-Wave są w stanie generować optymalne rozwiązania problemów, z którymi nie radziły sobie starsze modele. Dodatkowo, autor

porównał wydajność kwantowego wyżarzacza z klasycznymi algorytmami i uzasadnił, że oba rodzaje narzędzi mogą dostarczać wartościowych rezultatów.

3. Ocena merytoryczna rozprawy

Dużą zaletą rozprawy jest jej użyteczny charakter, co jest bardzo ważne przy tego typu osiągnięciach. Zaproponowane i przedstawione przez Doktoranta podejście do problematyki doboru efektywnej strategii walidacji i testowania współczesnej generacji wyżarzaczy kwantowych firmy D-Wave zostało potwierdzone przez ich praktyczne wykorzystanie. Pan mgr Konrad Jałowiecki dokładnie i wnikliwie opisał przeprowadzone przez siebie badania oraz dokonał szerokiej prezentacji ich wyników. Podjęty w rozprawie problem jest ważny zarówno z naukowego, jak i inżynierskiego punktu widzenia.

Na podstawie przeprowadzonej analizy rozprawy uważam, iż mgr Konrad Jałowiecki porusza się swobodnie w badanej tematyce, wykazuje umiejętność samodzielnego zdefiniowania problemu naukowego i prowadzenia badań, interpretacji i uzasadnienia wyników. Zaprezentowane w rozprawie rozważania potwierdziły wysoką dojrzałość naukową Doktoranta.

Za najważniejsze osiągnięcia Autora rozprawy uważam:

1. Opracowanie metody wykorzystującej sieci tensorowe do poszukiwania stanu podstawowego modelu Isinga, która osiągała lepsze wyniki od kwantowego wyżarzacza D-Wave - w określonych przypadkach.
2. Implementacja na procesory graficzne metody wyszukiwania wyczerpującego stanu podstawowego modelu Isinga, co umożliwiło wykorzystanie współbieżności i osiągnięcie maksymalnej korzyści z masywnie równoległej architektury.
3. Zastosowanie wcześniej wprowadzonych metod do rozwiązania problemów zarządzania ruchem kolejowym, co pokazało praktyczne zastosowanie opracowanych technik w realnych scenariuszach.

Wszystkie wymienione elementy rozprawy stanowią o dużej jej wartości merytorycznej. Zastrzeżenie może budzić jedynie zastosowany przez Autora układ rozprawy, jest on dość niefortunny, w pracy nie ma jasno postawionej tezy i dobrze zarysowanych pytań badawczych. Oczywiście można starać się je wyłuskać z analizowanego tekstu, ale wydaje się, że powinny one być jasno nakreślone na wstępie rozprawy. ***„Czy te hałaśliwe urządzenia mogą być już wykorzystywane do rozwiązywania rzeczywistych problemów? I jak podejść do sprawdzenia, czy tak właśnie jest? W niniejszej rozprawie próbujemy odpowiedzieć na te pytania, skupiając się wyłącznie na konkretnym typie komputera kwantowego, a mianowicie komputerach kwantowych, a mianowicie wyżarzaczach kwantowych D-Wave”.***

Podsumowując ocenę merytoryczną dysertacji Pana mgr. Konrada Jałowieckiego stwierdzam, że opracowanie materiału, a także forma przeprowadzonej analizy i przyjęta metodyka badań są dobre i właściwe dla tego rodzaju prac. Otrzymane wnioski z badań stanowią w znacznej części oryginalny wkład Autora. Doktorant wykazał się ogólną wiedzą teoretyczną, bardzo dobrą znajomością przedmiotu badań oraz opanowaniem metod eksperymentalnych i analitycznych stosowanych w dyscyplinie *Informatyka Techniczna i Telekomunikacja*.

4. Uwagi szczegółowe

Analiza tekstu rozprawy rodzi kilka pytań szczegółowych, które nasunęły się w trakcie czytania. Odpowiedzi na pytania oczekuję podczas publicznej obrony:

1. Jakie są zalety i wady stosowania sieci tensorowych do poszukiwania stanu podstawowego modelu Isinga w porównaniu z innymi metodami?
2. Jakie są ograniczenia skalowania metody wyszukiwania wyczerpującego stanu podstawowego na procesorach graficznych?
3. Jeśli chodzi o algorytm PEPS (rozdział 5), Autor stwierdza, że przewyższa on inne metody pod względem opisywania dużej degeneracji stanu podstawowego. Czy możesz wyjaśnić, jak znacząca jest ta przewaga w praktyce (np. o jaki rząd wielkości)?
4. W rozdziale 7 Autor wspomina, że wydajność komputerów D-Wave różni się w zależności od urządzenia. Czy możesz wyjaśnić czynniki, które przyczyniają się do tej zmienności?

W przedstawionej pracy wraz z bardzo wysoką oceną pod względem zawartości merytorycznej idzie w parze bardzo dobry poziom edytorski, chociaż zdążają się drobne błędy i lapsusy językowe np., strona IX i X rozprawy – „*wżaracze*”.

5. Wniosek końcowy oceny rozprawy

Uważam, że przedstawiona do recenzji rozprawa, mimo drobnych uwag krytycznych, głównie odnoszących się do sposobu prezentacji, które nie podważają zasadniczego dorobku Doktoranta, została wykonana na bardzo wysokim poziomie merytorycznym.

Dokonując oceny całości rozprawy, wyrażam opinię, iż stanowi ona oryginalne rozwiązanie problemu naukowego, potwierdza zdolność do analitycznego spojrzenia na rozpatrywany problem, umiejętność samodzielnego prowadzenia badań naukowych oraz wskazuje na odpowiedni poziom wiedzy teoretycznej jej Autora jak i umiejętności praktyczne w dyscyplinie naukowej Informatyka Techniczna i Telekomunikacja, w której mieszczą się zagadnienia objęte rozprawą.

Reasumując, stwierdzam, że recenzowana rozprawa mgr. Konrada Jałowieckiego pt. *„Walidacja i testowanie porównawcze technologii kwantowego wyżarzania”*, spełnia wymagania art. 13 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. „o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” (Dz. U. 2003 Nr 65 poz.595, z późn. zm.) i Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.) oraz mieści się w dyscyplinie Informatyka Techniczna i Telekomunikacja.

Na tej podstawie stawiam zatem wniosek o dopuszczenie mgr. Konrada Jałowieckiego do dalszych etapów przewodu doktorskiego, w tym do publicznej obrony.

/Paweł Gepner/