

ЕКСПЕРТНА КАРТА

за научна оценка на изпълнението на проект за научни изследвания,
финансиран от ФНИ

ДОГОВОР №:	КП-06-ДВ-5 от 16.12.2019 г. за финансиране на научен проект REINFORCE по ННП “ВИХРЕН
ТЕМА:	Обучение с утвърждение за контрол на неравновесна квантова материя
РЪКОВОДИТЕЛ:	Д-р Марин Георгиев Буков
БАЗОВА ОРГАНИЗАЦИЯ:	Физически Факултет на Софийски Университет (СУ)
ЕТАП НА ИЗПЪЛНЕНИЕ:	Финален след прекратяване на договора
ОЦЕНКА ЗА ИЗПЪЛНЕНИЕ НА ЕТАПА:	Много добър

1. Оценка на изпълнението на дейностите по работни пакети за съответния период на проекта.

Първоначално проектът е планиран с продължителност 5 години, като за дата на стартиране на изследователската работа по проекта се приема датата 01.10.2020 г. Проектът е прекратен с решение на ИС на ФНИ на 24.06.2021 г., което означава, че отчетаният период обхваща 8 месеца и 24 дена.

Изследователският план в проекта включва анализ на 5 казуса с нарастваща сложност: 1) бърз контрол на чисти и смесени състояния в квантови системи с няколко нива при наличие на шум с помощта на reinforcement learning; 2) оптимален контрол на състоянията в модели с фермионна ивица; 3) разплитане, охлаждане и нагряване на състояния, преминаване през критични квантови точки и т.н.; 4) управление на състоянията в нелинейни и хаотични системи; 5) управление на полу-класически системи с много тела. За да се осигури изпълнението на плана за всеки казус се въвежда стратегия от 3 стъпки, представляващи разглеждане на системи, независещи от времето, системи без ограничения в спектралната област и спектрално-ограничени системи. Работата е организирана в два работни пакета.

Работен пакет 1 „Дизайн и оценяване на алгоритми с reinforcement learning за контрол на системи в неравновесни условия“ се състои от три дейности, като първите две включват по две задачи, а третата – три задачи. Дейност 1.1 е предвидена за изпълнение през първата година,

а дейност 1.2 предвижда работа през първите две години. Дейност 1.3 е била оставена за третата и четвъртата години.

Работен пакет 2 „Аналитични подходи към системи с много тела“ се състои от две дейности, които е трябвало да стартират през втората година.

Проектът е следвало да се изпълнява от ръководителя на колектива, един пост-докторант и двама докторанти. По план през първите 6 месеца е следвало да бъдат назначени пост-докторантът и двамата докторанти. Предвид липсата на подобни назначения (възможно заради пандемията Ковид-19), проектът е бил прекратен с решение на ИС на ФНИ през втората година (от 25.06.2020 г.). Трябва да се отбележи, че в научната работа по проекта са участвали един гост-докторант от Okinawa Institute of Science and Technology, два студента първи и втори курс от ФМИ и два студента втори и трети курс от ФзФ на СУ „Кл. Охридски“, като тези участници са работили на доброволни начала.

За времетраенето на проекта е свършена следната работа:

По Работен пакет 1 по дейност 1.2А е завършена реализацията на софтуерния код DeepQ-Learning и са решени задачи по дейност 1.2.В в областта на PolicyGradient методи. По дейност 1.3.А са разработени хибридни алгоритми за оптимален контрол и reinforcement learning на базата на квантово апроксимирани оптимизационни алгоритми.

По работен пакет 2 са изследвани периодично задвижвани много-частични квантови системи. Завършено е изследване на приложението на невронни мрежи като вариационни квантови състояния в двуизмерен модел на Хайзенберг върху квадратна решетка, Започнало е разработка на методи на обучение, базирани на матрично произведение на състоянията с цел въвеждане на тензорни мрежи, водещи начало от квантови системи с много тела, вместо невронни мрежи за вариационно дълбоко обучение. Тези изследвания са основа за написване на алгоритъма DQN, базиран на тензорни мрежи, за квантов контрол на многочастични системи. Получени са първи резултати за невзаимодействащи системи от много кубити и е положена основата на контрол на силно взаимодействащи системи. Проведени са изследвания за разплитане на квантови състояния в контекста на квантовите компютри. Съставен е код, който симулира прилагане на непрекъснати контролни гейтове върху двукубитови квантови състояния и пресмята ентропията на впитането на полученото състояние. Съставен е софтуерен код по алгоритмите DMRG, TEVD, iDMRG, iTEVD за многочастични квантови състояния с повърхностно впитане. Целта на проекта е успешната симулация на квантови системи с много тела отвъд точната диагонализация. Започната е работа по контрол на класическото махало на Капица чрез reinforcement learning с цел контрол на класически хаотични системи.

Освен индивидуалната работа със студенти в рамките на проекта е изнесен лекционен курс и прилежащ към него семинар на английски език (Introduction to Deep Reinforcement Learning) през зимния семестър 2020/21 във ФзФ и ФМИ (СУ).

2. Оценка на постигнатите резултати от изпълнението на проекта.

През отчетания период са публикувани 4 статии в престижни списания с висок импакт-фактор и 1 статия в трудове на международна конференция в съавторство с колеги от KTH Royal Institute of Technology, Стокхолм, Швеция и от University of California, Berkely, САЩ. Всички статии са в списания от категорията Q1. Във всички статии е изказана благодарност към ФНИ,

както и към други проекти извън България. Публикуваните резултати могат да се обобщят както следва:

Изучена е динамиката на периодично задвижвани системи с много тела далеч от високочестотния режим и са обсъдени Floquet системи, за които е валидна предварителна термализация. Изследвана е числено динамиката както на интегрируемите, така и на неинтегрируемите системи. Получено е формиране на дълготрайно претермално плато, подобно на високочестотната граница, където системата се термализира. За разлика от високочестотния режим е получено, че съответните времена на нагриване са зависими от модела. Анализирани са стабилността на претермалното плато към малки смущения в периода на задвижване. Класът периодично задвижвани системи с много тела позволява феноменът на предварителна термализация да се разглежда близо до изолирани от средни до ниски честоти на задвижване далеч от високочестотната граница. Резултатите предлагат динамичен механизъм за постепенно повишаване на температурата в изолирани квантови симулатори, като ултрастудени атоми, и отварят алтернативна възможност за изследване на термични фазови преходи и взаимодействието между термична и квантова критичност.

Приложени са вариационни квантови подходи, позволяващи използването на квантови изчислителни устройства за намиране на решения на сложни проблеми, като определяне на енергията на основното състояние на силно корелирани квантови системи с много тела. Използвайки reinforcement learning, е разработен алгоритъм за реализиране на хибриден градиентен метод, способен едновременно оптимизиране на непрекъснати и дискретни степени на свобода по начин, устойчив към неопределености. Хибридно поведение е моделирано с дълбока авторегресивна невронна мрежа за улавяне на причинно-следствената връзка. Демонстрирана е шумоустойчивост, като са разгледани три източника на неопределеност: класически и квантови измервателни шумове и грешки в унитарното управление.

Изследвани са силно взаимодействащи квантови системи, описани от нестохастични хамилтониани, поради свързаността им с физиката на ниските температури. Подобно изследване е предизвикателство дори за най-новите цифрови техники. Систематично е изследван клас универсални вариационни вълнови функции, базирани на изкуствени невронни мрежи. Предложено е използването на две отделни мрежи с реални стойности, едната за амплитудата, а другата за фазата на вариационната вълнова функция. Въведени са стратегии срещу присъщите на алгоритъма числени нестабилности за стохастично преконфигуриране. Чрез подробен анализ на отделни компоненти на алгоритъма, е направено заключението, че грубото описание на изменението на енергията представлява основната пречка при намирането на задоволително приближение на вълновата функция на основното състояние.

Проведено е изследване, посветено на квантовия алтернативен оператор ansatz (QAOA). Предложен е обобщен QAOA, наречен CD-QAOA, който произтича от контрадиабатична задвижваща процедура, проектирана за квантови системи с много тела и оптимизирана с помощта на reinforcement learning. Полученият хибриден алгоритъм за управление се оказва гъвкав в подготовка на основното състояние на квантово-хаотични спинови вериги с много тела чрез минимизиране на енергията.

3. Обобщена оценка за изпълнението на проекта в съответствие с чл. 82 на Правилника на ФНИ, като се посочва процентът на постигнатите резултати за отчетания период спрямо планираните в проектното предложение:

Поради прекратяване на проекта не може да се приеме максимален процентът на постигнатите резултати спрямо планираните в проекта за отчетания период. От една страна са публикувани 5 статии в рамките на 8 месеца, но от друга страна не е изпълнено едно от основните изисквания на конкурсите по програма „Вихрен“ – да се сформира работен колектив. Получени са съществени резултати с фундаментален характер, като е проведен теоретичен анализ, разработени са алгоритми, тествани с числени експерименти, разработени са редица софтуерни кодове за симулации. Изследванията са направени в сътрудничество със специалисти от Швеция, Германия и САЩ. Към работата са привлечени студенти от Софийски университет „Св. Климент Охридски“ и е изнесен курс от лекции в този университет, свързан с тематиката на проекта.

Резултатите са представени като 7 поканени лекции на международни онлайн семинари и конференции във Великобритания, Германия, Полша, САЩ и Словения. Публикувани са и са приети за печат 4 статии в престижни списания като Phys. Rev. B (2 статии), SciPost Physics (1 статия), Phys. Rev. X (1 с импакт-фактор над 15) и 1 статия в трудовете на международната конференция Mathematical and Scientific Machine Learning 2021. Статиите са качени на сървъра arXiv. През отчетания период са забелязани 31 независими цитирания.

Представен е подробен финансов отчет, подкрепен с необходимите документи. Направените разходи отговарят на условията на договора и представения финансов план. Изразходвани са 25% от авансово отпуснатите средства.

Оценката за отчетания период на проекта е „много добър“ предвид на публикуваните 5 статии в престижни списания, изнесените 7 поканени лекции и разработения софтуер.

Бележки и препоръки

1. По изпълнението на финансовия план.

Периодът, обхванат от финансовия одит, е от 01.10.2020 г. до 24.06.2021 г. Разходите са в съответствие с правилата на отчитане на ФНИ и насоките на конкурса. Изразходваните средства са преди всичко разходи за персонал. Общата сума на разходите по проекта за отчетания етап не надхвърля размера на максималното финансиране по одобрения бюджет.

2. По другите резултати от проекта.

Като несъмнено достоинство на проекта може да се посочи проведената работа със студенти от ФзФ и ФМИ на Софийския университет и изнасянето на специализиран курс лекции.

Като недостатък на представения отчет следва да се посочи липсата на систематизирано представяне на резултатите, както и непосочване на категориите на списанията, в които са публикувани тези резултати.

3. По работната програма и финансовия план за следващия етап.

Не е приложимо

Данни за проекта

Изпълнение на проекта в проценти според чл. 82 от ПФНИ: 90 %

Първоначална обща сума на договора: 1,043,900.00 лв.

Преведени средства: 209,000.00 лв.

Неизразходвани средства: 150,165.36 лв.

Непризнати разходи от финансовия одитор: 0.0 лв.

Признати разходи от финансовия одитор: 58,834.64 лв.

Брой докторанти в проекта: 0

Брой млади учени в проекта: 1

Брой научни публикации (общо): 5

От тях с импакт фактор: 4

От тях с импакт ранг(без тези, които имат IF): 0

От тях с благодарност само към ФНИ: 5

От тях с благодарност и към други проекти: 5

Участия в научни форуми: 7