

Pre-procesamiento Cuántico de datos para segmentación de pulmones en imágenes de rayos-X con algoritmos variacionales cuánticos

Luis Daniel Ruiz Rozo

Facultad de ingeniería, Universidad de Palermo, Buenos Aires, Argentina

2024

Abstract— El proceso de segmentación y contexto en imágenes, actualmente lo hacen los modelos clásicos, específicamente los de arquitectura tipo U-net con redes neuronales convolucionales de manera eficiente. Con la capacidad de procesamiento cuántica ideal, se podría llegar a la optimización en el entrenamiento de estos y demás modelos debido a la naturaleza de los fenómenos por los cuales se rige la computación cuántica. Este enfoque combina inteligencia artificial y computación cuántica, aplicada a la segmentación de pulmones en imágenes de rayos-X, preprocesando los datos de manera cuántica para el entrenamiento de modelos clásicos.

Palabras clave— Inteligencia artificial, Redes neuronales convolucionales, Computación cuántica, Algoritmos variacionales cuánticos, Segmentación de imágenes.

I. Introducción

Con el fin de demostrar que podemos utilizar herramientas de código abierto como PennyLane [1] que permiten diseñar soluciones y arquitecturas híbridas (clásicas-cuánticas) de redes neuronales artificiales [1], [2], haciendo uso de la computación cuántica [3], se elige la arquitectura de un modelo clásico de redes neuronales convolucionales [2] de tipo U-net [4] para posteriormente ser convertido a un modelo híbrido aplicando técnicas de Quantum Machine Learning [5] para la segmentación de pulmones en imágenes de rayos-X [4].

En los últimos años, la computación cuántica [3] ha surgido como un nuevo y emocionante campo de investigación y desarrollo que promete resolver algunos de los problemas computacionalmente más demandantes y complejos de la humanidad. La computación cuántica se basa en los fenómenos de la mecánica cuántica como el entrelazamiento y la superposición [6].

Una de las convergencias tecnológicas más prometedoras de la computación cuántica es con la inteligencia artificial específicamente con la rama del aprendizaje automático con redes neuronales [2], haciendo uso de algoritmos cuánticos [3], [7] para diseñar nuevas soluciones de una forma híbrida [1], [7].

Para poder llevar a cabo este tipo de desarrollo, hacemos uso de PennyLane [1] una librería escrita en Python con clases y funciones propias del aprendizaje automático cuántico, que

permite diseñar y probar circuitos cuánticos [3], [7] para posteriormente ser abstraídos como una capa de preprocesamiento de datos para un modelo de redes neuronales [2].

A. Computación Cuántica

La computación cuántica [3] es un campo interdisciplinario que combina los fenómenos de la física cuántica [6], la teoría de la información y las ciencias de la computación [3]. Se basa en el uso de qubits [3], que es la unidad básica de la información cuántica, para realizar cálculos de manera más eficiente y resolver problemas que son inherentemente difíciles para las computadoras clásicas.

B. Quantum Machine Learning

El aprendizaje automático cuántico [1] es una rama de la computación cuántica [3] que combina los principios del aprendizaje automático clásico [2] con los fenómenos de la mecánica cuántica [6]. Lo que puede conducir a mejoras significativas en el entrenamiento de los modelos de aprendizaje automático. Algunos recursos relevantes sobre quantum machine learning incluyen el artículo de Schuld et al., *An introduction to quantum machine learning* [5] y el libro de Schuld y Petruccione, *Machine Learning with Quantum Computers* [8].

C. PennyLane

PennyLane [1] es una librería de software de código abierto diseñada para el desarrollo de algoritmos de aprendizaje automático cuántico [5], [8]. Proporciona una interfaz de programación de alto nivel que permite a los usuarios construir y simular circuitos cuánticos [3], [7], [9], así como entrenar modelos de aprendizaje automático utilizando simuladores cuánticos o computadoras cuánticas reales [10].

D. Redes Neuronales Convolucionales

Las redes neuronales convolucionales [2] son una arquitectura de redes neuronales usadas en el campo de visión por computadora y diseñadas específicamente para procesar imágenes en forma de tensores (multi-dimensional arrays) [11], para extraer características y patrones relevantes de las imágenes se utilizan diferentes capas y arquitecturas junto con demás operaciones propias de las redes neuronales convolucionales [2], [12].

E. Arquitectura U-Net

La arquitectura U-Net[4] es una arquitectura de redes neuronales convolucionales[2] ampliamente utilizada en tareas de segmentación y generación de imágenes. Se caracteriza por su diseño simétrico en forma de U, que permite la combinación de características de diferentes niveles de resolución mediante conexiones residuales. Esta arquitectura ha demostrado ser eficaz en aplicaciones médicas y de visión por computadora. Ver Fig 1.

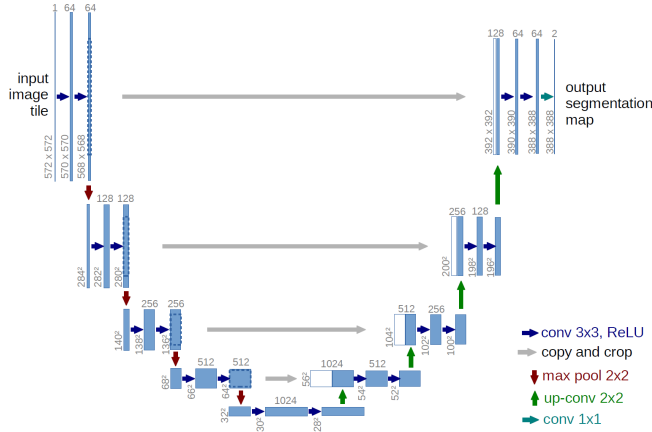


Fig. 1. Imagen arquitectura de tipo U-net

II. Caso de estudio

En este caso de estudio, exploramos la aplicación de la computación cuántica[3] en el campo de la medicina, específicamente en la segmentación de pulmones en imágenes de rayos-x[4], ver Fig 2. La segmentación de pulmones es una tarea crítica en el diagnóstico y tratamiento de imágenes de enfermedades pulmonares.

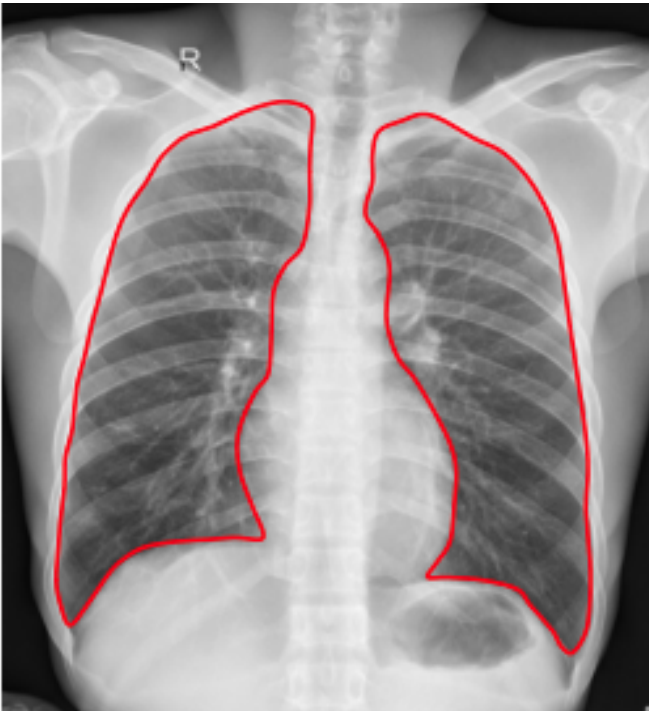


Fig. 2. Imágen de rayos-X con pulmones segmentados por modelo de redes neuronales convolucionales

A. Computación Cuántica aplicada a la medicina

La computación cuántica ofrece el potencial de abordar desafíos computacionales complejos de manera más eficiente que las computadoras clásicas. En este contexto, se pueden diseñar y crear algoritmos cuánticos junto con técnicas de aprendizaje automático cuántico para mejorar la precisión y la velocidad de entrenamiento de los modelos clásicos. La combinación de técnicas clásicas y cuánticas puede conducir a avances significativos en el diagnóstico y tratamiento de enfermedades, mejorando la precisión y la eficiencia de los procesos médicos relacionados teniendo el hardware necesario para poder correr este tipo de aplicaciones.

III. Marco teórico

A. Redes Neuronales Convolucionales

Las redes neuronales convolucionales son un tipo de modelo de aprendizaje automático ampliamente utilizado en el procesamiento de imágenes. Estas redes utilizan capas de convolución para extraer características locales de las imágenes y así aprender automáticamente patrones como bordes, texturas y formas. Han demostrado ser altamente efectivas en tareas de visión por computadora, como el reconocimiento de objetos, segmentación y clasificación de imágenes[12].

B. Circuitos Cuánticos

Los circuitos cuánticos son una representación computacional que utiliza qubits y compuertas cuánticas para realizar cálculos en el ámbito de la mecánica cuántica. Estos circuitos permiten aprovechar las propiedades únicas de la superposición y la interferencia cuántica para resolver problemas específicos de manera eficiente. Los circuitos cuánticos se utilizan en la computación cuántica y pueden ser implementados físicamente utilizando sistemas como átomos, iones o qubits superconductores[3].

C. Compuertas Cuánticas Universales

Las compuertas cuánticas universales son un conjunto de operaciones que pueden ser utilizadas para construir cualquier circuito cuántico posible. Estas compuertas, como la compuerta de Hadamard y las compuertas de Pauli, permiten manipular la información cuántica y realizar transformaciones en el espacio de Hilbert. Las compuertas cuánticas universales son fundamentales en la construcción de algoritmos cuánticos y en la realización de cálculos en sistemas cuánticos[6].

D. Algoritmos Variacionales Cuánticos

Los algoritmos variacionales cuánticos son una clase de algoritmos utilizados en la optimización y resolución de problemas cuánticos. Estos algoritmos aprovechan la capacidad de los circuitos cuánticos para generar soluciones candidatas. Los algoritmos variacionales cuánticos son especialmente útiles en aplicaciones como la química cuántica y el aprendizaje automático cuántico[8].

E. Algoritmos Híbridos

Los algoritmos híbridos combinan técnicas de aprendizaje automático clásicas con elementos de computación cuántica para resolver problemas complejos de manera eficiente. Ver Fig 3. Estos algoritmos aprovechan la capacidad de los circuitos cuánticos para realizar cálculos en paralelo y la capacidad de las redes neuronales para aprender patrones y representaciones de los datos. Los algoritmos híbridos se utilizan en campos como el aprendizaje automático cuántico y la optimización cuántica[8].

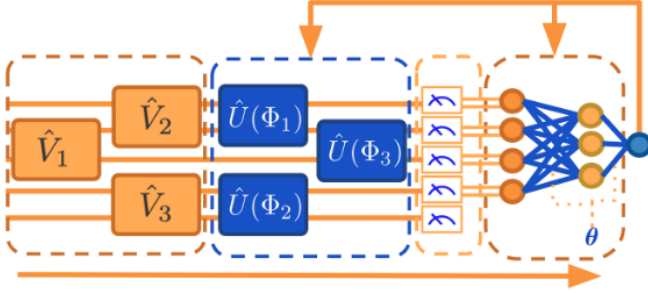


Fig. 3. Ejemplo: Circuito cuántico para generar input de una red neuronal clásica

IV. Desarrollo

La prueba de concepto se resume en 3 etapas para su desarrollo, posterior a estas etapas continuamos con la comparación de resultados de las métricas obtenidas de manera clásica y con enfoque híbrido. Para disponibilizar los modelos entrenados en la POC se desarrolla una API escrita en Python usando Fast API a nivel backend disponibilizada en un EC2 de AWS, a nivel frontend se desarrolla una SPA con ReactJS y Material UI disponibilizada en Vercel. A nivel funcional consiste en tener una UI que permita subir una imagen de rayos-X y que muestre como sería la segmentación de pulmones con enfoque híbrido y clásico.

A. Elección del modelo

Para tener una referencia de comparación, se elige un modelo clásico de redes convolucionales para la segmentación de pulmones en imágenes de rayos-X, de la plataforma Kaggle, el cual usa un dataset llamado *Chest Xray Masks and Labels* de código abierto. La arquitectura del modelo es de tipo U-Net la cual esta conformada por dos componentes principales codificador-decodificador, previo a definir el enfoque desarrollado de preprocesar de manera cuántica los datos de entrenamiento se tenía como objetivo el planteamiento de un modelo con decodificador híbrido para la arquitectura U-Net y un modelo codificador/decodificador híbrido usando algoritmos variacionales cuánticos convertidos posteriormente a una capa de cualquier tipo de arquitectura basada en redes neuronales, por la limitación actual en el hardware se optó por simplemente la implementación del enfoque de preprocesado en un simulador cuántico previo al entrenamiento, para evitar el consumo excesivo de recursos de realizar operaciones cuánticas en el propio entrenamiento.

B. Preprocesado cuántico

Usando algoritmos variacionales cuánticos podemos preprocesar las imágenes del dataset, estimando estados cuánticos

por cada 2x2 píxeles recorridos en una imagen de 256x256, usando un simulador cuántico por defecto de PennyLane 'default.qubit' configurado localmente con tan solo 4 qubits en una Macbook Pro M1 2023. Ver Fig 4.

El resultado de este preprocesamiento de datos va a generar un archivo '.npy' con la representación de los estados cuánticos por imagen.

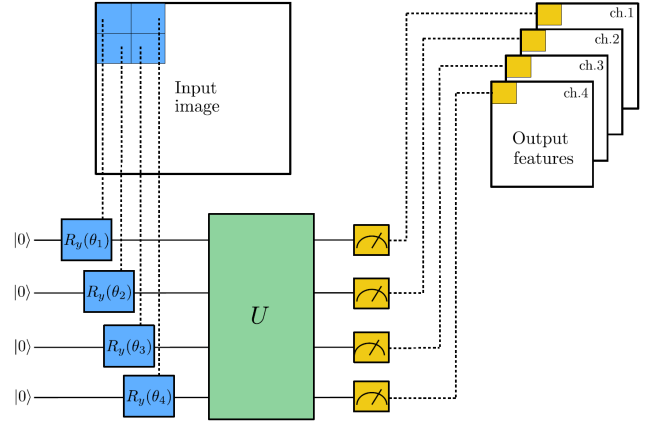


Fig. 4. Imagen mostrando el proceso de codificación de manera cuántica asignando estados cuánticos cada 2x2 píxeles con solo 4 qubits.

Con las imágenes ya preprocesadas de manera cuántica procedemos a entrenar el modelo con los mismos parámetros del entrenamiento clásico. Ver Fig 5.

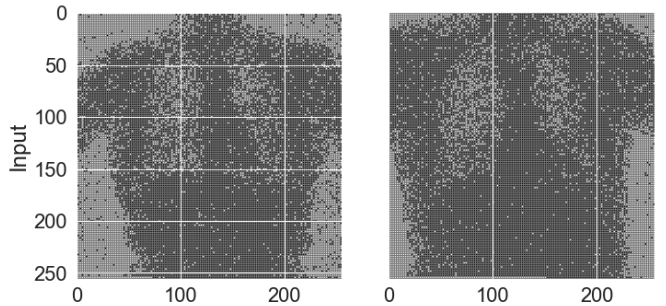


Fig. 5. Imágenes procesadas usando algoritmos cuánticos variacionales con 1 shot.

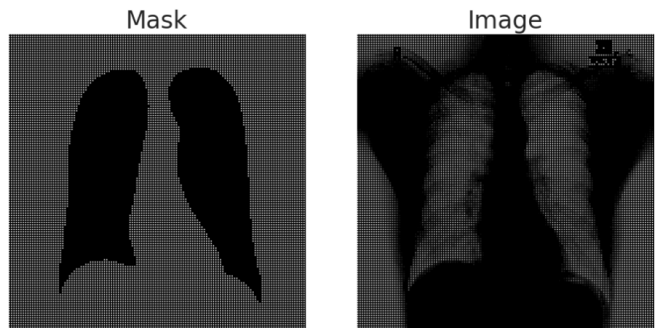


Fig. 6. Imágenes procesadas usando algoritmos cuánticos variacionales con 1024 shots.

C. Resultados

Como métricas para la comparación del rendimiento del segmentado de los pulmones se elige el DSC(Dice Similarity Coefficient). Ver Fig 7.

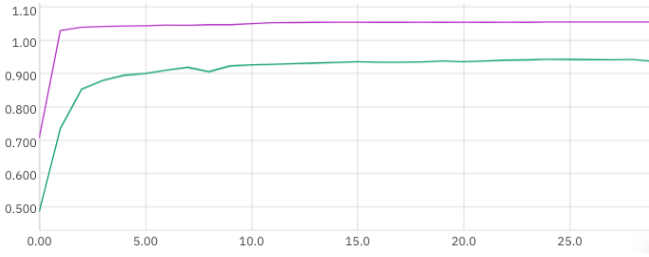


Fig. 7. Métricas de entrenamiento: epoch-dice. Verde para el modelo clásico/ violeta para los resultados obtenidos con los datos procesados de manera cuántica.

Como métricas para la evaluación en el entrenamiento se eligen: loss. Ver Fig 8.

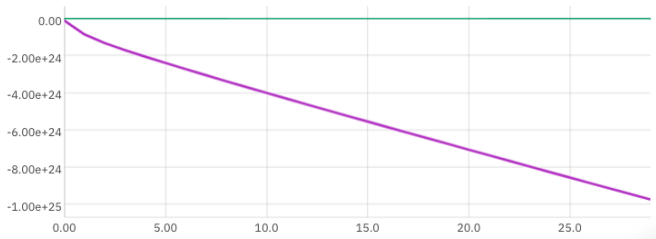


Fig. 8. Métricas de entrenamiento: epoch-loss. Verde para el modelo clásico/ violeta para los resultados obtenidos con los datos procesados de manera cuántica.

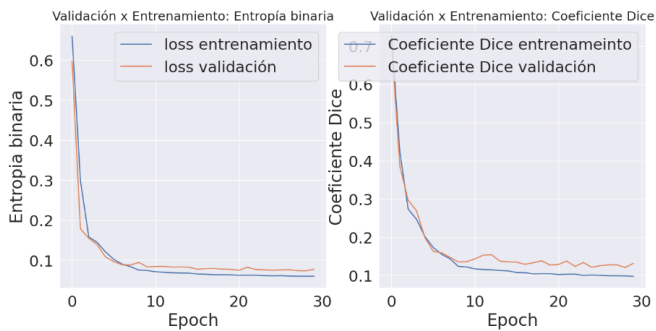


Fig. 9. Métricas de entrenamiento: para los resultados obtenidos con los datos procesados de manera cuántica con 1024 shots y agregando capaz de Dropout a la arquitectura clásica, para evitar overfitting y Loss negativos .

Resultados del proceso de segmentación de manera clásica. Ver Fig 10.

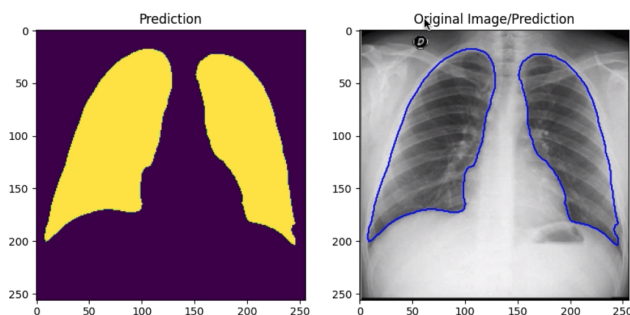


Fig. 10. Resultados segmentación con datos clásicos

Resultados del proceso de segmentación de manera cuantica usando 4 qubits con un simulador. Ver Fig 11.

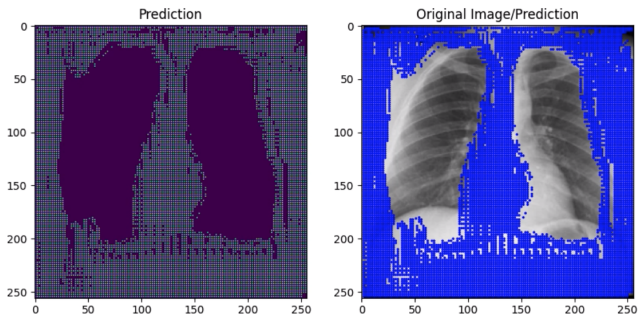


Fig. 11. Resultados segmentación con datos cuánticos en un simulador con 1 shot en la ejecución del circuito cuántico

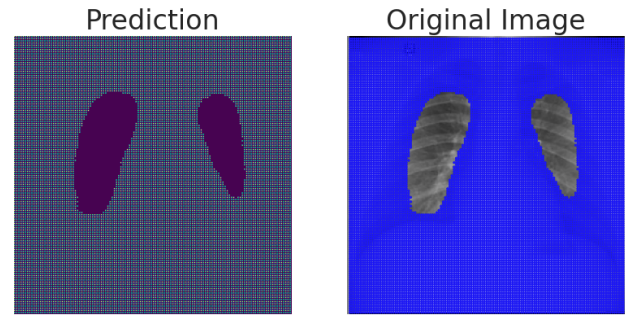


Fig. 12. Resultados segmentación con datos cuánticos en un simulador con 1024 shots en la ejecución del circuito cuántico

V. Conclusión

La computación cuántica promete ser un gran potenciador de la inteligencia artificial cuando estas dos convergen pero desafortunadamente aun no tenemos la capacidad computacional necesaria para realizar aplicaciones productivas por lo menos en sistemas críticos o de alta concurrencia debido al acceso y capacidad de estos. Con este acercamiento desarrollado podemos afirmar que a nivel de software no estamos limitados para pensar aplicaciones e incluso arquitecturas de modelos y sistemas que hagan uso de la computación cuántica y que podemos incluso potenciar procesos de desarrollo de nuevos modelos de redes neuronales con estos sofisticados enfoques. Por otro lado y a nivel de hardware se puede decir que claramente las limitantes de esta emergente tecnología están atadas a los avances en esta materia y que a su vez el reflejo de la capacidad de procesamiento altera directamente los resultados.

Puntualmente los resultado obtenidos no son significantes para una comparación adecuada que pueda llegar a superar la forma clásica elegida en esta prueba de concepto, métricas importantes para poder hacer esta comparación como la *perdida* o *loss* en inglés usando solo 4 qubits con el simulador de Penylane dan resultado negativo, para obtener mejores resultados se intento realizar el preprocesamiento con un simulador de IBM pero por cuestiones de limitación de acceso a estas herramientas de una forma concurreda y en tiempo real no fue posible aun al igual que utilizar una computadora cuántica real.

A nivel visual el resultado también se puede apreciar que comparado con lo clásico sigue siendo aun mas eficiente hacerlo clásicamente y a nivel general se puede concluir que en el diseño de sistemas con un enfoque híbrido es una gran oportunidad y se presentan un abanico gigante de oportunidades por explorar mientras en paralelo los jugadores clave de esta

industria que manufacturan hardware van avanzando.

VI. Lineas futuras de investigación

Como avance a este primer acercamiento y evolución de la investigación es necesario:

- preprocesar los datos en un ordenador cuántico real usando 4 qubits o mas para poder analizar los resultados

con una computadora cuántica real.

- Utilizar el mismo enfoque con otro tipo de hardware cuántico como: trampa de iones o rayos láser.
- Evolucionar este enfoque y conectar el resultado de este modelo de segmentación con otros modelos para la inferencia en detección de cáncer de pulmones.

Referencias

- [1] V. Bergholm, J. Izaac, M. Schuld et al., *PennyLane: Automatic differentiation of hybrid quantum-classical computations*, <https://docs.pennylane.ai>, 2022. arXiv: 1811.04968 [quant-ph].
- [2] N. P. Russell S, *Artificial Intelligence: A Modern Approach (2nd edition)*. Pearson, 2008.
- [3] C. I. Nielsen M.A, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2011.
- [4] O. Ronneberger, P. Fischer y T. Brox, “U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation,” en *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2015: 18th International Conference, Munich, Germany, October 5-9, 2015, Proceedings, Part III*, N. Navab, J. Hornegger, W. M. Wells y A. F. Frangi, eds. Cham: Springer International Publishing, 2015, págs. 234-241, ISBN: 978-3-319-24574-4. DOI: 10.1007/978-3-319-24574-4_28. dirección: https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28.
- [5] F. P. Maria Schuld Ilya Sinayskiy, *An introduction to quantum machine learning*. Contemporary Physics, 2014.
- [6] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics. 2nd Edition*. Prentice Hall, 2005.
- [7] I. Kerenidis, J. Landman y A. Prakash, *Quantum Algorithms for Deep Convolutional Neural Networks*, 2019. arXiv: 1911.01117 [quant-ph].
- [8] F. P. Maria Schuld, *Machine Learning with Quantum Computers*. Contemporary Physics, 2021.
- [9] I. Cong, S. Choi y M. D. Lukin, “Quantum convolutional neural networks,” *Nature Physics*, vol. 15, n.º 12, págs. 1273-1278, ago. de 2019. DOI: 10.1038/s41567-019-0648-8. dirección: <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0648-8>.
- [10] Qiskit contributors, *Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing*, 2023. DOI: 10.5281/zenodo.2573505.
- [11] Martín Abadi, Ashish Agarwal, Paul Barham et al., *TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems*, Software available from tensorflow.org, 2015. dirección: <https://www.tensorflow.org/>.
- [12] M. T. Leke C, *Deep Learning and Missing Data in Engineering Systems*. Springer International Publishing, 2018.



Luis Daniel Ruiz Rozo

Contacto: <https://www.linkedin.com/in/luisdanielruiz-in/>