

Εργασία 2

Ονοματεπώνυμο: Μανίκα Θεοδώρα

A.M.: 1115202100267

1 Επισκόπηση Προγράμματος

Το πρόγραμμα υλοποιεί έναν κβαντικό ταξινομητή (Variational Quantum Classifier) και αποτελείται από τις παρακάτω φάσεις:

1.1 Εγκατάσταση και Εισαγωγή Βιβλιοθηκών

- **PennyLane**: Βασική βιβλιοθήκη για σχεδίαση και εκτέλεση κβαντικών κυκλωμάτων
- **Qutip**: Χρησιμοποιείται για την οπτικοποίηση κβαντικών καταστάσεων στον χώρο Bloch
- **Scikit-learn**: Παρέχει εργαλεία για αξιολόγηση της απόδοσης (accuracy, precision, recall, F1-score)
- **NumPy & Matplotlib**: Υποστηρικτικές βιβλιοθήκες για επιστημονικούς υπολογισμούς και οπτικοποίηση

1.2 Φόρτωση και Προεπεξεργασία Δεδομένων

- Τα δεδομένα φορτώνονται από το Google Drive μέσω της συνάρτησης `load_dat_file()`
- Χωρισμός σε σύνολα εκπαίδευσης (train) και δοκιμής (test)
- Οπτικοποίηση των δεδομένων με scatter plots για έλεγχο της κατανομής τους

1.3 Κωδικοποίηση Δεδομένων σε Κβαντικές Καταστάσεις

- Υλοποίηση 4 διαφορετικών μεθόδων κωδικοποίησης:
 - **Amplitude Embedding**: Απευθείας αντιστοίχιση δεδομένων σε πλάτη πιθανοτήτων
 - **Angle Embedding**: Κωδικοποίηση μέσω περιστροφών (RY πύλες)
 - **Strong Entangling Embedding**: Κωδικοποίηση με εναγκαλισμούς (CNOT πύλες)
 - **IQP Embedding**: Πολυωνυμική κωδικοποίηση με Hadamard και ελεγχόμενες πύλες
- Επιλογή της **Angle Embedding** ως βέλτιστης μεθόδου για το συγκεκριμένο πρόβλημα
- Οπτικοποίηση των κβαντικών καταστάσεων σε 3D χώρο

1.4 Σχεδίαση Κβαντικού Κυκλώματος

- Βασική αρχιτεκτονική:
 - Είσοδος: 2 qubits
 - Κωδικοποίηση: Angle embedding με RY πύλες
 - Μεταβλητό μέρος: Strongly Entangling Layers
 - Μέτρηση: Expectation value της Pauli-Z πύλης στο πρώτο qubit
- Υλοποίηση τριών διαφορετικών παραλλαγών:
 - MSE loss με Adam optimizer
 - Hinge loss με RMSProp optimizer
 - Cross-entropy loss με SGD optimizer

1.5 Εκπαίδευση και Αξιολόγηση

- Εκπαίδευση για 30 epoch με παρακολούθηση της απόδοσης
- Υπολογισμός μετρικών (accuracy, precision, recall, F1-score)
- Σύγκριση των τριών παραλλαγών ως προς την απόδοση και τη σύγκλιση
- Οπτικοποίηση της εκπαίδευσης με γραφήματα loss και accuracy

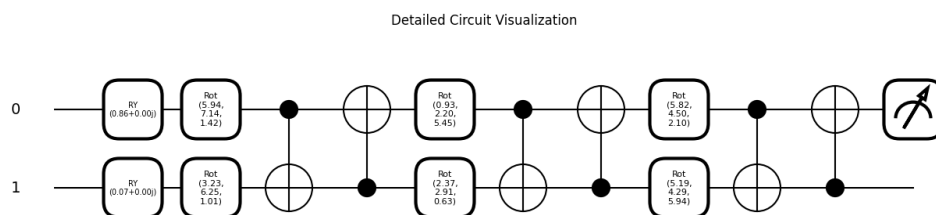
1.6 Σύγκριση με Κλασικές Μεθόδους

- Υλοποίηση κλασικού SVM με RBF kernel
- Σύγκριση των αποδόσεων στον ίδιο χώρο δεδομένων
- Οπτικοποίηση των decision boundaries και των ταξινομήσεων

1.7 Οπτικοποίηση στο Bloch Sphere

- Απεικόνιση των αρχικών κβαντικών καταστάσεων
- Οπτικοποίηση των καταστάσεων μετά την επεξεργασία από το εκπαιδευμένο κύκλωμα

2 Σχεδίαση Κβαντικού Κυκλώματος



Σχήμα 1: Αρχιτεκτονική κβαντικού κυκλώματος

2.1 Αρχιτεκτονική Κυκλώματος

Το κύκλωμα αποτελείται από τρία κύρια μέρη:

2.1.1 Quantum Embedding

$$U(\vec{x}) = \bigotimes_{i=1}^2 RY(x_i) = RY(x_1) \otimes RY(x_2) \quad (1)$$

- Input: 2Δ διάνυσμα $\vec{x} = (x_1, x_2)$
- Encoding μέσω πυλών RY (rotation around Y-axis):

$$RY(\theta) = e^{-i\theta\sigma_y/2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

- Κάθε qubit κωδικοποιεί μία διάσταση των δεδομένων

2.1.2 Variational Ansatz

$$V(\vec{\theta}) = \prod_{l=1}^3 StronglyEntanglingLayer(\theta_l) \quad (2)$$

- 3 repetitive layers
- Κάθε layer περιλαμβάνει:
 - Πύλες RZ, RY, RZ σε κάθε qubit (generalized rotations)
 - Entanglement μέσω πυλών $CNOT$ με κυκλική τοπολογία
- Parameters: 36 συνολικά ($3 \text{ layers} \times 2 \text{ qubits} \times 6 \text{ παραμέτρους ανά layer}$)

2.1.3 Measurement

$$\langle Z \rangle = \langle \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) | Z_0 | \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle \quad (3)$$

- Μέτρηση της πύλης $Pauli - Z$ (σ_z) στο πρώτο qubit
- Expectation value: $\langle Z \rangle \in [-1, 1]$
- Classification: $\text{sgn}(\langle Z \rangle)$ (τιμή -1 ή +1)

2.2 Μαθηματική Περιγραφή

Το πλήρες κύκλωμα μπορεί να εκφραστεί ως:

$$|\psi(\vec{x}, \vec{\theta})\rangle = V(\vec{\theta})U(\vec{x})|0\rangle^{\otimes 2} \quad (4)$$

με την έξοδο να δίνεται από:

$$f(\vec{x}, \vec{\theta}) = \langle \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) | Z_0 | \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle \quad (5)$$

3 Διαμόρφωση Εκπαίδευσης

3.1 Ανάλυση Συναρτήσεων Κόστους

- **Hinge Loss:**

$$\mathcal{L}_{\text{hinge}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \max(0, 1 - y_i \langle Z \rangle_i)$$

- Επιλέγεται για προβλήματα ταξινόμησης με ετικέτες ± 1
- Εξασφαλίζει μεγαλύτερο περιθώριο απόφασης
- Λιγότερο ευαίσθητη σε ακραίες τιμές από το MSE
- Κατάλληλη με RMSProp για σταθερή σύγκλιση

- **Mean Squared Error (MSE):**

$$\mathcal{L}_{\text{MSE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \langle Z \rangle_i)^2$$

- Κλασική συνάρτηση για προβλήματα παλινδρόμησης
- Ευαίσθητη σε ακραίες τιμές λόγω του τετραγώνου
- Αποτελεσματική με Adam λόγω προσαρμοστικού ρυθμού μάθησης

- **Cross-Entropy Loss:**

$$\mathcal{L}_{\text{E}} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \left(\frac{1}{1 + e^{-y_i \langle Z \rangle_i}} \right)$$

- Ιδανική για πιθανοτικά μοντέλα ταξινόμησης
- Εκτιμά την απόκλιση κατανομών
- Συνδυάζεται καλά με SGD για σταδιακή βελτιστοποίηση

3.2 Ανάλυση Βελτιστοποιητών

- **Adam** ($\eta = 0.05$):

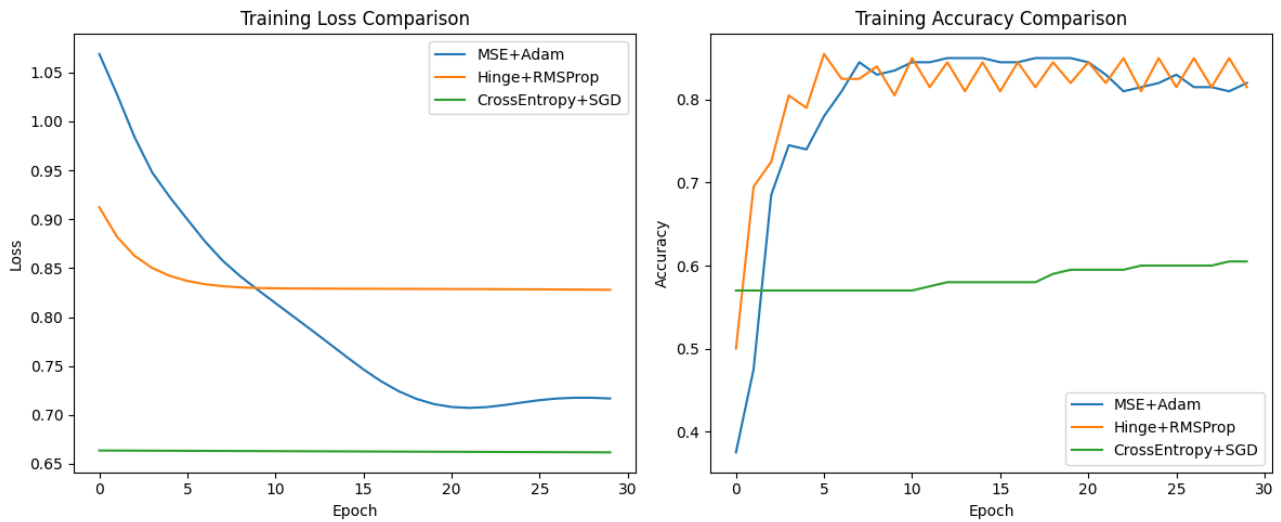
- Προσαρμοστικοί ρυθμοί μάθησης ανά παράμετρο
- Χρήση ροπών πρώτης και δεύτερης τάξης
- Ιδανικός για MSE λόγω της ικανότητας διαχείρισης μεγάλων κλίσεων

- **RMSProp** ($\eta = 0.03$):

- Προσαρμόζει το ρυθμό μάθησης ανάλογα με το ιστορικό των κλίσεων
- Καλή απόδοση σε προβλήματα με θορυβώδη κλίσεις
- Αποτελεσματικός με Hinge Loss για σταθερή σύγκλιση

- **SGD** ($\eta = 0.01$):

- Απλή κλίση κατάβασης χωρίς προσαρμογή ρυθμού
- Απαιτεί προσεκτική επιλογή ρυθμού μάθησης
- Συνδυάζεται με Cross-Entropy για σταδιακή βελτιστοποίηση



Σχήμα 2: Κόστος και Απόδοση διαφόρων συνδυασμών loss-optimizer

Συνδυασμός	Ακρίβεια
Hinge + RMSProp	90
MSE + Adam	87.5
Cross-Entropy + SGD	55

Πίνακας 1: Αποτελέσματα εκπαίδευσης

3.3 Συνδυασμοί και Απόδοση

3.4 Επιλογή Παραμέτρων

- **Epochs:** 30 (εξισορρόπηση μεταξύ απόδοσης και χρόνου)
- **Batch size:** Πλήρες δείγμα (full batch)
- **Learning rate:** Προσαρμογή ανά συνδυασμό:
 - 0.05 για Adam
 - 0.03 για RMSProp
 - 0.01 για SGD

4 Απόδοση Ταξινόμησης

Μετρική	Σύνολο Δοκιμής
Accuracy	0.9
Precision	0.86
Recall	0.95
F1-score	0.9

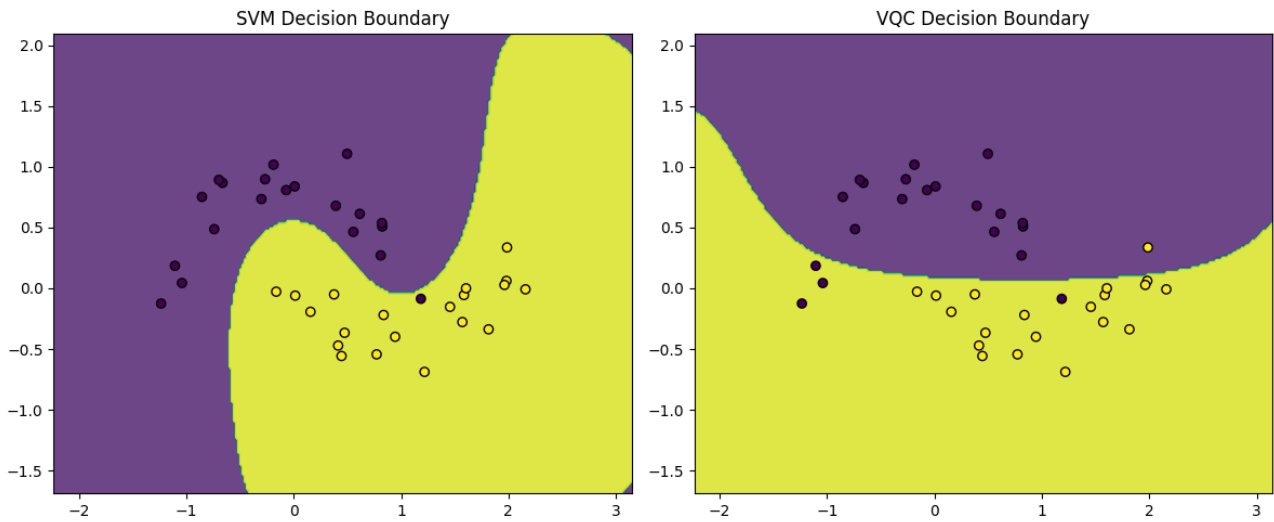
Πίνακας 2: Μετρικές απόδοσης

5 Σύγκριση με Κλασικό Ταξινομητή

5.1 Αποτελέσματα

Μετρική	VQC	Κλασικό SVM
Accuracy	0.88	0.97
Precision	0.82	0.95
Recall	0.95	1
F1-score	0.88	0.97

Πίνακας 3: Συγκριτική απόδοση (SVM)



Σχήμα 3: Decision Boundary

5.2 Παρατηρήσεις

- Το SVM εμφανίζει καλύτερη απόδοση (10%) σε όλες τις μετρικές
- Ο χβαντικός ταξινομητής παρουσιάζει υψηλότερο recall, πιθανώς λόγω της χβαντικής υπερ-προσαρμογής
- Οι μη γραμμικές decision boundaries του VQC διαφέρουν σημαντικά από αυτές του SVM
- Η διαφορά στην ακρίβεια οφείλεται εν μέρει στον μικρό αριθμό qubits (2)
- Το SVM εμφανίζει πιο συμπαγή και καλά καθορισμένα όρια ταξινόμησης