

# In Search of Optimality

**Doctoral Thesis**

**Author(s):**

Zintchenko, Iliia

**Publication date:**

2016

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010653751>

**Rights / license:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#)

DISS. ETH NO. 23532

# IN SEARCH OF OPTIMALITY

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH  
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

ILIA ZINTCHENKO

MSc. in Micro and Nanosystems ETH Zurich

born on 10.08.1989

citizen of  
Russian Federation

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. Matthias Troyer, examiner  
Prof. Dr. Helmut Katzgraber, co-examiner

2016

Ilia Zintchenko  
*In search of optimality*  
Diss. ETH No. 23532

Digital Object Identifier DOI: [10.3929/ethz-a-010653751](https://doi.org/10.3929/ethz-a-010653751)  
E-mail [zintchenko@itp.phys.ethz.ch](mailto:zintchenko@itp.phys.ethz.ch)

# Abstract

This thesis consists of four parts: quantum gases, quantum computing, optimisation and computational frameworks. The parts are not connected and can be read separately.

The first part is about density functional theory for cold atomic gases. Density functional theory allows to study significantly larger and more complex systems than, for example, exact diagonalisation, but at the cost of accuracy and reliability. We use it to study static and dynamic properties of Fermi gases at unitarity and in the weakly repulsive regime.

The second part is about quantum computing. We introduce a novel method based on Bayesian inference, which we term randomised phase estimation, to learn the spectral gaps in a quantum device without the need for ancillary qubits or well calibrated gates. Bayesian inference is ubiquitous in classical machine learning and allows to efficiently gain information about unknown parameters of a systems based on randomised sampling.

The third part is about optimisation. With the task of finding ground states of Ising spin glasses as a benchmark, we introduce a set of tricks for greatly increase the performance of simulated annealing and propose a method to boost the power of an optimiser by using it to solve sub-sets of variables rather than the whole problem at once. This method can also be used to extend the advantage of a small device to solve large optimisation problems. On a different problem, namely fitting models to data in various machine learning applications, we propose another way, termed partial reinitialisation, to significantly increase performance. The core idea is to reinitialise only sub-sets of variables rather than the whole system after each call to the optimiser.

The fourth part is about high-performance computing. We introduce a collaborative, distributed framework which makes using a cluster not any harder than running a script on a laptop. Aimed at computational scientists, the goal of Project Whiplash is to maximise the time spent on actual research and to become an industry standard for general purpose, high-performance scientific computing.

# Riassunto

Questo lavoro di testi consta di quattro parti: gas quantistici, informatica quantistica, ottimizzazione e strutture computazionali. Le diverse parti non sono interconnesse e possono leggersi separatamente.

La prima parte riguarda la teoria del funzionale densità per gas di atomi freddi. La teoria del funzionale densità permette di studiare dei sistemi ben più grandi e complessi rispetto, per esempio, alla diagonalizzazione esatta, ma al prezzo di minore precisione ed affidabilità. Utilizziamo questo approccio per studiare proprietà statiche e dinamiche di gas di Fermi nel regime unitario e per deboli interazioni repulsive.

La seconda parte riguarda l'informatica quantistica. Qui introduciamo un nuovo metodo basato sull'inferenza Bayesiana, da noi denominato stima aleatoria della fase, che permette di apprendere le gap spettrali in un dispositivo quantistico senza la necessità di qubit ausiliari o di porte quantistiche ben calibrate. L'inferenza Bayesiana è assai diffusa nei metodi classici di apprendimento automatico e permette di ottenere efficacemente informazioni sui parametri incogniti di un sistema basato sul campionamento aleatorio.

La terza parte riguarda l'ottimizzazione. Fissandoci come obiettivo di riferimento quello di trovare gli stati fondamentali nei modelli di vetri di spin, introduciamo una serie di trucchi che migliorano sensibilmente il rendimento del "simulated annealing". Proponiamo inoltre un metodo per migliorare il rendimento di un ottimizzatore, utilizzandolo per risolvere delle sotto classi di variabili piuttosto che per l'intero problema. Questo metodo può essere inoltre utilizzato per estendere i vantaggi dei piccoli dispositivi alla risoluzione di problemi di ottimizzazioni su larga scala. Per un problema differente, cioè per trovare il migliore modello che riproduca i dati in diverse applicazioni dell'apprendimento automatico, proponiamo un'altra strategia, denominata reinizializzazione parziale, che migliora sensibilmente le prestazioni. L'idea di base è di reinizializzare solamente dei sotto-insiemi di variabili piuttosto che l'intero sistema, dopo ciascuna chiamata all'ottimizzatore.

La quarta parte riguarda il calcolo ad elevate prestazioni. Introduciamo una struttura di calcolo, collaborativa e distribuita, che rende l'uso di

un supercalcolatore semplice quanto lanciare un piccolo programma su un computer portatile. Rivolto ai fisici computazionali, obiettivo del progetto "Whiplash" é di massimizzare il tempo passato sulla vera ricerca nonché di divenire uno standard industriale per il calcolo scientifico multiuso ed ad alte prestazioni.