

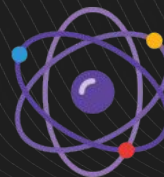


# Construção de um Módulo Quântico para o Classificador Baseado em Floresta de Caminhos Ótimos

Maria Angélica Krüger Miranda

**Orientador:** Prof. Assoc. João Paulo Papa

**Coorientador:** Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini



# Sumário

**01**

**Introdução**

**02**

**Fundamentação  
Teórica**

**03**

**Metodologia**

**04**

**Experimentos**

**05**

**Resultados**

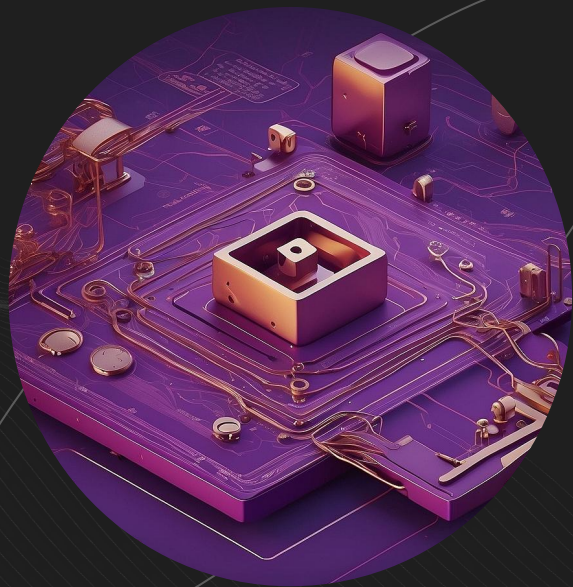
**06**

**Considerações  
Finais**



**01**

# Introdução



# Inteligência Artificial



IA Generativa

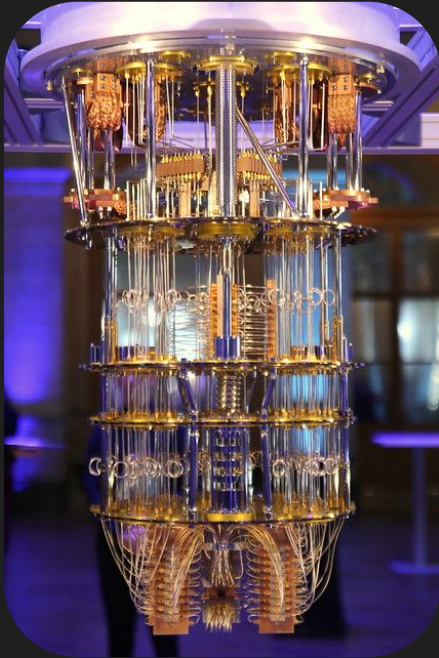


Recomendação  
Personalizada



Automotivos  
Autônomos

# Computação Quântica



- ◆ Grande interesse por *big techs*.
- ◆ Possibilidade de resolver novos problemas.
- ◆ Capacidade de lidar melhor com grandes volumes de dados.





### Problemática

- ◆ Modelos de aprendizado de máquina são demorados para treinar ainda mais na era *big data*.
- ◆ Os modelos tradicionais não conseguem resolver todos os problemas em tempo razoável como as simulações.
- ◆ Há poucos modelos tradicionais adaptados ao contexto quântico.



### Justificativa

- ◆ Estudos apontam que QML apresenta desempenho promissor na resolução de problemas desafiadores.
- ◆ Grande interesse e investimento por *big techs* e empresas bancárias.

# Objetivos

- Explorar as técnicas envolvidas no aprendizado de máquina quântico a fim de aplicar a um modelo tradicional e verificar como este se comporta



**Estudar QML e OPF**



**Testes**



**Implementar módulo**



**Comparação**

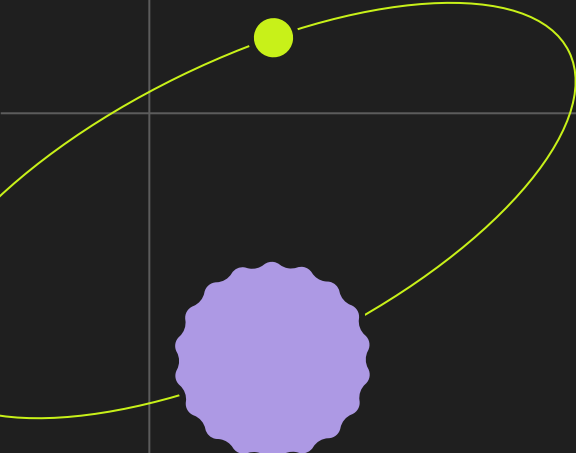


**02**

# Fundamentação Teórica





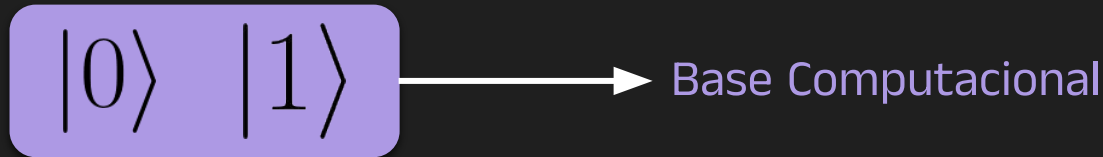


# Computação Quântica

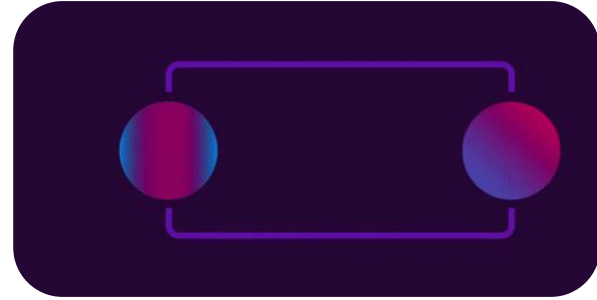


# Mecânica Quântica

- ✦ “A mecânica quântica é uma estrutura matemática ou um conjunto de regras para a construção de teorias físicas.” (Nielsen & Chuang)
- ✦ Estados quânticos são descritos segundo a **notação de Dirac** e sua representação será usualmente conhecida como **kets** e **bras**.
- ✦ **Qubit**: menor unidade de informação na computação quântica



# Superposição



# Emaranhamento

# Computação Quântica

- ✦ A informação também pode assumir **infinitos** estados representados como uma combinação linear da base computacional (**princípio da superposição**)

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\text{cat}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\text{dog}\rangle$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\{|\text{cat cat}\rangle + |\text{cat dog}\rangle\}$$



## Portas Quânticas










$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$X|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$X|0\rangle = |1\rangle$$



# Portas Quânticas

	NOME	NOTAÇÃO	REPRESENTAÇÃO MATRICIAL	ATUAÇÃO NA BASE COMPUTACIONAL
Portas de 1-qbit	Identidade		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow  1\rangle$
	Porta NOT		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  1\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow  0\rangle$
	Porta Y		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow i 1\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow -i 0\rangle$
	Porta Z		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow - 1\rangle$
	Porta de Hadamard		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow \frac{ 0\rangle +  1\rangle}{\sqrt{2}}$ $ 1\rangle \rightarrow \frac{ 0\rangle -  1\rangle}{\sqrt{2}}$
	Porta de fase		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow i 1\rangle$
			$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow -i 1\rangle$
	Porta de T		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow e^{i\pi/4} 1\rangle$
			$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{bmatrix}$	$ 0\rangle \rightarrow  0\rangle$ $ 1\rangle \rightarrow e^{-i\pi/4} 1\rangle$



# Circuitos Quânticos





# Classificador OPF

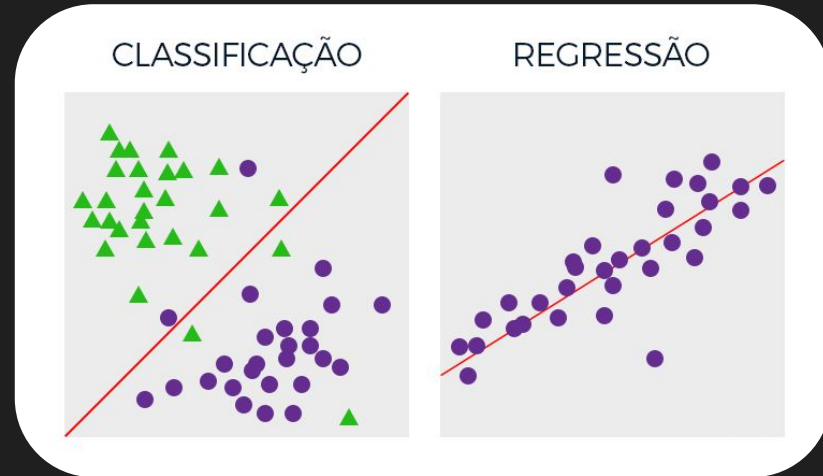




# Aprendizado de Máquina

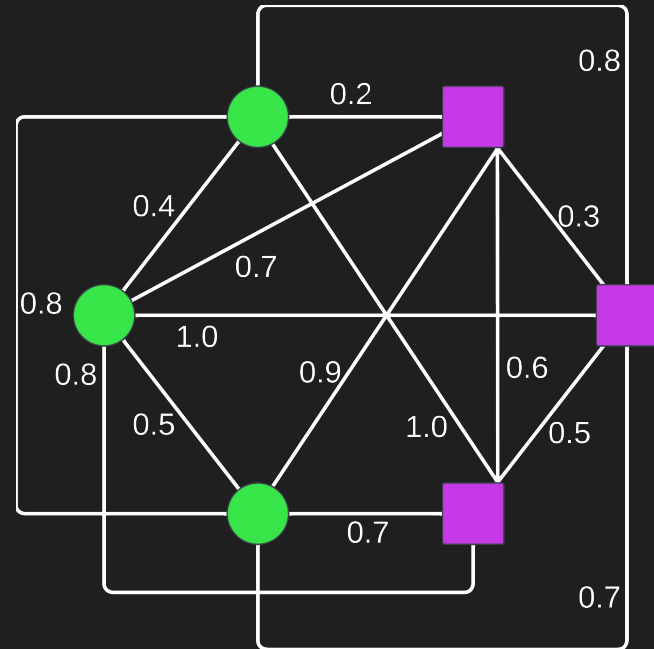
✦ Geron (2019) categoriza o sistema de aprendizado em quatro vertentes:

- ✦ **Supervisionado**
- ✦ Não supervisionado
- ✦ Semissupervisionado
- ✦ Reforço

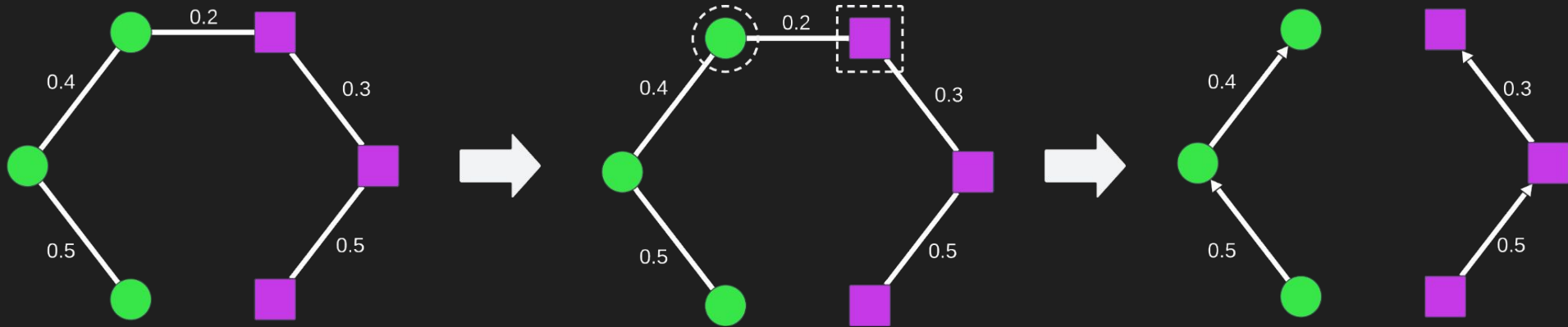


# Classificador OPF

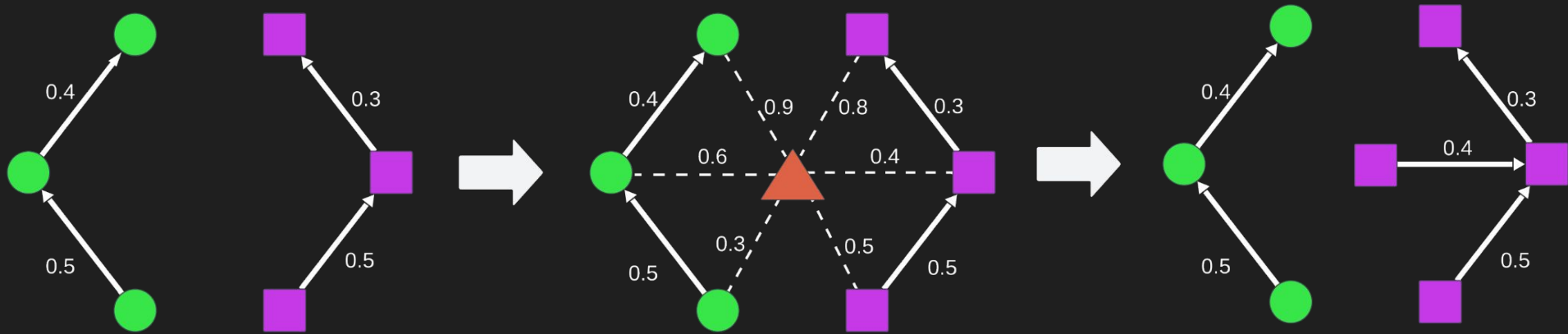
- ✦ Classificador baseado em florestas de caminhos ótimos
- ✦ Segmenta o vetor de características e modela-o no formato de um grafo
- ✦ **Modelo supervisionado com grafo completo**

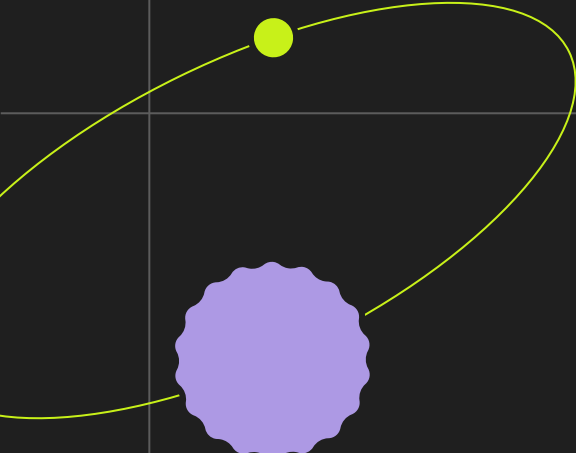


# Classificador OPF - Treinamento



# Classificador OPF - Classificação





# Aprendizado de Máquina Quântico

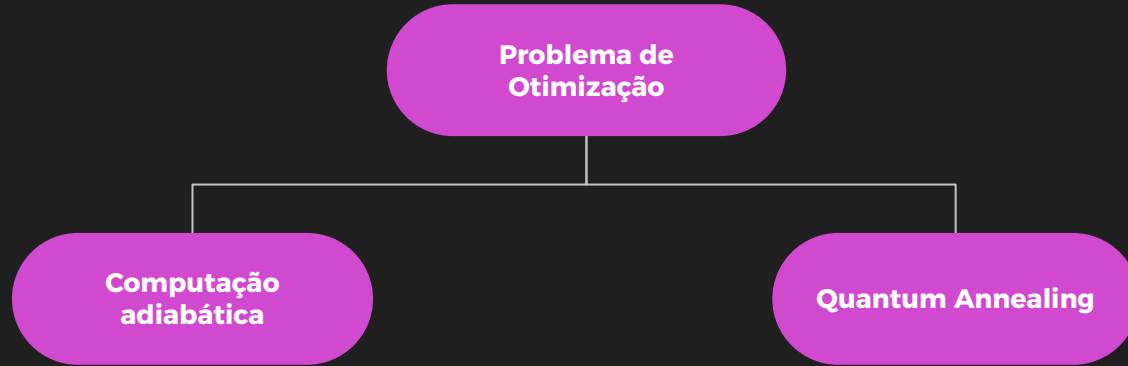


# Introdução

- ◆ Schuld e Petruccione (2018) dividem a área de QML em quatro vertentes




# Introdução



- ✦ O processo de *quantum annealing* inicia-se com a preparação de um estado fundamental (*hamiltoniano*) e em seguida busca-se a configuração de menor energia do sistema

# QUBO

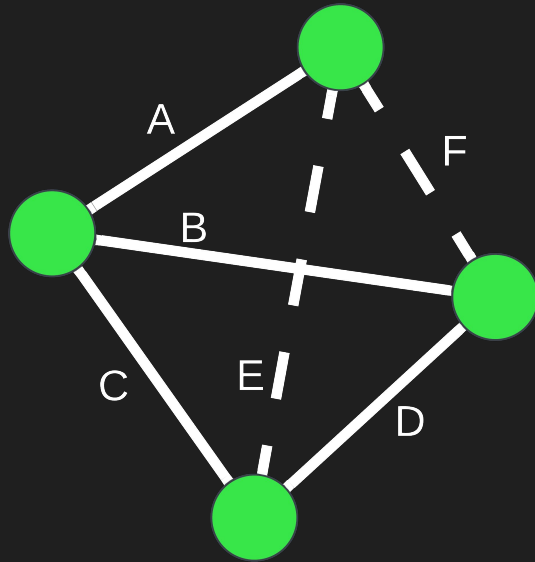
- 
- ✦ **QUBO**: Quadratic Unconstrained Binary Optimization
  - ✦ Ramo da matemática combinatorial
  - ✦ Solução é uma sequência binária que minimiza a função de energia

$$\sum_{i \leq j=1}^n w_{ij} x_i x_j$$

- **x**: sequência binária
- **w**: peso



## QUBO



A	B	C	D	E	F
1	1	1	1	0	0
$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$

$$|\psi\rangle = |111100\rangle$$

# QUBO



$$|\psi_0\rangle = |000000\rangle$$

$$|\psi_5\rangle = |000101\rangle$$

$$|\psi_{42}\rangle = |101010\rangle$$

$$|\psi_{60}\rangle = |111100\rangle$$

$$|\psi_{63}\rangle = |111111\rangle$$

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 63 \end{bmatrix}$$

# FALQON

- ♦ **FALQON**: Feedback Based Quantum Optimization (2022)
- ♦ Técnica utilizada para resolver problemas de otimização
- ♦ Baseado no teorema ótimo de caminho e no teorema de Trotter-Suzuki
- ♦ Implementação utilizando circuitos quânticos variacionais
- ♦ Considere um hamiltoniano  $H_c$  que descreve o sistema
- ♦ Segundo o teorema de Trotter-Suzuki afirma que a evolução de um sistema pode ser aproximada por uma sequência de aproximações mais simples

$$H_c = H_1 + H_2$$



# FALQON

- ♦ Estado aleatório inicial

$$|\psi_0\rangle$$

- ♦ Hamiltoniano

$$H_c = H_1 + H_2$$

- ♦ Operador de evolução temporal

$$U_c = e^{-iH_c\Delta t}$$

- ♦ Momento angular total na direção  $x$

$$H_d = \sum \sigma_x^i$$

- ♦ Dinâmica temporal em  $H_d$

$$U_d(\beta_k) = e^{-iH_d\beta_k\Delta t}$$

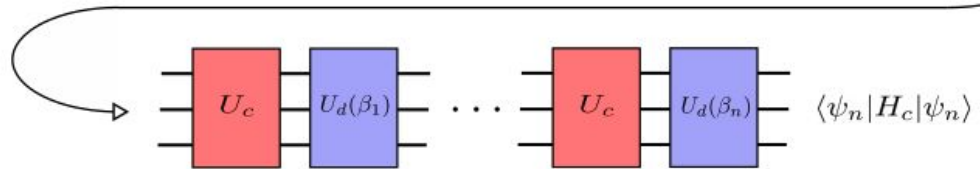
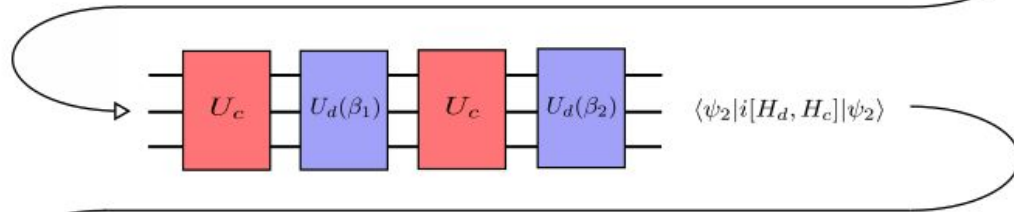
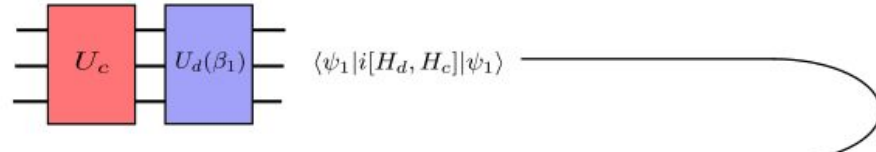


# FALQON

- Algoritmo recursivo para cada passo  $k$ , em que:

1. Preparar o estado  $|\psi_k\rangle = U_d(\beta_k)U_c \cdots U_d(\beta_1)U_c|\psi_0\rangle$
2. Medir o valor esperado  $A_k = i\langle\psi_k|H_dH_c - H_cH_d|\psi_k\rangle$
3. Calcular  $\beta_{k+1} = -A_k$





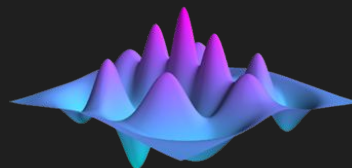
**03**

# **Metodologia**




# Materiais

- ✦ **Sistema operacional:** Windows 11 Home
- ✦ **IDE:** Visual Studio Code
- ✦ **Gerenciador de ambiente virtual:** Pipenv
- ✦ **Linguagem de programação:** Python
- ✦ **Bibliotecas principais:** OPFython, Qiskit e Qutip
- ✦ **Base de dados:** Boat (Kuncheva, 2005)
- ✦ **Hardware:** computador pessoal





# Abordagem Proposta

- 
- ✦ **Abordagem clássica:** árvore geradora mínima (MST)
  - ✦ **Abordagem quântica:** ciclo hamiltoniano fechado como o problema do caixeiro viajante (TSP) ilustra.
  - ✦ **Problema:** encontrar uma rota de custo mínimo em que percorra todos os vértices uma única vez e retorne ao vértice inicial.
  - ✦ **Restrições:**
    - ✦ Quantidade de arestas deve ser igual à quantidade de vértices;
    - ✦ Cada vértice conterá duas arestas.

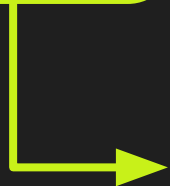
# Modelagem do TSP

$$H_c = \sum_i \sum_{j>i} W_{ij} X_{ij} + P_1 \left( \sum_i \sum_{j>i} X_{ij} - n \right)^2 + P_2 \left[ \sum_i \left( \sum_{j \neq i} X_{ij} - 2 \right)^2 \right]$$



# Modelagem do TSP

$$H_c = \sum_i \sum_{j>i} W_{ij} X_{ij} + P_1 \left( \sum_i \sum_{j>i} X_{ij} - n \right)^2 + P_2 \left[ \sum_i \left( \sum_{j \neq i} X_{ij} - 2 \right)^2 \right]$$



**Soma dos pesos das arestas presentes**



# Modelagem do TSP

$$H_c = \sum_i \sum_{j>i} W_{ij} X_{ij} + P_1 \left( \sum_i \sum_{j>i} X_{ij} - n \right)^2 + P_2 \left[ \sum_i \left( \sum_{j \neq i} X_{ij} - 2 \right)^2 \right]$$

**Restrição 1: Número de arestas deve ser igual ao de vértices**




## Modelagem do TSP

$$H_c = \sum_i \sum_{j>i} W_{ij} X_{ij} + P_1 \left( \sum_i \sum_{j>i} X_{ij} - n \right)^2 + P_2 \left[ \sum_i \left( \sum_{j \neq i} X_{ij} - 2 \right)^2 \right]$$

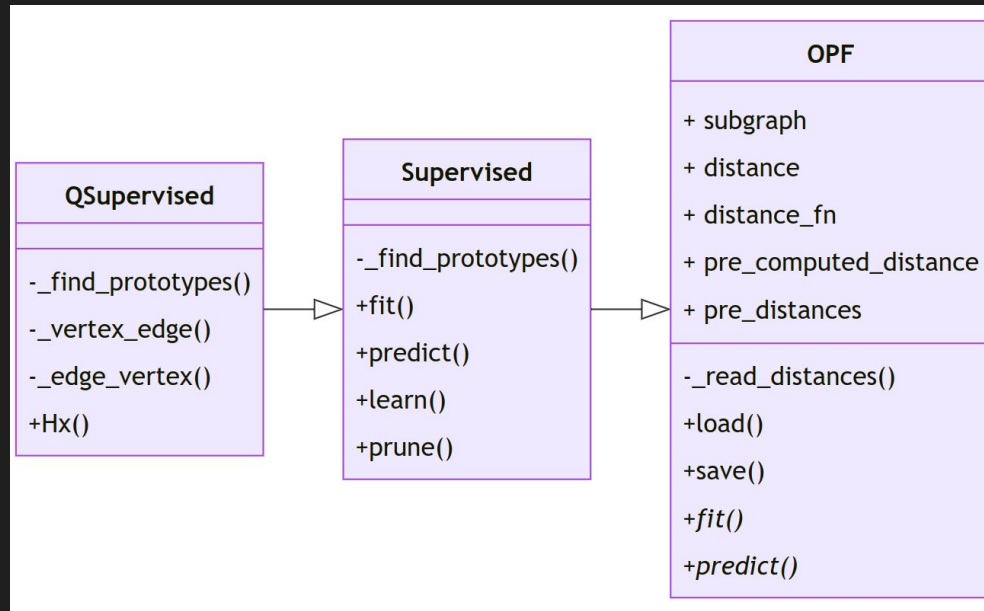
**Restrição 2: Cada vértice deverá conter duas arestas**

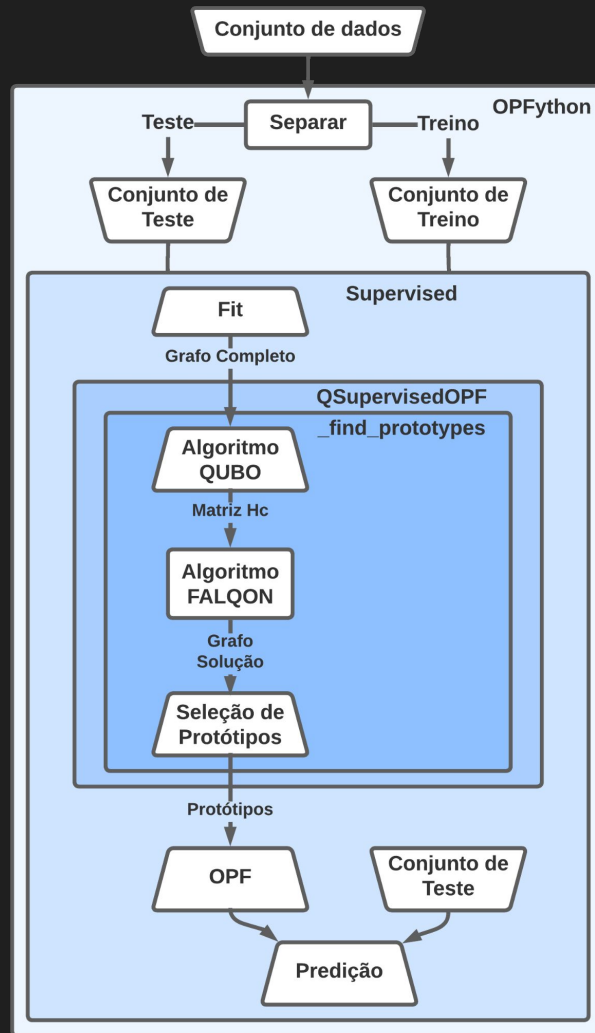


# Arquitetura Geral

- 
- ◆ Adicionado um módulo quântico na biblioteca OPFython
  - ◆ Biblioteca baseada em orientação a objetos
  - ◆ Objetivo do módulo: realizar a seleção dos protótipos durante a etapa do treinamento
  - ◆ Construiu uma nova classe chamada *QSupervised* que herda os métodos de *Supervised* e em seguida sobrescreveu o método *\_find\_prototypes*

# Arquitetura Geral







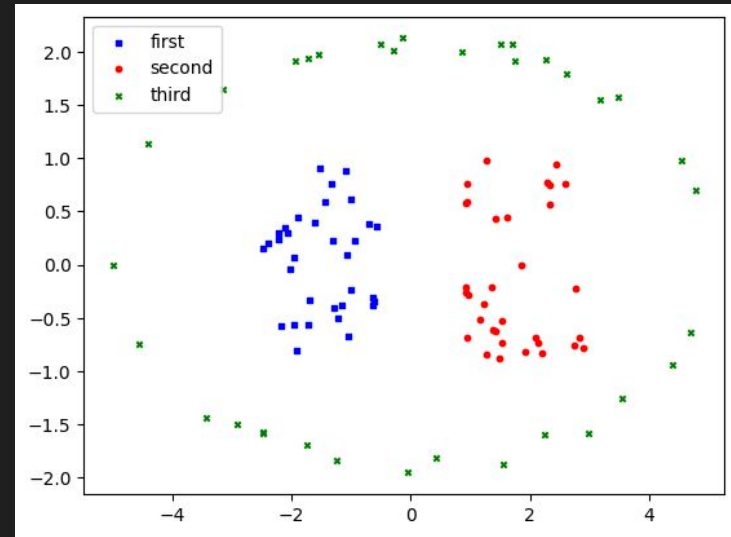
# 04

## Experimentos e Resultados



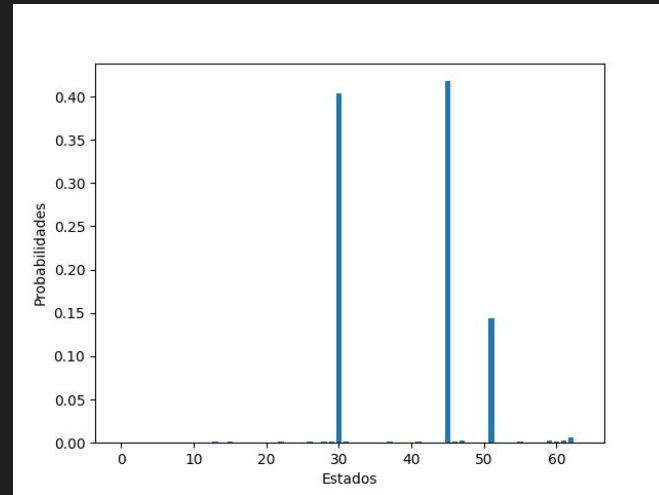
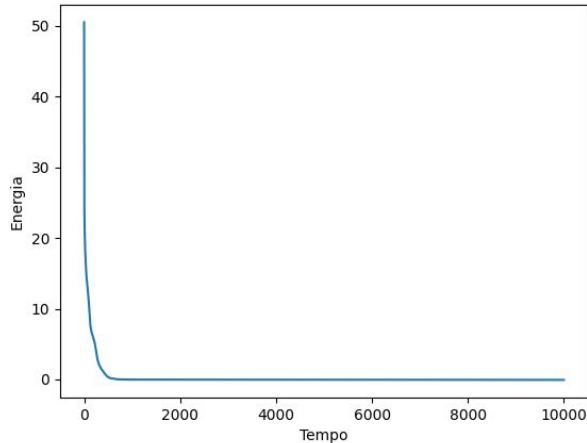
# Introdução

- ✦ Foco dos experimentos foi verificar a convergência do algoritmo FALQON para o estado de menor energia
- ✦ Utilizaram-se dois subconjuntos distintos da base de dados Boats (Kuncheva, 2005)



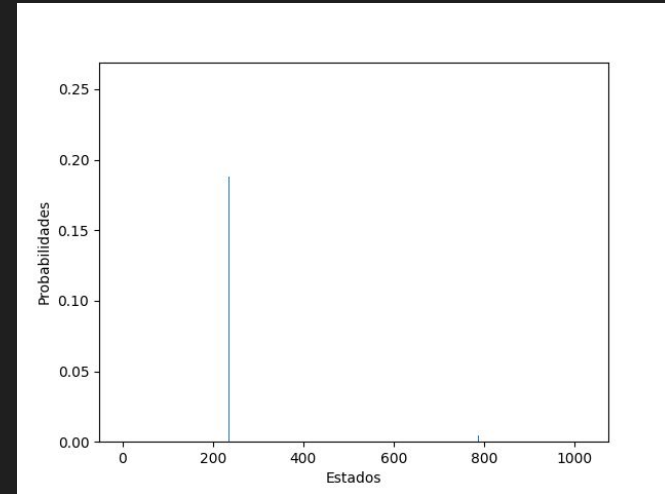
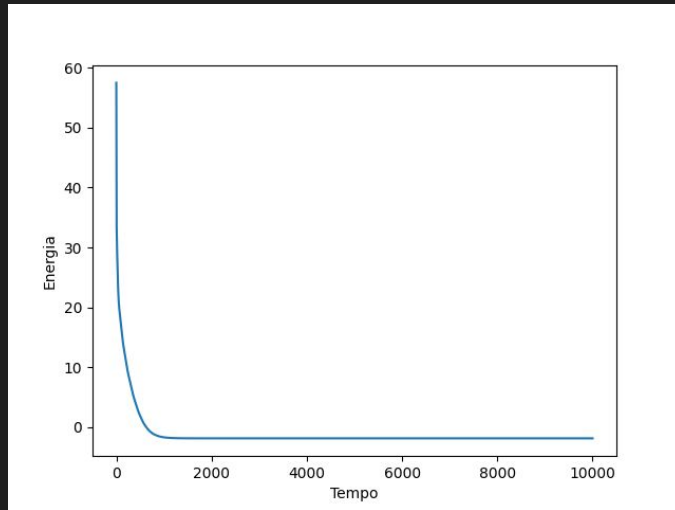
# Experimento 01

- Conjunto de dados composto por oito amostras distribuídas em duas classes



# Experimento 02

- Conjunto de dados composto por dez amostras distribuídas em duas classes



## Discussões



- ✦ O menor estado de energia foi alcançado nos dois experimentos
- ✦ A acurácia do modelo quântico e clássica foram iguais
- ✦ A integração de um algoritmo de otimização quântica foi possível no classificador baseado em floresta de caminhos ótimos
- ✦ Não foi possível simular utilizando os componentes da biblioteca Qiskit nem em hardware quântico real devido às alterações necessárias no algoritmo FALQON
- ✦ Poucos testes e conjunto de treinamento pequeno devido à limitação física

**05**

# Considerações Finais



## Conclusão

- ◆ Adquirir uma compreensão aprofundada dos fundamentos da computação quântica
- ◆ Integrar elementos da computação quântica em um modelo de aprendizado de máquina



## Trabalhos Futuros



- ✦ Aprimorar o algoritmo FALQON para que este possa ser simulado utilizando a biblioteca Qiskit e posteriormente em computadores quânticos
- ✦ Após adaptar o algoritmo para simulações, executá-lo em hardware quântico real
- ✦ Testar com outras bases de dados
- ✦ Estudar a implementação quântica do problema da MST





# Referências

GERON, A. Mãos à obra: aprendizado de máquina com Scikit-Learn e TensorFlow. 1. ed. [S.l.]: Alta Books, 2019. ISBN 9788550803814.

JORDAN, S. Traveling Santa problem. 2018. Disponível em: [http://quantumalgorithmzoo.org/traveling\\_santa/](http://quantumalgorithmzoo.org/traveling_santa/). Acesso em: 02 nov. 2023.

KUNCHEVA, L. Artificial data sets. 2005. Disponível em: [https://lucykuncheva.co.uk/activities/artificial\\_data.htm](https://lucykuncheva.co.uk/activities/artificial_data.htm). Acesso em: 02 nov. 2023.

MAGANN, A. B.; RUDINGER, K. M.; GRACE, M. D.; SAROVAR, M. Feedback-based quantum optimization. Physical Review Letters, v. 129, n. 25, p. 250502, dez. 2022. ISSN 0031-9007, 1079-7114. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/2103.08619>. Acesso em: 02 nov. 2023.



# Referências

NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. Quantum computation and quantum information. 10th anniversary. ed. United States of America: Cambridge University Press, 2010. ISBN 978-1-107-00217-3.

PAPA, J. P. Classificação supervisionada de padrões utilizando floresta de caminhos ótimos. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Computação, 2008. Disponível em: <https://hdl.handle.net/20.500.12733/1608859>. Acesso em: 02 nov. 2023

RABELO, W. R. M.; COSTA, M. L. M. Uma abordagem pedagógica no ensino da computação quântica com um processador quântico de 5-qbits. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 40, p. e4306, maio 2018. ISSN 1806-1117, 1806-9126. Publisher: Sociedade Brasileira de Física. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/1806-9126-RBEF-2018-0038>. Acesso em: 02 nov. 2023.



# Referências

ROSA, G. H. de; PAPA, J. P. OPFython: A Python implementation for OptimumPath Forest. Software Impacts, p. 100113, 2021. ISSN 2665-9638. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.simpa.2021.100113>. Acesso em: 02 nov. 2023.

WAKEHAM, D.; CERONI, J. Feedback-based quantum optimization (FALQON). PennyLane Demos, maio 2021. Disponível em: [https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial\\_falqon/](https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_falqon/). Acesso em: 02 nov. 2023



# Obrigada!

