ENG1116 - PUC-Rio, 2020.2

Trabalho 1.9: Quantum Machine Learning

September 11, 2021

Professor: Guilherme T.; Thiago G. Aluno: Rafael Vilela, Pedro Thiago, Leonardo Farina

Índice

1	Introdução					
	1.1	Tipos o	de ML			
			c Machine Learning			
	1.3	Quanti	um Machine Learning			
2	Apli					
	2.1	Exemp	olos			
		2.1.1	QML para sistemas lineares			
			QSVM			
		2.1.3	Aplicações para Física			
3	Con	clusão				

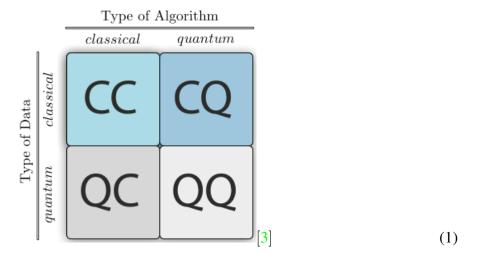
1 Introdução

Machine Learning (ou Aprendizado de Máquina), pode ser dito como a área de estudo sobre algoritmos computacionais que envolvem a melhora automática de diversas técnicas de experiência e "estudo". A partir de dados exemplificados, os algoritmos são capazes de desenvolver modelos definidos para predição, decisão ou casos de otimalidade. ML é muitas vezes associado com Inteligência Artificial por ser uma sub-área de estudo; de uma forma geral, podemos definir como sendo um sistema programado que consiste em assimilar automáticamente novos dados a partir de sua experiência (moldada pelos modelos criados com seus dados iniciais de "estudo" e "treino") para aplicar em uma ou mais tarefas específicas. Consistindo em diferentes algoritmos capazes de elucidar dados de maneira rápida e eficaz ou realizar tarefas apartir dos mesmos [2]. Cada algoritmo possui sua funcionalidade definida, tipo de dados necessárias para o "treino" e os problemas os quais podem resolver. Atualmente, tais algoritmos são utilizados de diversas maneiras para inúmeros propósitos. Empresas como Netflix, Amazon, Youtube, possuem seus próprios algoritmos que predizem as preferências do usuário a partir dos dados obtidos da comunidade.

Diante das novas teorias de computação quântica, diversas novas áreas surgiram para renovar e inovar teorias clássicas da computação como a Criptografia Quântica, Comunicação Quântica e o Aprendizado de Máquina Quântico (Quantum Machine Learning) - mesmo sendo uma sub-área de Inteligência Artificial. Devido a demanda da gama de informação provida da utilização de algoritmos clássicos, ou pela quantidade de processamento de dados obtidos de computadores Quânticos, o uso de algoritmos de Aprendizado de Máquina se tornam cada vez mais úteis e necessários para grandes empresas.[2]

Nesse documento será elucidado de forma simples o funcionamento do Quantum Machine Learning (Aprendizado de Máquinas Quântico); assim como seus 4 tipos, diferenças entre ML Clássico e Quântico, vantagens e desvantagens, além de suas diversas aplicações.

1.1 Tipos de ML



Como visto na Figura 1, existem 2 tipos de algoritmos: clássicos e quânticos. É possível utilizar processos de algoritmos clássicos para processar tarefas e desenvolver modelos com dados originados de medidas de qubits, tem sua vantagem por ser mais prático com algoritmos mais conhecidos.Da mesma forma, o desenvolvimento de algoritmos quânticos capazes de processar modelos com dados de qualquer origem tem sua vantagem pela velocidade de processamento mesmo com uma quantidade muito grande de dados.

Os algoritmos clássicos, como de machine learning, podem ser representados por um equivalente quântico [7], mas é importante notar que nem todo código pode ser traduzido diretamente para o caso quântico. Toda porta lógica quântica é reversível, enquanto nem toda porta clássica é, para isso utiliza-se uma porta de Toffoli (Toffoli Gate), que é reversível também. Essa porta é descrita como clássica, mas pode ser representada de forma quântica, sendo assim possível representar qualquer caso de porta clássica no mundo quântico, como em algoritmos de machine learning.

1.2 Classic Machine Learning

O Aprendizado de Máquina Clássico (Classic Machine Learning) é o mais comumente utilizado atualmente e envolve a criação de programas que a partir de dados conseguem "aprender" visando a execução de tarefas as quais manualmente podem ser complexas e demoradas para que um ser humano possa executar. De toda forma, é possível criar programas que executem tarefas sem necessariamente o computador "aprender" algo; porém, para isso programas mais complexos e

demorados são necessários.[2]

Cada algoritmo desenvolvido tem seu propósito o que indica sua funcionalidade, utilidade, aplicações e parâmetros. A partir desses e de dados prévios, é possível que a máquina "aprenda" e desenvolva um modelo que a permita executar tarefas futuras. De uma forma simples, existem 3 "categorias" de algoritmos: Aprendizado Supervisionado, Aprendizado Não-Supervisionado e Aprendizado Reforçado; as quais hoje já não resumem de forma completa todos os tipos de algoritmos e suas funcionalidades, utilidades e aplicações.

O modelo de aprendizado supervisionado, tem essa nomenclatura por haver a necessidade de um "supervisor" para prover dados de "estudo" e resultados esperados visando o desenvolvimento do aprendizado. Já o Aprendizado Não-Supervisionado é o oposto, sem possuir qualquer informação o computador deve aprender de forma automática e sozinho - na maioria das vezes esse é realmente o propósito, como por exemplo descobrir padrões em dados sensíveis [2]. Enquanto esse não permite input algum e sem obter qualquer tipo de feedback, o Aprendizado Reforçado viabiliza o processamento do aprendizado através de feedbacks dinâmicos - condicionando o algoritmo a sempre maximizar o aprendizado na "direção" a qual o feedback demonstre mais coerente com o objetivo programado.[2] Um exemplo poderia ser um robô com sonar programado para desacelerar e mudar de angulação toda vez que um objeto estiver próximo.

É possível ressaltar outros exemplos de abordagens de aprendizado como o Semi-Supervisionado, Aprendizado baseado em Dicionário-Escasso, Detecção de Anomalia; e modelos como Árvore de Decisões, Redes Neurais, Análise de Regressão (muito utilizada como modelo de análise para otimização e estatística) entre outros. Como será visto adiante, é possível a utilização de ML em praticamente qualquer área, viabilizando informações, agilizando processamento de dados, auxiliando análises de usuários e economizando tempo e recursos financeiros.

1.3 Quantum Machine Learning

Dentre as várias formas de se pensar Machine Learning quântico, em especial será abordado um dos algoritmos mais comuns em ML clássico, para que fiquem evidentes as diferenças básicas entre os dois processos. Além disso, se torna mais intuitiva a aplicação do ferramental quântico quando já se conhece o trabalho envolvido.

O algoritmo em questão é o PCA (Principal Component Analysis), muito usado em problemas de categorização, para modelos não supervisionados. Isso significa que inicialmente os dados de entrada não são rotulados no treinamento. O PCA é usado para reduzir a dimensionalidade do espaço trabalhado, otimizando parte do processo do modelo. Classicamente, os pontos do dataset envolvido são representados em vetores de alta dimensão, para então se estimar a correlação entre os mesmos, seguida de uma diagonalização. Por fim, a matriz correlação é analisada e com

base nas suas características são extraídos os chamados "componentes principais" que serão usados na classificação.

Em primeiro lugar, precisa-se definir uma representação dos dados em forma quântica. Uma forma prática de fazer essa equivalência é representar os pontos de um vetor clássico como amplitudes de probabilidade de um estado quântico. O processo é conhecido como "Amplitude encoding", e mostra a primeira vantagem do método quântico. Se no método clássico um vetor de entrada possui d componentes, necessitará de n bits para ser representado, em que $d=2^n$. Para o mesmo vetor existir no domínio quântico, o número de qubits requeridos é $\log_2 d$, precisando de consideravelmente menos qubits para abordagens complexas. A passagem entre notações é mostrada:

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_d \end{pmatrix} = \mathbf{V}_j \to |V_j\rangle = \sum_i V_j^i |i\rangle \tag{2}$$

A vantagem na representação está relacionada também com a eficiência dos métodos utilizados no processamento de dados em ML. Os mais comuns envolvidos são a Transformada de Fourier, o cálculo de autovetores e autovalores e inversão de matrizes. De forma simples, como disse Seth Loyd, machine learning consiste de álgebra linear em espaços vetoriais de altas dimensões. Para cada um desses casos, é mostrada a ordem de complexidade de cada operação:

	Método Clássico	Método Quântico
Transformada de Fourier	$O(d \cdot log d)$	$O((\log d)^2)$
Cálculo de autovetores/autovalores	$O(d^2), O(d^2)$ (matrizes esparsas)	$O((\log d)^2)$
Inversão de matrizes	O(d · log d)	$O((\log d)^3)$

[6]

(3)

Não só nesses aspectos o método quântico se mostra mais eficiente, mas também em casos de busca em dados não ordenados, em que se pode aplicar o algoritmo de Grover. Isso poderia ser empregado para se fazer "data clustering", utilizado por exemplo em treinamentos não

supervisionados de modelos. Nesse processo são "agrupados" pontos de dados semelhantes, o que será útil para a eventual classificação. Em relação ao análogo clássico para buscas, o algoritmo de Grover proporciona um aumento quadrático de velocidade.[5]

Com o que foi brevemente apresentado, pode-se introduzir o qPCA, análogo quântico do PCA. Sabe-se que as duas áreas possuem as respectivas definições para as operações necessárias. No qPCA, parte-se da representação de data em estados quânticos, e a correlação é dada pela matriz de densidade dos estados envolvidos, sendo m a quantidade de dados por estrutura.

$$|V_j\rangle, \rho = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{j} |V_j\rangle \langle V_j|$$
 (4)

etapa seguinte, que envolve o cálculo de autovetores e autovalores, faz uso de um processo denominado "Quantum Phase Algorithm", que assume que se é possível fazer a operação $e^{-iAt} |\psi\rangle$ os seguintes resultados podem ser obtidos, sendo A uma matriz:

$$|\psi\rangle\,|0\rangle = \sum_{k} \psi_{k}\,|k\rangle\,\langle a_{k}|\tag{5}$$

E k são os autovetores e a_k são os autovalores de A. Essa etapa admite o uso de uma "Memória RAM quântica", que será comentada mais adiante. A ideia por trás desse último método existe desde 1930, mas sua implementeção ainda está sendo trabalhada.

Vale lembrar que, na teoria, por mais que o QML seja mais eficiente em certos aspectos do que o ML clássico, a implementação prática propõe imensa dificuldade. Apenas a representação em estados quânticos por si só demanda extrema precisão. Além disso, formas mais eficientes para manter os estados dos qubits são essenciais. O desenvolvimento também é válido para a teoria, que por ser recente não foi completamente testada e deixa pontos em aberto.

2 Aplicações

Como, em suma, o Machine Learning clássico otimiza uma função com várias variáveis, várias áreas podem usufruir dessa técnica. Dentre as 3 possíveis formas de QML (supervisado, sem supervisão e de aprendizado por reforço), a mais utilizada é o QSVM (ou SVM), que é uma forma de Machine Learning supervisado, tratada adiante.

2.1 Exemplos

2.1.1 QML para sistemas lineares

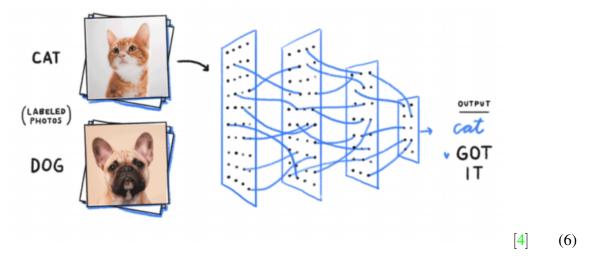
O algoritmo HHL [1], criado em 2009 por Aram Harrow, Avinatan Hassidim e Seth Lloyd, resolve sistemas lineares. Ele prediz o vetor solução b de um sistema Ax=b, sendo A uma matriz quadrada hermitiana esparsa, com grande quantidade de 0. O resultado, vetor solução do escalonamento, é um vetor $|x\rangle$.

Em teoria esse algoritmo necessita de uma memória RAM quântica, que pode criar um estado de superposição $|b\rangle$, a partir das entradas do vetor b, sem usar usar processamento em paralelo para cada elemento na entrada. Essas são condições fundamentais para o algoritmo HHL ter uma complexidade menor que os algoritmos clássicos.

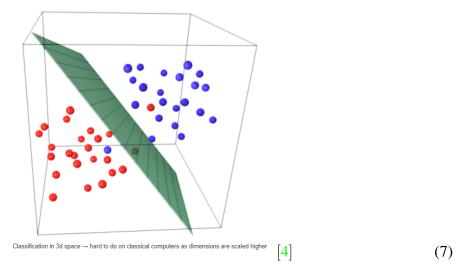
Apesar de ser eficiente por ser resolver em tempo logarítmico, esse algoritmo é feito para ser usado em subrotinas de outros algoritmos de resolução de sistemas lineares[1]. Uma aplicação física real é o cálculo de dispersão de ondas eletromagnéticas de seções transversais de um elemento qualquer.

2.1.2 QSVM

QSVM, Quantum Support Vector Machine, é utilizado principalmente para classificação de dados, identificando, agrupando e estudando os mesmos. Dentre aplicações possíveis: análise de exames médicos, descoberta de medicamentos, reconhecimento de escrita - com vários exemplos usando python e Qiskit [8] - e reconhecimento facial. Essa técnica desenha um hiperplano entre as categorias analisadas, dado um conjunto de dados, sendo necessário dados tabelados para usar como comparação, diferente das técnicas sem supervisão. Pode ter reaprendizado por esforço também, dependendo de como é aplicado.



Para avaliação de uma imagem, para determinar se é um cachorro ou um gato por exemplo, essa técnica utiliza várias camadas (layers) para identificar o que é a imagem na entrada. Para dimensões n muito maiores que 3 o Machine Learning clássico acaba sendo muito custoso em tempo e memória, sendo preferencial o SVM utilizando as propriedades da mecânica quântica, o QSVM.



Essa figura acima pode representar também uma separação entre células benignas e cancerígenas, depois do processo de passar pelas camadas, considerando características baseadas em um dado

anteriormente inserido no algoritmo, como por exemplo a cor da imagem.

2.1.3 Aplicações para Física

Algumas técnicas [1]de Machine Learning já foram usadas com sucesso para processamento de informação quântica, como para problemas de metrologia, processamento de sinais e de controle (ambos quânticos). Para identificação de fases e ordens de parâmetros de problemas na área da física de matéria condensada, ou magnetização, o Machine Learning sem supervisão - sem dados rotulados fornecidos previamente - pode ser utilizado, assim como para o problema de configuração de modelos de Ising.

3 Conclusão

Em suma, o uso de ML hoje se torna indispensável para processar com velocidade e efetividade a gama de dados demandados; e com a chegada da Computação Quântica - como uma nova área de estudo e desenvolvimento - uma nova demanda de processamento e análise também. Para isso, são criadas novas maneiras de utilizar algoritmos clássicos em Computadores Quânticos visando a quantidade de dados processados simultaneamente e a velocidade a qual os resultados são emitidos. Ademais, a criação de algoritmos quânticos capazes de realizar tarefas complexas da análise de qubits se tornam cada vez mais importantes.

Indubitável é a necessidade de uso de ML atualmente. É possível concluir a legitimidade de utilização em grandes empresas para atenderem melhor seus clientes, otimizarem processos, pedidos e demandas; assim como para processos quânticos a verificação de medidas de qubits para futuros modelos torna-se dia após dia cada vez mais importante. Contudo, deve ser ressaltada a complexidade computacional de estabelecer algoritmos e de utilizá-los em um computador quântico, de mesma maneira, o nível de especialidade esperada de um profissional que irá executar tais programas - tanto no momento de desenvolvimento inicial, quanto em utilizações para criações de modelos.

References

[1] Quantum Machine Learning. https://www.researchgate.net/publication/335836247_Quantum_Machine_Learning_A_Review_and_Current_Status. [Online; último acesso em 11/12/2020].

- [2] Wikipedia Machine Learning. https://en.wikipedia.org/wiki/Machine_learning#Types_of_learning_algorithms. [Online; último acesso em 12/12/2020].
- [3] Wikipedia Quantum Machine Learning. https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_machine_learning. [Online; último acesso em 11/12/2020].
- [4] Tanisha Bassan. Utilizing Support Vector Machine algorithms on quantum computers for advantageous classification of data and solving complex problems. https://hackernoon.com/quantum-machine-learning-d0037f59f31as. [Online; último acesso em 11/12/2020].
- [5] IBM. Grover's Algorithm. https://qiskit.org/textbook/ch-algorithms/grover.html. [Online; último acesso em 11/12/2020].
- [6] Seth Loyd. Quantum Machine Learning. https://www.youtube.com/watch?v=Lbndu5EIWvI. [Online; último acesso em 11/12/2020].
- [7] M.A. Nielsen and I.L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.
- [8] Mahan Shafiq. Quantum Machine Learning: Hybrid quantum-classical Machine Learning with PyTorch and Qiskit. https://blog.usejournal.com/quantum-machine-learning-hybrid-quantum-classical-machine-learning-with-[Online; último acesso em 14/12/2020].