

Project - Κβαντική Μηχανική Μάθηση

Παναγιώτα Γύφτου, Α.Μ.: 1115201900318

Ιούνιος 2024

Περίληψη

Η εργασία έχει ως κύριο στόχο την υλοποίηση και την ανάλυση ενός κβαντικού ταξινομητή, χρησιμοποιώντας ένα παραμετρικό κβαντικό κύκλωμα για τη ταξινόμηση δεδομένων στο πρόβλημα της δυαδικής ταξινόμησης με τρία και πέντε διαστάσεων δεδομένα, καθώς και πειραματικούς ελέγχους για τη βελτιστοποίηση του υλοποιημένου μοντέλου.

Προεπεξεργασία δεδομένων

Πριν την εκπαίδευση ενός κβαντικού μοντέλου μηχανικής μάθησης, είναι σημαντική η προεπεξεργασία των δεδομένων, καθώς βελτιώνει την ποιότητα των δεδομένων, με αποτέλεσμα το μοντέλο που εκπαιδεύεται στα δεδομένα να είναι πιο ακριβές και αξιόπιστο.

Στην εργασία έχουν εφαρμοστεί οι εξής τεχνικές επεξεργασίας:

- Μείωση μεγέθους δεδομένων κατά 0.5: Τα δεδομένα κανονικοποιούνται προς το κάτω κατώφλι τους.
- Standardization: Το *standardization* είναι η διαδικασία επαναπροσδιορισμού των χαρακτηριστικών έτσι ώστε να έχουν μηδενικό μέσο όρο ($\mu = 0$) και τυπική απόκλιση ίση με 1 ($\sigma = 1$). Έτσι διευκολύνεται η σύγκριση μεταξύ διαφορετικών χαρακτηριστικών που έχουν διαφορετικές κλίμακες. Τα δεδομένα σε ομογενή κλίμακα βοηθούν κατά την εκπαίδευση του μοντέλου τους αλγόριθμους βελτιστοποίησης να συγκλίνουν πιο γρήγορα και με σταθερότητα.

Αρχιτεκτονική του κβαντικού μοντέλου

Η αρχιτεκτονική του κβαντικού μοντέλου αποτελείται από τα εξής μέρη:

Κβαντικό κύκλωμα

- Κωδικοποίηση Δεδομένων**

Το πρώτο βήμα σε ένα κβαντικό κύκλωμα είναι η κωδικοποίηση των δεδομένων σε κβαντική μορφή, καθώς οι κβαντικοί υπολογιστές επεξεργάζονται πληροφορίες σε κβαντικές καταστάσεις (*qubits*) αντί για κλασσικές δυαδικές καταστάσεις (*bits*). Εδώ γίνεται χρήση του κωδικοποιητή *AngleEmbedding*. Ο εν λόγω αλγόριθμος κωδικοποιεί τα χαρακτηριστικά των δεδομένων x ως γωνίες περιστροφής, μεταφέροντας έτσι την πληροφορία στα *qubits*, δηλαδή κάθε χαρακτηριστικό δεδομένων μεταφράζεται σε μια συγκεκριμένη γωνία περιστροφής ενός *qubit*. Εδώ γίνεται περιστροφή στον άξονα Y .

- Κβαντική Επεξεργασίας Πληροφορίας**

Σε αυτό το σημείο εφαρμόζονται κβαντικές πύλες περιστροφής (RX , RY , RZ) και σύζευξης ($CNOT$), ώστε να μετατραπεί και να αναλυθεί η πληροφορία που έχει κωδικοποιηθεί στα *qubits*.

Οι πύλες περιστροφής σε συνδυασμό, δημιουργούν έναν ευέλικτο και μεγάλο χώρο αναζήτησης για τη κωδικοποίηση των παραμέτρων του μοντέλου. Η επανάληψη των περιστροφών σε κάθε *layer*, δίνει στο μοντέλο την δυνατότητα να επεξεργάζεται και να αναλύει πολλαπλές εισόδους ταυτόχρονα, δηλαδή εκμεταλλεύεται την υπέρθεση των

qubit.

Εκτός από την παράλληλη επεξεργασία πληροφοριών, το μοντέλο αποκτά ανθεκτικότητα στο θόρυβο, καθώς οι πολλαπλές στρώσεις μπορεί να βοηθήσουν στη μείωση των επιπτώσεων του θορύβου, μέσω της δημιουργίας πιο σταθερών και αλληλεπιδραστικών καταστάσεων.

Η εφαρμογή των πυλών *CNOT*, δημιουργεί συσχέτιση μεταξύ των *qubits*, βοηθώντας στην μοντελοποίηση πολύπλοκων σχέσεων στα δεδομένα, χαρίζοντας υπολογιστική ισχύ στο κύκλωμα, βελτιώνοντας την αποδοτικότητα και την ακρίβεια του μοντέλου.

Στο τέλος χρησιμοποιούμε τον τελεστή *Pauli – Z*, ώστε να αξιοποιηθεί η προσδοκώμενη τιμή για το πρώτο *qubit* ως πρόβλεψη.

Συνάρτηση Κόστους

Η συνάρτηση κόστους αξιολογεί την απόδοση του μοντέλου, τόσο κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης του, όσο και κατά την αξιολόγηση (*testing*). Οι τιμές κόστους είναι σημαντικές για την ανίχνευση των φαινομένων *overfitting* και *underfitting*.

Συνάρτηση Ακρίβειας

Η συνάρτηση ακρίβειας υπολογίζει την ακρίβεια του μοντέλου μετρώντας τον αριθμό των σωστών προβλέψεων.

Πειραματικοί Έλεγχοι

Ύστερα από πειραματικούς ελέγχους των συναρτήσεων απώλειας *MAE*, *MSE*, *RMSE*, *MAPE*

και συναρτήσεων βελτιστοποίησης *AdamOptimizer*,

AdagradOptimizer,

GradientDescentOptimizer,

MomentumOptimizer,

NesterovMomentumOptimizer,

RMSPropOptimizer

εξάγουμε τις εξής πληροφορίες:

	Epoch				Accuracy			
	MAE	MSE	RMSE	MAPE	MAE	MSE	RMSE	MAPE
<i>AdamOptimizer</i>	18	18	7	12	1.000	0.925	1.000	1.000
<i>AdagradOptimizer</i>	12	15	12	14	1.000	1.000	1.000	1.000
<i>GradientDescentOptimizer</i>	1	8	1	1	0.500	0.550	0.500	0.500
<i>MomentumOptimizer</i>	18	17	5	20	0.600	1.000	0.550	0.750
<i>NesterovMomentumOptimizer</i>	16	14	20	20	1.000	1.000	0.725	0.700
<i>RMSPropOptimizer</i>	5	3	5	13	1.000	1.000	1.000	1.000

Σχήμα 1: *Best epoch – accuracy*

	Epoch				Cost			
	MAE	MSE	RMSE	MAPE	MAE	MSE	RMSE	MAPE
<i>AdamOptimizer</i>	20	20	18	17	0.624	0.452	0.476	0.488
<i>AdagradOptimizer</i>	13	20	20	20	0.697	0.326	0.469	0.496
<i>GradientDescentOptimizer</i>	14	16	3	8	0.988	1.110	1.041	0.986
<i>MomentumOptimizer</i>	20	20	20	20	0.844	0.254	1.011	0.734
<i>NesterovMomentumOptimizer</i>	18	18	20	20	0.441	0.257	0.859	0.834
<i>RMSPropOptimizer</i>	17	16	19	17	0.451	0.185	0.456	0.466

Σχήμα 2: Best accuracy – cost

	The average accuracy of all loss functions.	The average cost of all loss functions.
<i>AdamOptimizer</i>	0.98125	0.51
<i>AdagradOptimizer</i>	1.000	0.497
<i>GradientDescentOptimizer</i>	0.5125	1.03125
<i>MomentumOptimizer</i>	0.725	0.71075
<i>NesterovMomentumOptimizer</i>	0.85625	0.59775
<i>RMSPropOptimizer</i>	1.000	0.3895

Σχήμα 3: The average accuracy – cost of all loss functions

	The average accuracy of all optimization methods.	The average cost of all optimization methods.
MAE	0.85	0.67417
MSE	0.9125	0.43067
RMSE	0.79583	0.71867
MAPE	0.825	0.66733

Σχήμα 4: The average accuracy – cost of all optimization methods

Παρατηρούμε ότι το μοντέλο άγγιξε την απόλυτη ακρίβεια αρκετές φορές, ωστόσο οι καλύτεροι βελτιστοποιητές με μέγιστο μέσο όρο ακρίβειας -και στις 4 συναρτήσεις απώλειας- είναι ο *RMSPropOptimizer* & *AdagradOptimizer* με 1.000 ενώ ο χειρίστος είναι ο *GradientDescentOptimizer* με 0.5125. Όσον αφορά το κόστος, ο βελτιστοποιητής με ελάχιστο μέσο όρο κόστους είναι ο *RMSPropOptimizer* με 0.3895 ενώ ο χειρίστος με μέγιστο μέσο όρο κόστους είναι ο *GradientDescentOptimizer* με 1.03125.

Από τις συναρτήσεις απώλειας, η καλύτερη με μέγιστο μέσο όρο ακρίβειας, για όλους τους βελτιστοποιητές είναι η συνάρτηση του μέσου απόλυτου σφάλματος *MSE* με 0.9125 και ελάχιστο μέσο όρο κόστους 0.43067.

Η εποχή στην οποία ανιχνεύθηκε νωρίς η καλύτερη ακρίβεια κατά την εκπαίδευση του μοντέλου, ήταν η 3 με ακρίβεια 1.000 με βελτιστοποιητή *RMSPropOptimizer* και συνάρτηση απώλειας το μέσο τετραγωνικό σφάλμα *MSE*.

Ενώ, το ελάχιστο κόστος (0.185) με την απόλυτη τιμή ακρίβειας (1.000), παρατηρήθηκε στην εποχή 16 με βελτιστοποιητή

RMSPropOptimizer και συνάρτηση απώλειας *MSE*.

Συνοψίζοντας, παρατηρούμε ότι γενικά ο καλύτερος μεταξύ των εξεταζόμενων μεθόδων βελτιστοποίησης, είναι ο *RMSPropOptimizer* και η καλύτερη συνάρτηση απώλειας είναι το μέσο απόλυτο σφάλμα *MSE*.

Επέκταση του μοντέλου για εφαρμογή σε 5 διαστάσεων δεδομένα

Το μοντέλο μας μπορεί να τροποποιηθεί ώστε να διαχειρίζεται δεδομένα 5 διαστάσεων ως εξής:

Στην συνάρτηση *data_encoding*, η κωδικοποίηση των 5 διαστάσεων δεδομένων σε 3 *qubits*, γίνεται μέσω δύο διαδοχικών *AngleEmbedding* που χρησιμοποιούν διαφορετικούς άξονες περιστροφής (*Y* και *X*).

Πιο αναλυτικά,

- Πρώτη Ενσωμάτωση (*AngleEmbedding* με rotation '*Y*'):

Αρχικά ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί τα πρώτα 3 στοιχεία του διανύσματος x (δηλαδή τα $x[0], x[1], x[2]$) και στη συνέχεια εφαρμόζει *AngleEmbedding* στους άξονες *Y* των 3 *qubits*.

- Δεύτερη Ενσωμάτωση (*AngleEmbedding* με rotation '*X*'):

Εδώ ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί τα υπόλοιπα 2 στοιχεία του διανύσματος x (δηλαδή τα $x[3], x[4]$) και τέλος εφαρμόζει την ενσωμάτωση *AngleEmbedding* στους άξονες *X* των 3 *qubits*.

Η καλύτερη ακρίβεια που επιτυγχάνεται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης, είναι 0.613 στην εποχή 15 με ελάχιστο κόστος 1.0747604969156002. Τέλος η ακρίβεια των προβλέψεων του *test set* είναι 0.6.

Βιβλιογραφία

1. <https://pennylane.ai>
2. https://eclass.uoa.gr/modules/document/file.php/DI641/Project_bibliography/data_re-encoding.pdf
3. https://eclass.uoa.gr/modules/document/file.php/DI641/Project_bibliography/parameter_shift_rule.pdf