

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas	Institutas
Kvantiniai skaičiavimai	T 007	Matematikos ir informatikos fakultetas	Duomenų mokslo ir skaitmeninių technologijų institutas
Studijų būdas	Kreditų skaičius ECTS	Studijų būdas	Kreditų skaičius
paskaitos	1	konsultacijos	1
individualus	4	seminarai	1

Dalyko anotacija

Anotacija: Kursas skirtas ugdyti doktorantų kompetencijas labai sparčiai augančioje ir besiformuojančioje kvantinių skaičiavimų srityje, apimant fundamentalius kvantinės informacijos principus ir modernius taikomuosius algoritmus. Pagrindinis dėmesys telkiamas į kvantinį pranašumą (angl. *Quantum Advantage*) ir hibridines skaičiavimo schemas dabartinėmis triukšmingų vidutinio masto kvantinių įrenginių (NISQ) sąlygomis.

Doktorantai kritiškai analizuos kvantinių grandinių modelius, sudėtingumo klases (įskaitant BQP) bei specializuosis kvantinio optimizavimo (QUBO/Ising formulavimo) ir kvantinio mašininio mokymo (QML) srityse. Kurso ašis – praktinė tiriamoji veikla, apimanti visą kūrimo ciklą: nuo matematinio uždavinio modeliavimo iki jo validavimo naudojant kvantinius simulatorius bei aukšto našumo debesijos infrastruktūras (*IBM Quantum*, *PennyLane*, *D-Wave*), kartu vertinant gautų sprendinių konkurencingumą prieš klasikinius *state-of-the-art* rezultatus.

Reikalavimai: Sėkmingam studijų proceso įgyvendinimui būtinas matematinis pasirengimas, apimantis tiesinės algebros žinias, kompleksinių skaičių teoriją, bazinę tikimybių teoriją bei statistinę analizę. Pageidautina turėti fundamentalų algoritmų teorijos ir skaičiavimo sudėtingumo suvokimą, bazinių optimizavimo metodų bei mašininio mokymo paradigmų žinių. Taip pat reikalingi programavimo įgūdžiai Python kalba, gebant dirbti su specializuotomis kvantinių skaičiavimų bibliotekomis ir duomenų mokslo paketais.

1) Kvantinių skaičiavimų pagrindai

a) Kvantinės informacijos pagrindai

- Bitų ir kubitų įvedimas; Dirako žymėjimas.
- Kvantinės mechanikos postulatai; susipynimas; negalimumo teoremos (klonavimo ir ištrynimo).
- Kvantinės komunikacijos protokolų pavyzdžiai: kvantinė teleportacija, supertankus kodavimas.

b) Kvantinių grandinių (vartų) modelis

- Kvantiniai vartai ir grandinių sudarymas; grįžtamumas (reversiškumas) ir jo reikšmė skaičiavimams.
- Universalus vartų rinkinys (universalumo idėja); skaičiavimo sudėtingumo klasių įvadas, įskaitant BQP (angl. *Bounded-Error Quantum Polynomial Time*).

c) Pagrindiniai kvantiniai algoritmai ir ribojimai

- Kvantinė Furjė transformacija (QFT; angl. *Quantum Fourier Transform*) ir kvantinis fazės įvertinimas (angl. *Quantum Phase Estimation*).
- Reprezentatyvūs algoritmai: Groverio, Šoro ir kt.
- Kvantinio skaičiavimo galimybės ir ribojimai, įskaitant NISQ (angl. *Noisy Intermediate-Scale Quantum*) kontekstą.

2) Kvantinis optimizavimas

a) Optimizavimo uždavinių formalizavimas

- Kombinatoriniai uždaviniai: tikslo funkcija, apribojimai ir baudos.
- Uždavinio transformavimas į QUBO (angl. *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*) ir Isingo formą; sprendinio dekodavimas ir tinkamumo tikrinimas (angl. *feasibility*).

b) Atkaitinimo metodai ir (D-Wave tipo) sprendimas

- Simuliuotas atkaitinimas.
- Kvantinis atkaitinimas ir hibridinės schemas.

- c) Optimizavimas kvantinėmis grandinėmis
 - Variaciniai optimizavimo metodai vartų modelyje.
 - Palyginimas su klasikiais metodais: sprendinio kokybė, resursai, patikimumas ir atkartojamumas; etalonui taikomi klasikiniai sprendėjai, pvz., MILP (angl. *Mixed-Integer Linear Programming*) ir CP-SAT (angl. *Constraint Programming – SAT*).
- 3) Kvantinis mašininis mokymas
 - a) Duomenų kodavimas ir požymių atvaizdavimas
 - Pagrindiniai duomenų kodavimo į kvantines būsenas būdai (kampinis, bazinis, amplitudinis).
 - Požymių žemėlapių (angl. *feature maps*), įskaitant periodinius ir susipynimą naudojančius žemėlapius.
 - Duomenų paruošimas ir mastelio klausimai (požymių skaičius, kubitų skaičius).
 - b) Kvantiniai ir hibridiniai modeliai
 - Kvantiniai branduoliniai metodai (angl. *kernel methods*).
 - Variaciniai diskriminaciniai modeliai: VQC (angl. *Variational Quantum Classifier*), QNN (angl. *Quantum Neural Networks*) ir hibridiniai modeliai.
 - Mokymas be mokytojo / dimensijos mažinimas: qPCA (angl. *Quantum PCA*) ir kvantiniai autoenkoderiai.
 - Kiti metodai: generatyviniai modeliai (kvantinės Born mašinos (angl. *Born machines*), QGAN (angl. *Quantum GAN*)), sustiprinamasis mokymas (angl. *quantum reinforcement learning*), metodai grafų duomenims (angl. *quantum graph models*).
 - c) Mokymas ir vertinimas
 - Mokymo strategijos NISQ sąlygomis: triukšmo ir matavimų skaičiaus įtaka (angl. *shots*), parametrų optimizavimas.
 - „Barren plateaus“ rizika ir praktinės jos mažinimo kryptys (ansatzo parinkimas, gylis).
 - Vertinimo metodologija: metrikos, atkartojamumas, palyginimas su baziniais modeliais (angl. *baselines*), abiliacijos.

Praktinės užduotys: pasirinktam taikomajam uždaviniui (pvz., logistikos ar finansų srityje) formuluojamas QUBO/Isingo modelis, kuris realizuojamas pasirinkta kvantine paradigma: taikant kvantinį arba hibridinį atkaitinimą (*D-Wave Leap/Ocean*) arba vartų modelio variacinius optimizavimo algoritmus (pvz., QAOA) pasirinktoje platformoje (*IBM Quantum (Qiskit)* ar *PennyLane*), atliekant lyginamąją analizę su klasikiais optimizavimo metodais. Taip pat pasirinktam klasifikavimo ar regresijos uždaviniui (pvz., medicinos, kibernetinio saugumo ar chemijos srityse) projektuojamas ir įgyvendinamas kvantinis arba hibridinis sprendimas pasirinktoje platformoje (*IBM Quantum (Qiskit)* ar *PennyLane*), taikant kvantinio mašininio mokymo (QML) metodus (pvz., kvantinius branduolinius metodus, variacines grandines ar generatyvinius modelius), parenkant metodiką atitinkančią duomenų kodavimo strategiją bei atliekant rigorišką rezultatų verifikaciją (vertinant metrikas ir atkartojamumą) lyginant su klasikiais modeliais.

Pagrindinė literatūra

Knygos:

- Du, Y., Wang, X., Guo, N., Yu, Z., Qian, Y., Zhang, K., Hsieh, M.-H., Rebertost, P., & Tao, D. (2025). *A Gentle Introduction to Quantum Machine Learning*. Springer Singapore. <https://doi.org/10.1007/978-981-95-1284-3>
- Schuld, M., & Petruccione, F. (2021). *Machine Learning with Quantum Computers* (2nd ed.). Springer Cham. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-83098-4>
- Hidary, J. D. (2021). *Quantum Computing: An Applied Approach* (2nd ed.). Springer Cham. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-030-83274-2>
- Combarro Fernández-Combarro Álvarez, E. F., & González-Castillo, S. (2023). *A Practical Guide to Quantum Machine Learning and Quantum Optimization: Hands-on Approach to Modern Quantum Algorithms*. Packt Publishing. ISBN: 9781804613832. <https://www.packtpub.com/en-ID/product/a-practical-guide-to-quantum-machine-learning-and-quantum-optimization-9781804613832>

Straipsniai:

- Abbas, A., Ambainis, A., Augustino, B., et al. (2024). *Challenges and opportunities in quantum optimization*. *Nature Reviews Physics*, 6, 718–735. <https://doi.org/10.1038/s42254-024-00770-9>
- Bharti, K., Cervera-Lierta, A., Kyaw, T. H., et al. (2022). *Noisy intermediate-scale quantum algorithms*. *Reviews of Modern Physics*, 94(1), 015004. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.94.015004>

- Cerezo, M., et al. (2021). *Variational quantum algorithms*. *Nature Reviews Physics*, 3, 625–644. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00348-9>
- Endo, S., Cai, Z., Benjamin, S. C., & Yuan, X. (2021). *Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation*. *Journal of the Physical Society of Japan*, 90(3), 032001. <https://doi.org/10.7566/JPSJ.90.032001>
- Larocca, M., Thanasilp, S., Wang, S., et al. (2025). *Barren plateaus in variational quantum computing*. *Nature Reviews Physics*, 7, 174–189. <https://doi.org/10.1038/s42254-025-00813-9>
- Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014). *A Quantum Approximate Optimization Algorithm*. arXiv:1411.4028. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1411.4028>

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Ernestas Filatovas	dr.	http://www.elaba.mb.vu.lt/dmsti/?aut=Ernestas+Filatovas
Remigijus Paulavičius	dr.	http://www.elaba.mb.vu.lt/dmsti/?aut=Remigijus+Paulavi%C4%8Dius
Linas Petkevičius	dr.	https://elaba.mb.vu.lt/mif/?aut=Linas+Petkevi%C4%8Dius

Doktorantūros komiteto teikimu patvirtinta fakulteto/instituto taryboje 20__ m. __ mėn. __ d. , protokolo Nr.

Tarybos pirmininkas

Pastaba: jei doktorantūros teisė bus suteikta kartu su kita institucija, tvirtinama ne fakulteto taryboje , o jungtinėje komisijoje.