



Ciência de Dados Quântica

Quantum Machine Learning

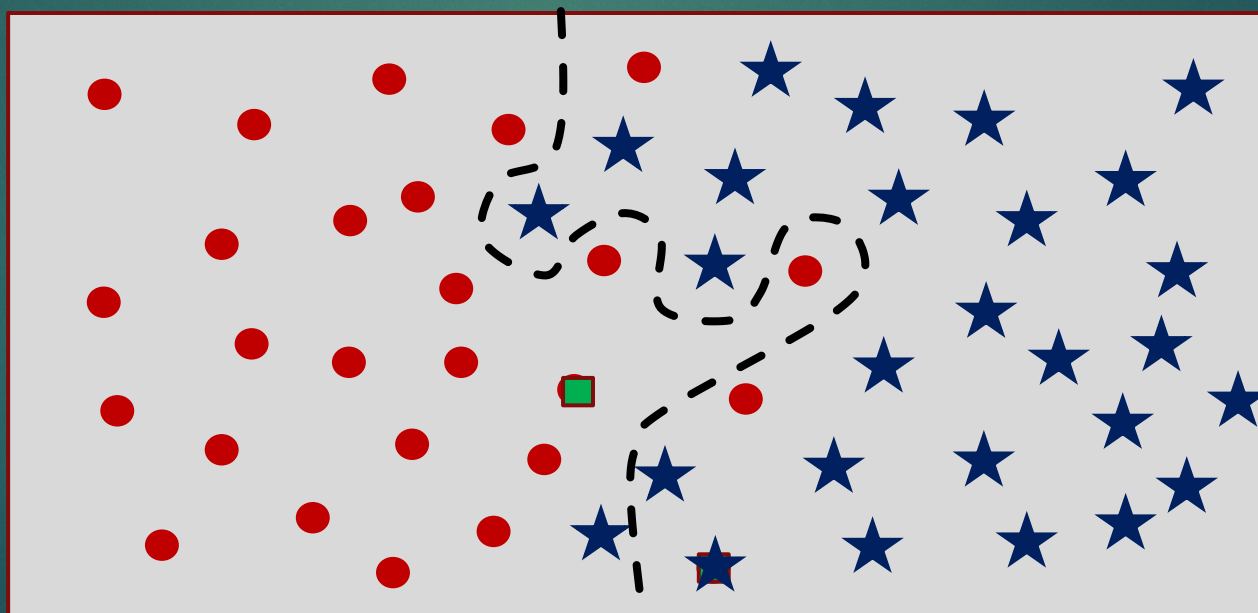
LUÍS PAULO SANTOS

- ▶ **“Machine Learning with Quantum Computers”**; Maria Schuld, Francesco Petruccione; Springer, Cham – Series “Quantum Science and Technology” Second Edition, November, 2021 – **Secção 1.1**
<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-83098-4>
- ▶ **“Is Quantum Advantage the Right Goal for Quantum Machine Learning?”**; Schuld, Maria and Killoran, Nathan; PRX Quantum, vol 3(3), 2022
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PRXQuantum.3.030101>
also: <https://arxiv.org/abs/2203.01340>

Machine Learning

3

- ▶ Entende-se por **aprendizagem máquina** o processo, realizado por uma máquina, de **desenvolvimento da capacidade de resolução** de um problema **a partir de exemplos** (dados) de soluções desse mesmo problema



Machine Learning

4

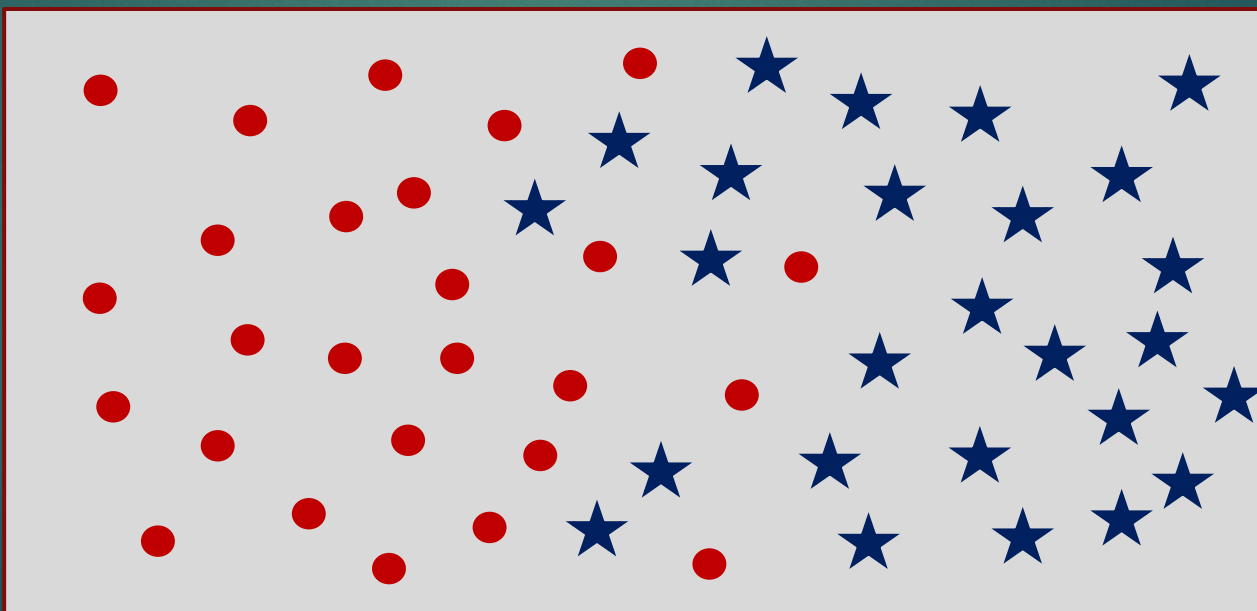
- ▶ ***Inductive learning*** versus ***deductive reasoning***
- ▶ ***Inductive***: do particular para o geral
 - ▶ dos dados para o modelo
- ▶ ***Deductive***: do geral para o particular
 - ▶ conjunto de regras a aplicar a cada instância dos dados
 - ▶ programação clássica, expert systems, ...

Machine Learning

5

- ▶ O problema a tratar é definido por uma função f^* **desconhecida** que a cada elemento do domínio \mathcal{X} associa um valor do contradomínio \mathcal{Y} :

$$f^*: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$$



Machine Learning

6

- ▶ Dados: $\mathcal{D} = \{(x^1, y^1), \dots, (x^M, y^M)\}, (x^i, y^i) \in \mathcal{X} \otimes \mathcal{Y}$
- ▶ Modelo: $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, que aproxima f^* ; $f \in \mathcal{F}$ - família de modelos
- ▶ Loss: $L(f(x), f^*(x)) = \begin{cases} 0 & f(x) = f^*(x) \\ > 0 & f(x) \neq f^*(x) \end{cases}$
- ▶ Objectivo: encontrar um modelo $f \in \mathcal{F}$ que minimize o valor esperado de loss em \mathcal{X}

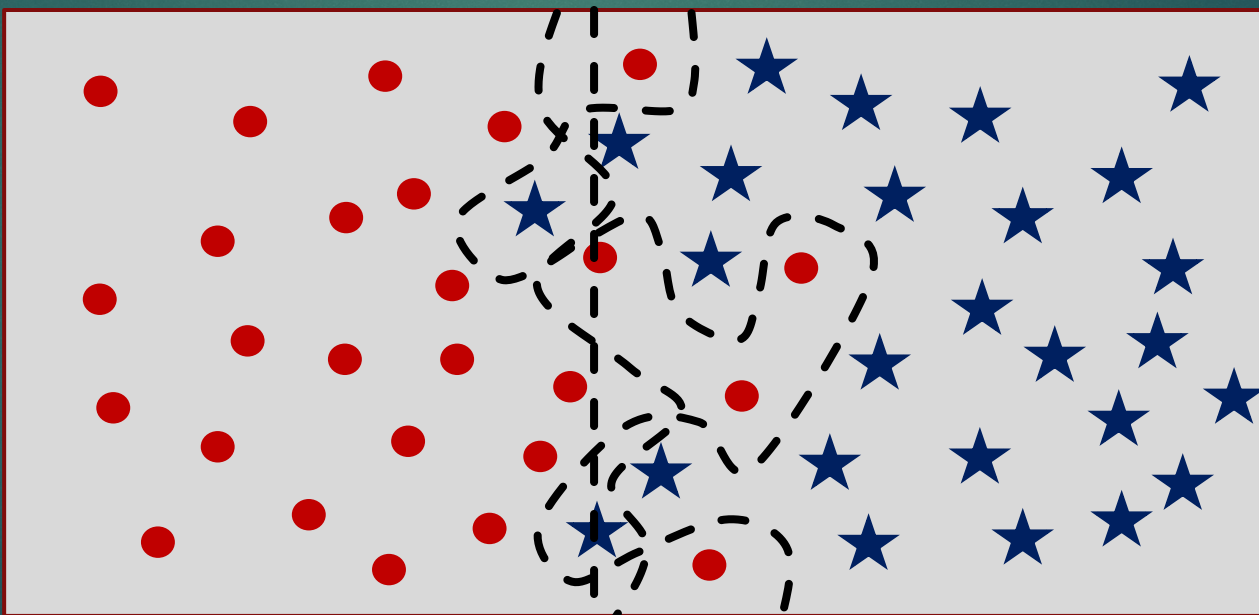
$$f = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{F}} \int_{\mathcal{X}} L(f(x), f^*(x)) dx$$

Machine Learning

7

- Objectivo: encontrar um modelo $f \in \mathcal{F}$ que minimize o valor esperado de loss em \mathcal{X}

$$f = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{F}} \int_{\mathcal{X}} L(f(x), f^*(x)) dx$$

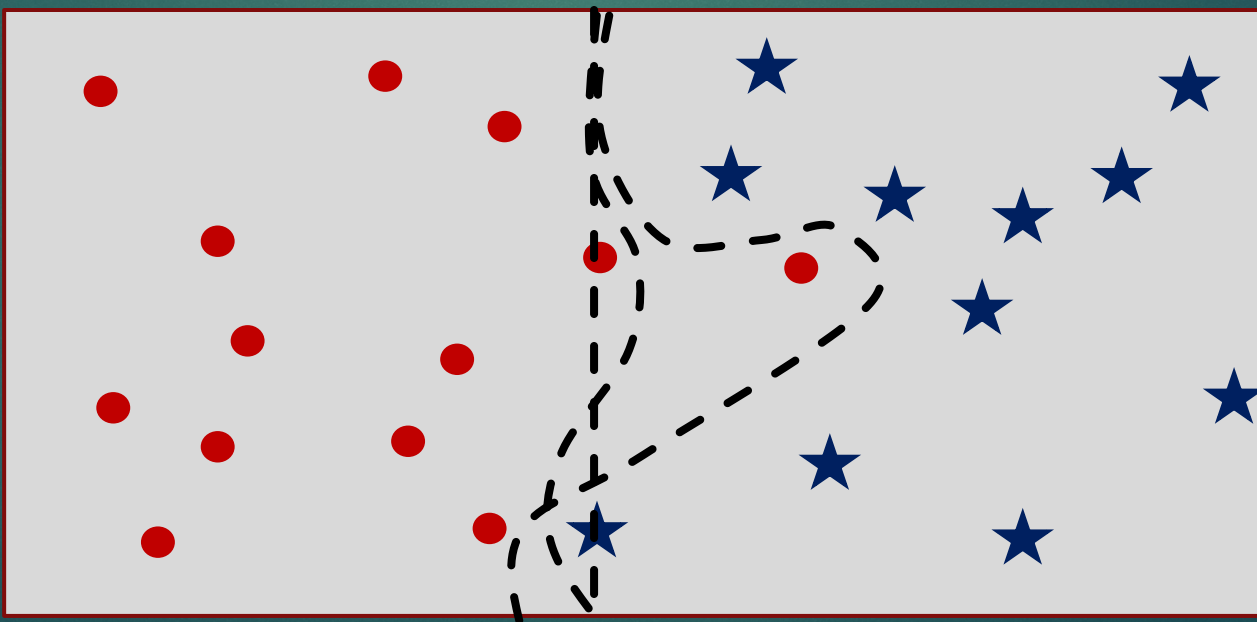


Machine Learning

8

- Objectivo realista: uma vez que f^* é desconhecida minimiza-se o **risco empírico**: encontrar um modelo $f \in \mathcal{F}$ que minimize o valor esperado de loss em \mathcal{D}

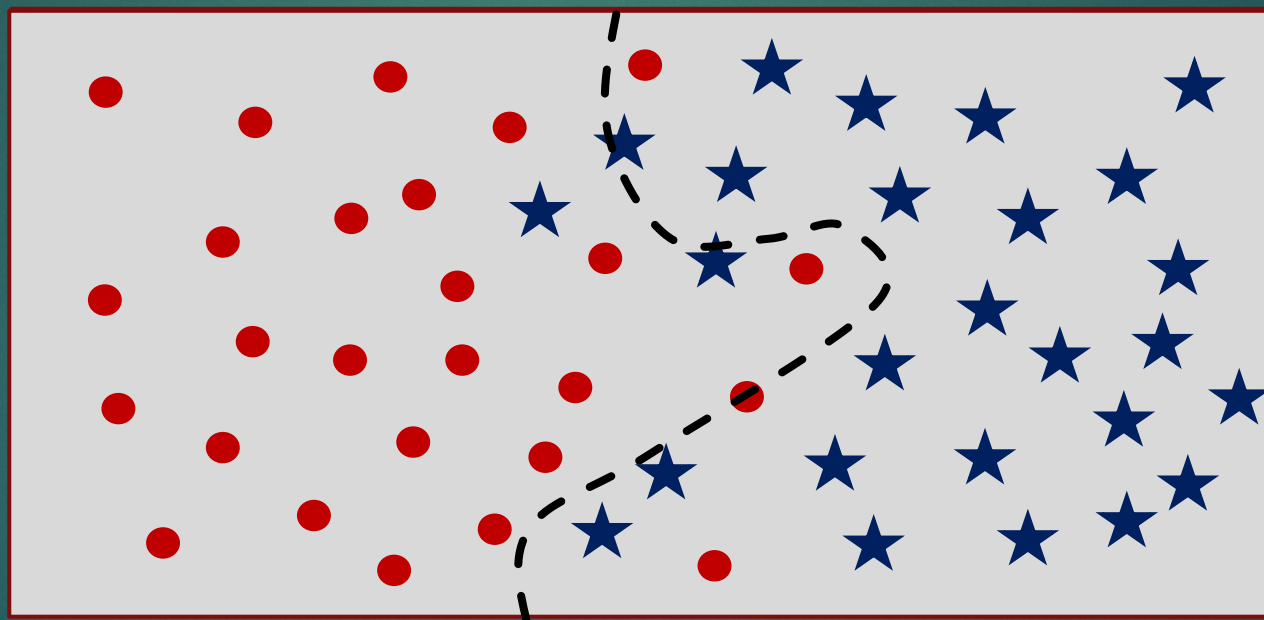
$$\hat{f} = \operatorname{argmin}_{f \in \mathcal{F}} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M L(f(x^i), y^i)$$



Machine Learning

9

- ▶ **Erro de generalização:** como é que \hat{f} se comporta em \mathcal{X} ?



Quantum Machine Learning

10

► **Machine Learning:** arte e ciência que permitem que **computadores aprendam** a resolver um problema a **partir de dados em vez de serem explicitamente programados** para resolver esse problema

► **Computação Quântica:** **processamento de informação** usando **dispositivos** que operam baseados directamente nas **leis da mecânica quântica**

► **Quantum Machine Learning:** abordagens que usam **sinergias** entre Machine Learning e Computação Quântica

Quantum Machine Learning

11

A utilização de técnicas matemáticas oriundas da mecânica quântica para desenvolver novos métodos de machine learning

A utilização de machine learning para analisar dados gerados por experiências quânticas

- ▶ No nosso contexto:
quantum machine learning é restringida a machine learning **realizada** (ou assistida) **por computadores quânticos**

Quantum Computing and Machine Learning

12

- ▶ A investigação nos últimos anos focou-se em algoritmos apropriados para sistemas NISQ
- ▶ Machine Learning e Optimização são frequentemente apontadas como **killer-apps** para estes sistemas

Quantum Computing and Machine Learning

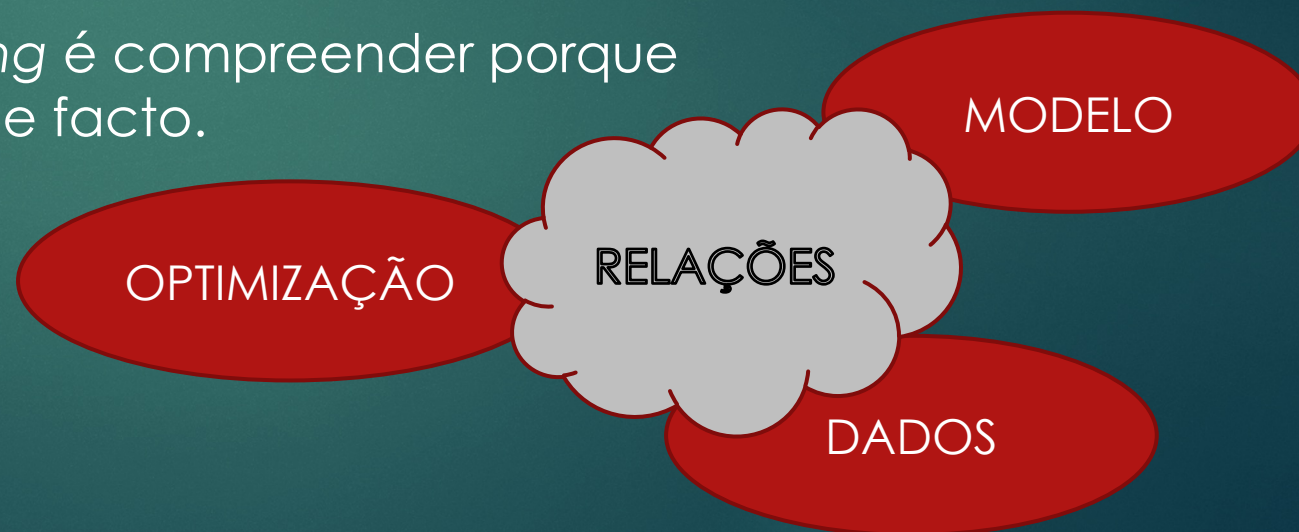
13

- ▶ Machine learning situa-se na intersecção entre estatística, matemática e ciências de computação
- ▶ Pode ser caracterizada como a abordagem *data driven* da Inteligência Artificial
- ▶ Analisa como podem os computadores aprender a fazer previsões ou resolver instâncias novas de um dado problema, usando conjuntos de dados anteriores
 - ▶ Usualmente estes conjuntos de dados são enormes, exibem relações não lineares e podem ser não estruturados

Quantum Computing and Machine Learning

14

- ▶ O sucesso do *machine learning* está essencialmente ligado ao *deep learning*, paradigma baseado em:
 - ▶ conectar redes neuronais altamente modulares para formas grandes arquitecturas;
 - ▶ alimentadas com GRANDES quantidades de dados;
 - ▶ treinadas em sistemas de alto desempenho.
- ▶ O grande desafio do *deep learning* é compreender porque é que o *deep learning* funciona de facto.



Vantagem quântica

15

- What is the advantage of quantum machine learning over classical machine learning?

Maria Schuld, 2020

<https://quantumcomputing.stackexchange.com/questions/13531/what-is-the-advantage-of-quantum-machine-learning-over-traditional-machine-learn>

“As so often, and especially in young research areas, the answer depends quite a lot on how you break down the question.”

1. Does quantum mechanics change what is theoretically learnable?
2. What asymptotic computational speedups can quantum computing provide for machine learning?
3. Can quantum computations give rise to machine learning models that generalise well?

Vantagem quântica

16

► Asymptotic complexity

“Quantum computing research is traditionally very focused on **exponential speedups** [...].

But they rely on lots of assumptions about how you load your data into a quantum computer, and how to process the results. [...]

it is not always clear how good classical methods are in this case. ”

[Schuld 2020, 2021, 2022]

Vantagem quântica

17

► Generalization:

“...if the goal is to build powerful generalisers,

but the theoretical foundations of generalisation are poorly understood even in classical machine learning,

and our current devices are too small and noisy to run meaningful empirical benchmarks,

how can one actually show that the quantum model has an advantage?”

[Schuld 2020, 2021, 2022]

Vantagem quântica

18

► Conclusion:

machine learning is a challenging problem to improve by quantum computers due to:

- . the good performance of existing algorithms,
- . large inputs in many applications,
- . the complex mathematical structure of the basic problems,
- . the little we know about why the best models perform so well,

forcing us to gather evidence by benchmarks rather than guiding it by theory.

[Schuld 2020, 2021, 2022]

Quantum Computing and Machine Learning

19

- ▶ **Desafio** - desenvolvimento de um computador quântico:
 - ▶ Controlo preciso dos estados quânticos → ruído
 - ▶ Manutenção da coerência do estado quântico → tamanho e tempo de execução

NISQ

versus

Fault
Tolerant

- Short circuits
- Hybrid algorithms

- variational
- iterative

- Grover
- Shor (QFT)
- QAE

Not for now

QML: História

20

- ▶ 1995 – Modelos quânticos de redes neuronais
S.C. Kak, Advances in Imaging and Electron Physics 94, 259 (1995)
- ▶ 2000 .. 2009 – Primeiras workshops em “Quantum Computation and Learning”
- ▶ 2013 – O termo Quantum Machine Learning aparece pela 1ª vez:
Seth Lloyd, Masoud Mohseni, and Patrick Rebentrost. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning. arXiv preprint arXiv:1307.0411, 2013
- ▶ 2014 – Peter Wittek publica uma monografia seminal na área:
Wittek, P.: Quantum Machine Learning: What Quantum Computing Means to Data Mining. Academic Press (2014)
- ▶ 2014 .. Presente – o interesse pela área aumenta exponencialmente, levando a:
 - ▶ novas visões e novas abordagens
 - ▶ multitude de empresas
 - ▶ Variedade de packages de software (PennyLane, TensorFlow Quantum, Yao, Qiskit ML)

QML: tipologias

21

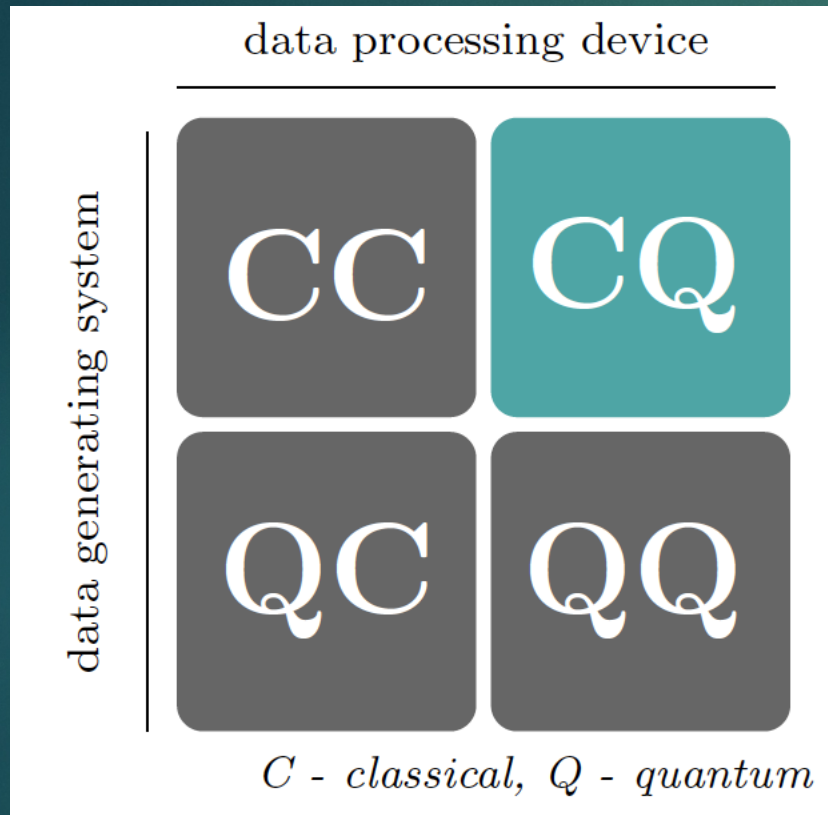


Image from [Schuld2021]

- Dados gerados por um sistema clássico (C) ou quântico (Q)
- Dispositivo de processamento de informação clássico (C) ou quântico (Q)

Gilles Brassard, E.A., Gambs, S.: Machine learning in a quantum world. In: Advances in Artificial Intelligence, pp. 431–442. Springer (2006)

QML: tipologias

22

- ▶ **CC** – dados clássicos processados classicamente.

Neste contexto refere-se à utilização de técnicas oriundas da mecânica quântica no machine learning clássico

Exemplos:

- ▶ Aplicação de redes de tensores, desenvolvidas para sistemas many-body quânticos, no treino de redes neurais
- ▶ Utilização de algoritmos clássicos desenvolvidos a partir de algoritmos quânticos e com garantias semelhantes de desempenho

QML: tipologias

23

- ▶ **QC** – dados quânticos processados classicamente.

Como pode o machine learning clássico contribuir para desenvolvimentos na computação quântica

Exemplos:

- ▶ Utilização de redes neuronais para descrever, de forma compacta, estados quânticos
- ▶ Técnicas de machine learning para discriminar entre estados quânticos
- ▶ Análise de dados gerados por experiências quânticas

QML: tipologias

24

- **CQ** – dados clássicos processados por sistema quântico

Foco desta Unidade curricular

Os dados consistem em observações de sistemas clássicos (ex.: séries temporais, imagens, texto) que são carregados para o sistema quântico.

Este carregamento de dados requer um interface clássico-quântico que constitui frequentemente o maior obstáculo a ganhos exponenciais relativamente ao processamento clássico

QML: tipologias

25

- ▶ **QQ** – dados quânticos processados por sistema quântico

O conjunto de dados é constituído por estados quânticos

Exemplos:

- ▶ Controlo do sistemas quânticos
- ▶ Simulação de um sistema quântico pela máquina quântica, seguida da análise de resultados pelo mesmo sistema quântico

Muitos métodos CQ aplicam-se directamente ao caso QQ removendo a rotina de carregamento de dados

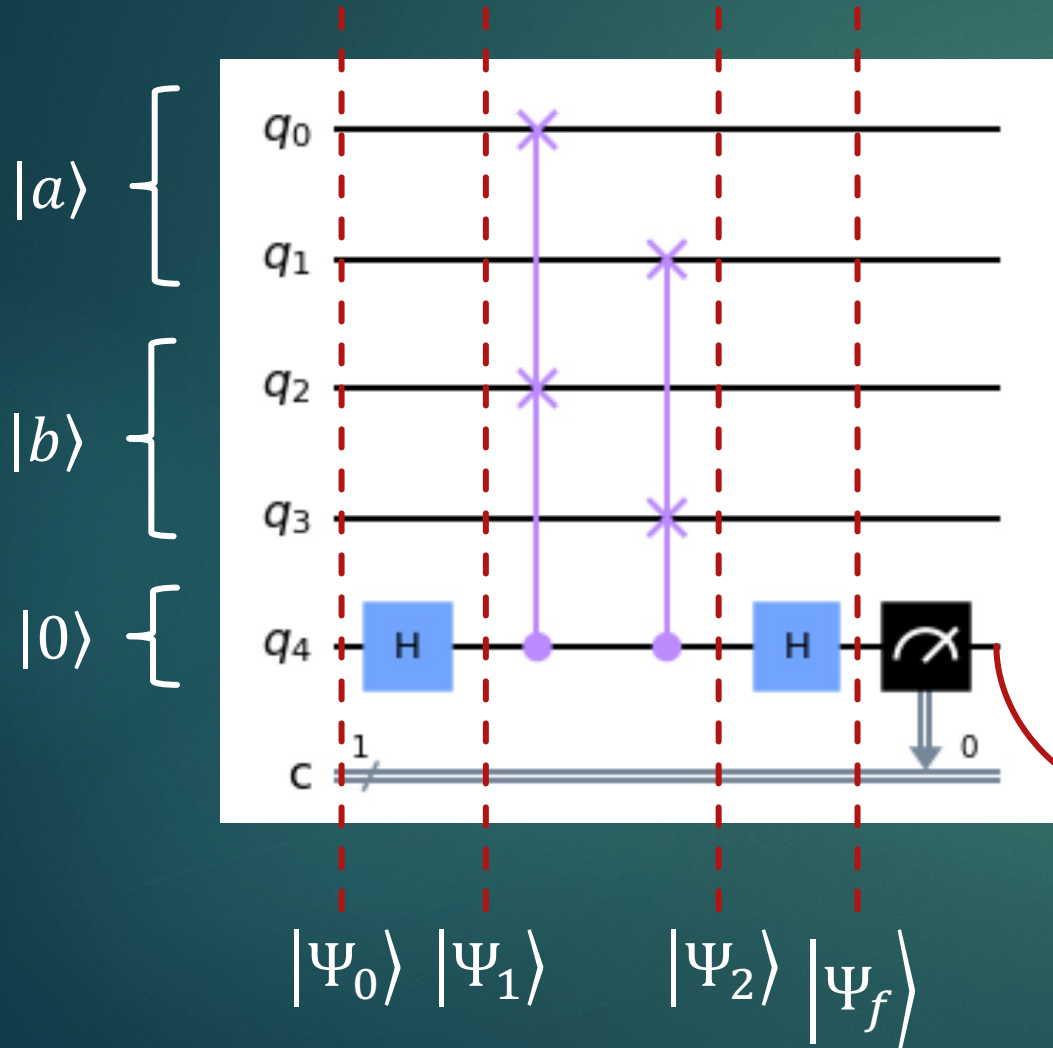
Exemplo: comparação de estados

26

- ▶ $|\langle a|b\rangle|^2$ - *overlap*: comparação de dois estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$
- ▶ Existe uma família de pequenos circuitos para estimar o *overlap*:
 - ▶ **SWAP test**
 - ▶ Hadamard test
 - ▶ Inversion test

Exemplo: SWAP test

27



$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |a\rangle \otimes |b\rangle = |0\rangle |a\rangle |b\rangle$$

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle |a\rangle |b\rangle + |1\rangle |a\rangle |b\rangle]$$

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle |a\rangle |b\rangle + |1\rangle |b\rangle |a\rangle]$$

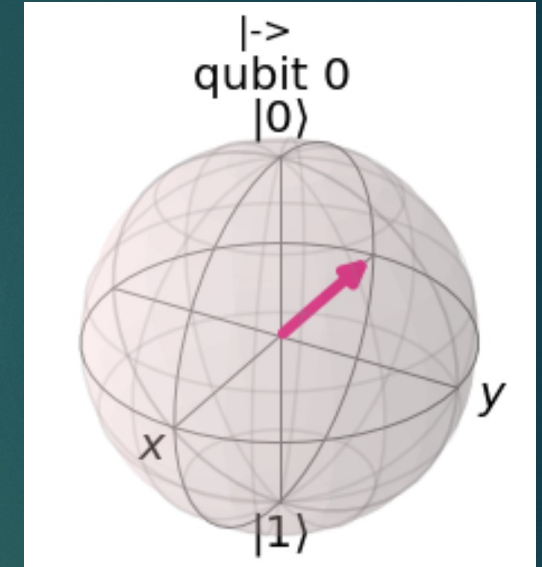
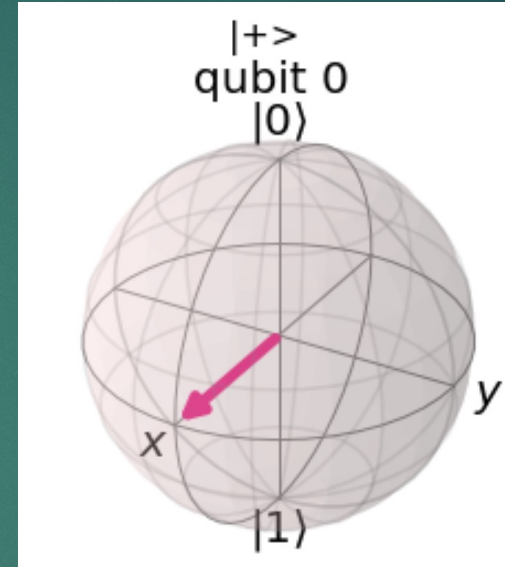
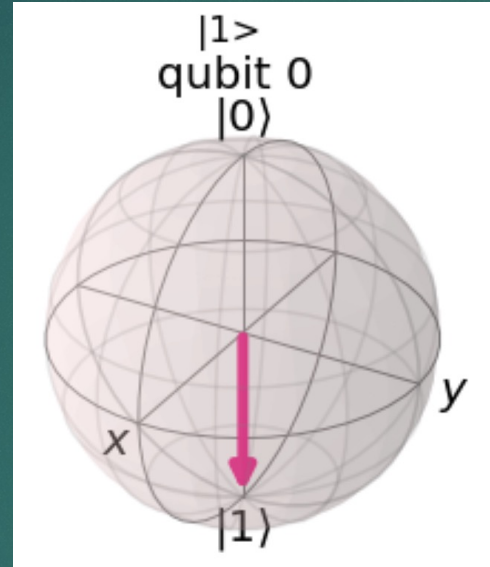
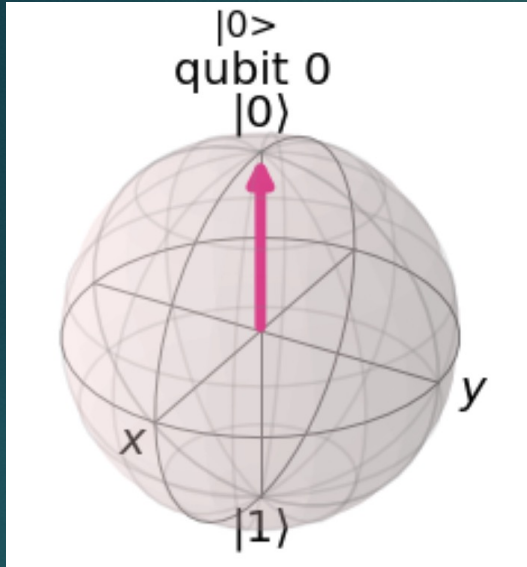
$$|\Psi_f\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle [|a\rangle |b\rangle + |b\rangle |a\rangle] + \frac{1}{2} |1\rangle [|a\rangle |b\rangle - |b\rangle |a\rangle]$$

$$P(q_4 = 0) = p_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} |\langle a|b\rangle|^2$$

$$|\langle a|b\rangle|^2 = 2 * p_0 - 1$$

Exemplo: SWAP test

28



$$[\langle 0|0\rangle]^2 = 1.000$$

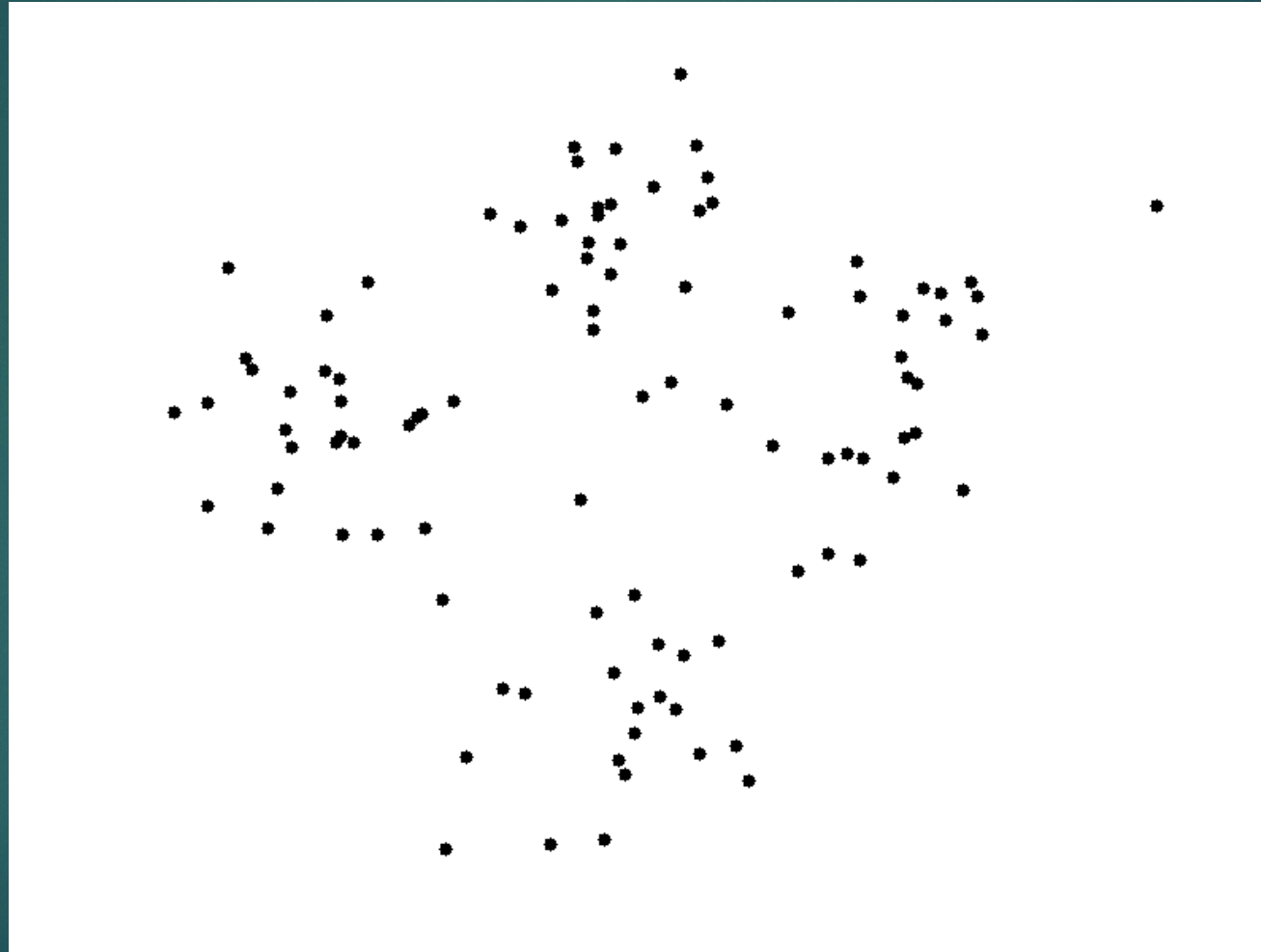
$$[\langle 0|1\rangle]^2 = 0.008$$

$$[\langle 0|+\rangle]^2 = 0.502$$

$$[\langle -|+\rangle]^2 = -0.010$$

Exemplo: SWAP test e *clustering*

29



[<http://shabal.in/visuals.html>]

Exemplo: SWAP test e classificação

30

