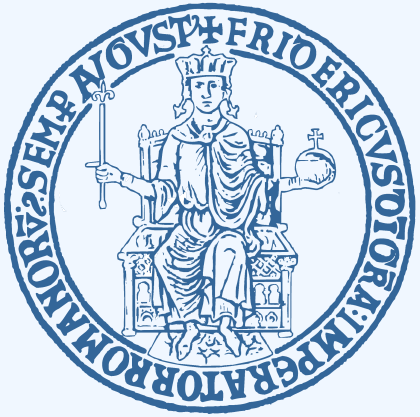
Implementazione di un algoritmo KNN multiclasse su hardware quantistico

Tesi di laurea sperimentale in fisica

Mariano Mollo N85000880
Relatori:
Giovanni Acampora
Autilia Vitiello

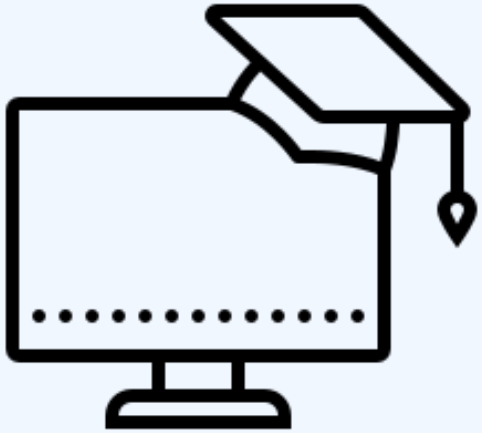
Università degli Studi di Napoli Federico II
Scuola Politecnica e delle Scienze di Base



ottobre 2019

Introduzione

Machine learning



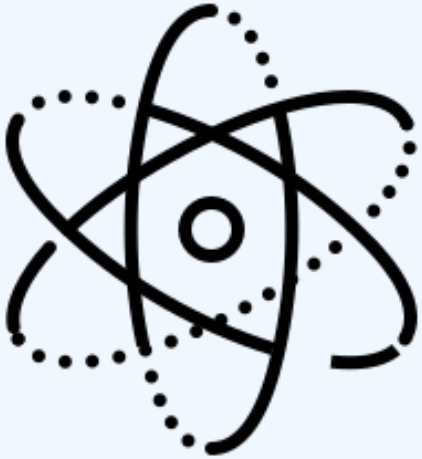
Il machine learning permette ai computer di imparare dai dati

Gli algoritmi di ML prevedono spesso di

- risolvere grandi sistemi di equazioni lineari
- invertire grandi matrici
- calcolare distanze

Effettuare questi calcoli su insiemi dati grandi e complessi diventa difficile

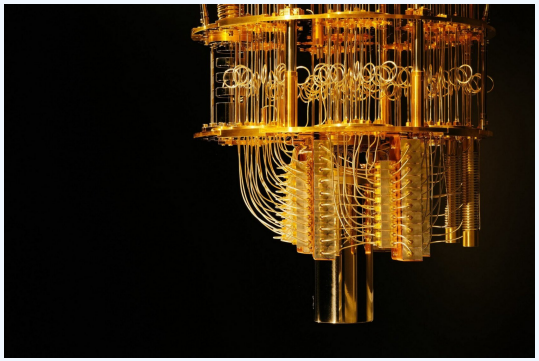
Quantum computing



Il quantum computing studia la costruzione e l'uso di hardware di elaborazione basato sulla meccanica quantistica

- Il quantum computing lavora con vettori in spazi di Hilbert complessi
- I computer quantistici eseguono operazioni lineari sui qubit
- Sistemi a molti qubit sono descritti da grandi vettori che possono essere manipolati in parallelo
- Il machine learning prevede la manipolazione di grandi vettori e matrici

Quantum machine learning



L’uso dei computer quantistici per risolvere problemi classici difficili o classi di problemi completamente nuove è chiamato machine learning quantistico, ovvero permettere ai computer quantistici di imparare dai dati più velocemente dei computer classici

Domanda di ricerca

È possibile implementare su un computer quantistico un algoritmo k-nearest neighbours multiclasse, in modo da migliorare le prestazioni ed il numero di problemi risolvibili?

Obiettivi

- Riprodurre l'algoritmo di classificazione binaria KNN quantistico proposto da Schuld et al.
- Implementarne una versione multiclasse
- Analizzare le capacità dell'algoritmo usando l'hardware quantistico attualmente disponibile
- Analizzare esperimenti più complessi tramite simulazione

Machine learning

Machine learning

Il machine learning è un ramo dell'intelligenza artificiale che permette ai computer di apprendere dai dati. L'apprendimento può formalizzarsi attraverso la definizione di modelli matematici, usati per

- effettuare previsioni (apprendimento supervisionato)
- trovare regolarità in processi complessi (apprendimento non supervisionato)
- effettuare scelte per ottenere un risultato ottimale (apprendimento per rinforzo)

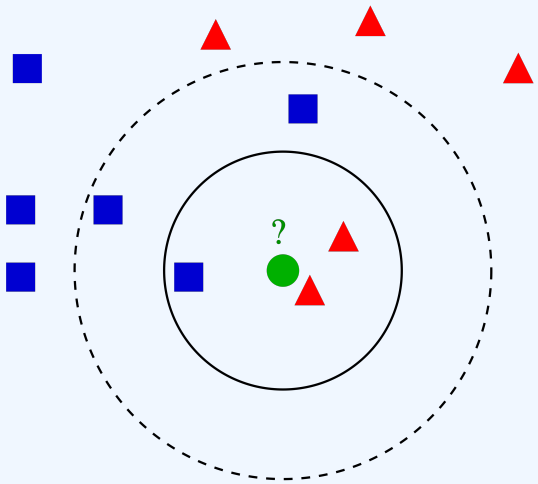
Definizione del problema

Dato un insieme dati in input con i corrispondenti output, predire l'output di un nuovo input ignoto.

Input	Output
facce	emozioni
battito cardiaco	stato di salute
meteo dell'anno scorso	meteo di domani
messaggio di un utente	intenzione del messaggio
cronologia di ricerca	probabilità di cliccare su un annuncio

K-NEAREST NEIGHBOURS CLASSICO

L'algoritmo KNN è uno tra i più semplici del ML ed è un lazy learner



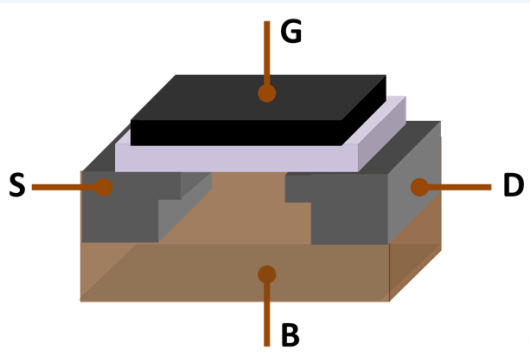
k è un numero naturale
Dato un insieme di apprendimento
$D = v_0, \ldots, v_{M-1}, v_i \in \{\text{classe}_0, \text{classe}_1\}$
Dato un nuovo vettore x:

- considera i k elementi più vicini ad x
- classifica x con un voto a maggioranza

Si assegnano pesi dipendenti da $\frac{1}{\text{distanza}}$ per aumentare l'influenza dei vettori più vicini

Quantum computing

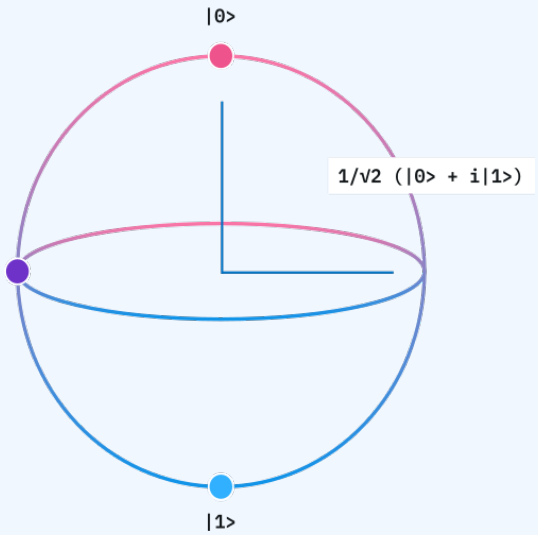
Bit



- Solitamente implementati attraverso MOSFET[a]
- 2 stati definiti (0, 1)
- Può trovarsi in uno tra gli stati 0 o 1

[a]MOSFET: Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor

Qubit



- Può essere $|0\rangle$ o $|1\rangle$
- Può anche essere $|0\rangle$ e $|1\rangle$ contemporaneamente (sovrapposizione quantistica)

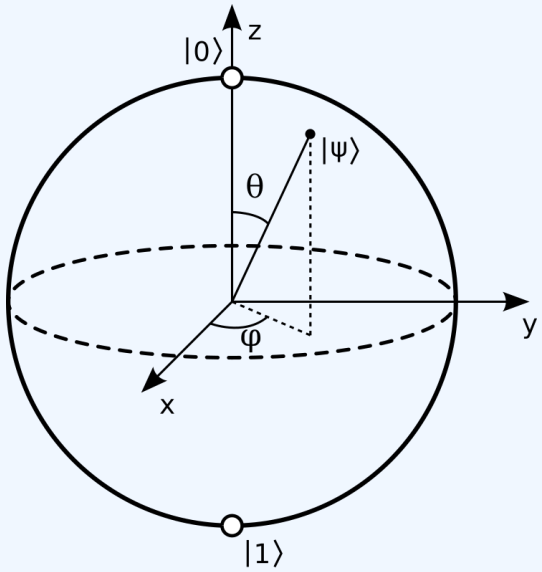
Qubit

Matematicamente, la sovrapposizione di un qubit è espressa come

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle = \begin{matrix}0\\1\end{matrix}\begin{pmatrix}\alpha\\\beta\end{pmatrix}, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C},$$

dove α e β sono chimate ampiezze di probabilità.
L'ultima espressione è chiamata vettore di probabilità.

Sfera di Bloch



Un qubit si può visualizzare su una 2-sfera parametrizzando α e β in coordinate polari

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\,,$$

dove $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi < 2\pi$

Registro di 2 qubit

Un computer quantistico con n qubit ha 2^n ampiezze di probabilità.
Lo stato di un registro a più qubit è rappresentato dal prodotto tensore dello stato dei singoli qubit.

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$$

$$|\psi\rangle = c_0 |00\rangle + c_1 |01\rangle + c_2 |10\rangle + c_3 |11\rangle = \begin{matrix} 00 \\ 01 \\ 10 \\ 11 \end{matrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

Registro di n qubit

Un computer quantistico con n qubit ha 2^n ampiezze di probabilità.
Lo stato di un registro a più qubit è rappresentato dal prodotto tensore dello stato dei singoli qubit.

$$|00\ldots00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \ldots \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle$$

$$|\psi\rangle = c_0 |00\ldots00\rangle + c_1 |00\ldots01\rangle + \ldots + c_{n-2} |11\ldots10\rangle +$$

$$+ c_{n-1} |11\ldots11\rangle = \begin{matrix} 00\ldots00 \\ 00\ldots01 \\ \vdots \\ 11\ldots10 \\ 11\ldots11 \end{matrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-2} \\ c_{n-1} \end{pmatrix}$$

Porte logiche quantistiche

Per manipolare n qubit esistono apposite porte logiche quantistiche, che sono operatori rappresentabili come matrici $2^n \times 2^n$.

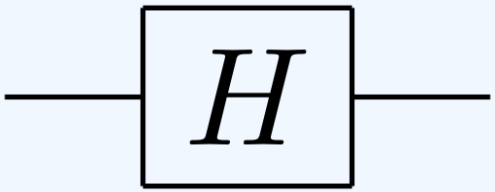


Figure: Hadamard

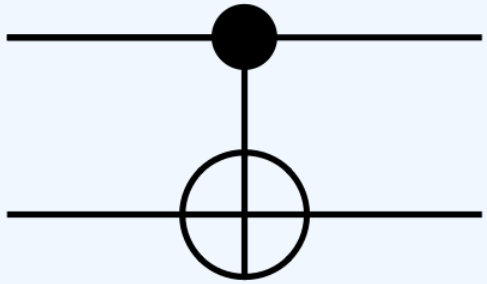


Figure: CNOT

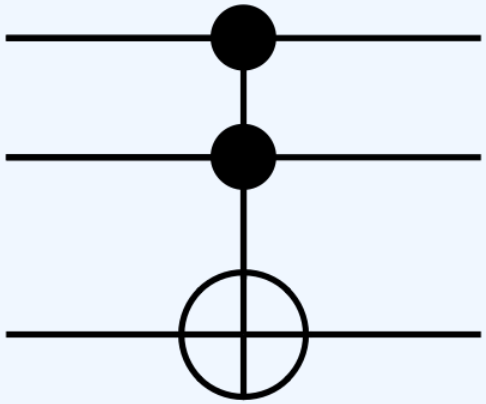


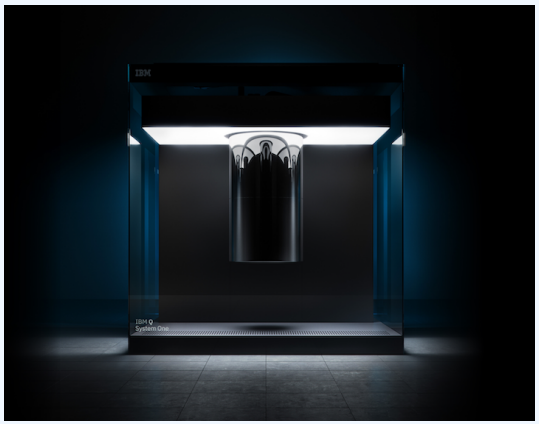
Figure: Toffoli

Punti di forza dei quantum computer

# di qubit	RAM classica richiesta
5	256 byte
25	2 gigabyte
50	8000 terabyte
275	numero di atomi nell'universo osservabile

Le n ampiezze di probabilità possono essere usate per memorizzare quantità enormi di informazioni. Possiamo inoltre creare e lavorare su più copie in parallelo degli stessi dati.

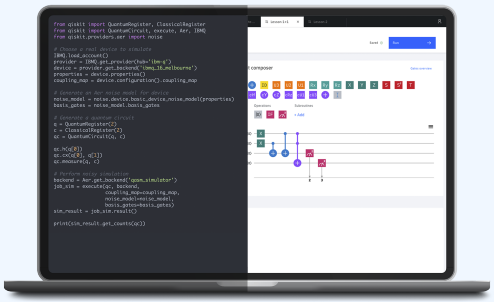
Stato dell'arte



L'IBM Q System One è il primo computer quantistico a circuiti commerciale al mondo, introdotto dall'IBM nel gennaio 2019. L'IBM Q System One possiede 20 qubit.

Metodi

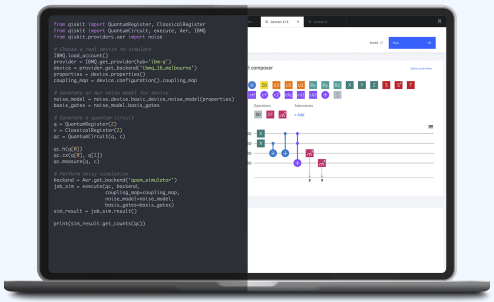
IBM Q Experience



L'IBM Q Experience è un'interfaccia per interagire con le risorse di quantum computing dell'IBM

- accessibile al pubblico
- permette simulazioni con e senza rumore
- fino a 14 qubit superconduttivi
- fino a 32 qubit simulati

Qiskit

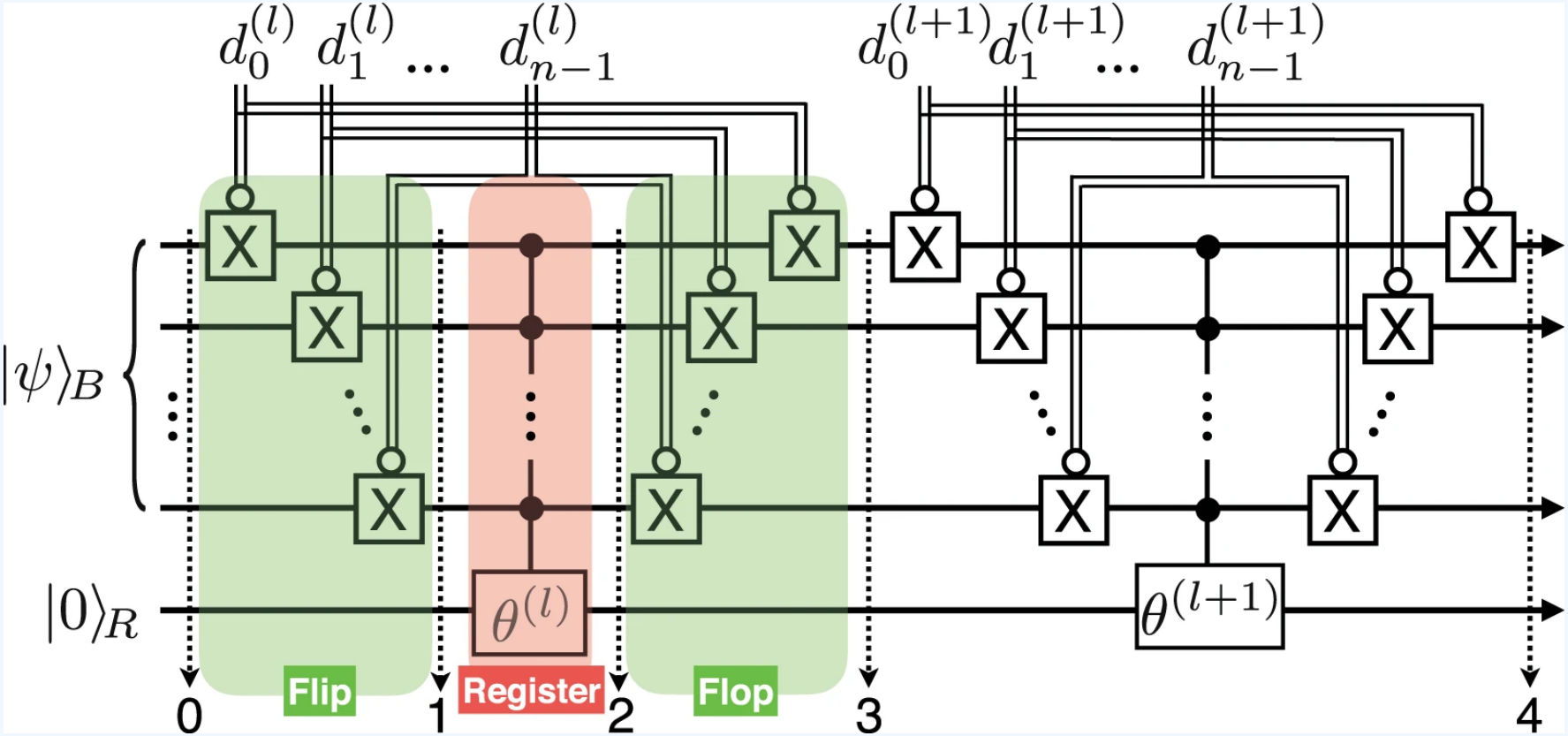


Struttura open source di sviluppo software per quantum computing, permette di

- progettare circuiti quantistici
- simularli sul proprio computer personale
- inviare ordini di esecuzione su harware quantistico reale
- visualizzare i risultati

Quantum machine learning

Codificare dati classici nelle ampiezze



Per codificare dati classici nelle ampiezze di probabilità è stata usata la tecnica di costruzione di stati flip-flop QRAM, come proposto da Petruccione et al.

FF-QRAM

La FF-QRAM è usata per memorizzare un QDB inizializzato in maniera arbitraria.
L'operazione QRAM sui qubit sovrappone un insieme di dati classici $D = \left\{ \left(\vec{d}^{(l)}, b_l \right) \middle| 0 \leq l < M \right\}$ come

$$\text{QRAM}(D) \sum_j \psi_j \left| j \right\rangle_B \left| 0 \right\rangle_R \equiv \sum_l \psi_l \left| \vec{d}^{(l)} \right\rangle_B \left| b_l \right\rangle_R ,$$

dove $\vec{d}^{(l)}$ rappresenta un indirizzo di memoria con n bit di informazione e b_l è l'attributo ad esso associato.

Algoritmo KNN quantistico

Stato quantistico iniziale

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2M}} \sum_{m=1}^{M} (|0\rangle |\psi_x\rangle + |1\rangle |\psi_{t^m}\rangle) |c^m\rangle |m\rangle$$

Calcolo della distanza con interferenza quantistica

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{M}} \sum_{m=1}^{M} \Big(|0\rangle (|\psi_x\rangle + |\psi_{t^m}\rangle) + |1\rangle (|\psi_x\rangle - |\psi_{t^m}\rangle) \Big) |c^m\rangle |m\rangle$$

Misura condizionale

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2\sqrt{M}} \sum_{m=1}^{M} \sum_{i=1}^{N} (x_i + t_i^m) |0\rangle |i\rangle |c^m\rangle |m\rangle$$

Algoritmo KNN quantistico

Probabilità di misurare una data classe

$$P(|c^m\rangle = |s\rangle) = \sum_{m|c^m=s} 1 - \frac{1}{4M}|x - t^m|^2$$

Classificazione

$$c = \begin{cases} 0 & \text{se } P(|c^0\rangle) \text{ maggiore} \\ 1 & \text{se } P(|c^1\rangle) \text{ maggiore} \\ \text{etc}\ldots \end{cases}$$

Implementazione

Preparazione dei dati

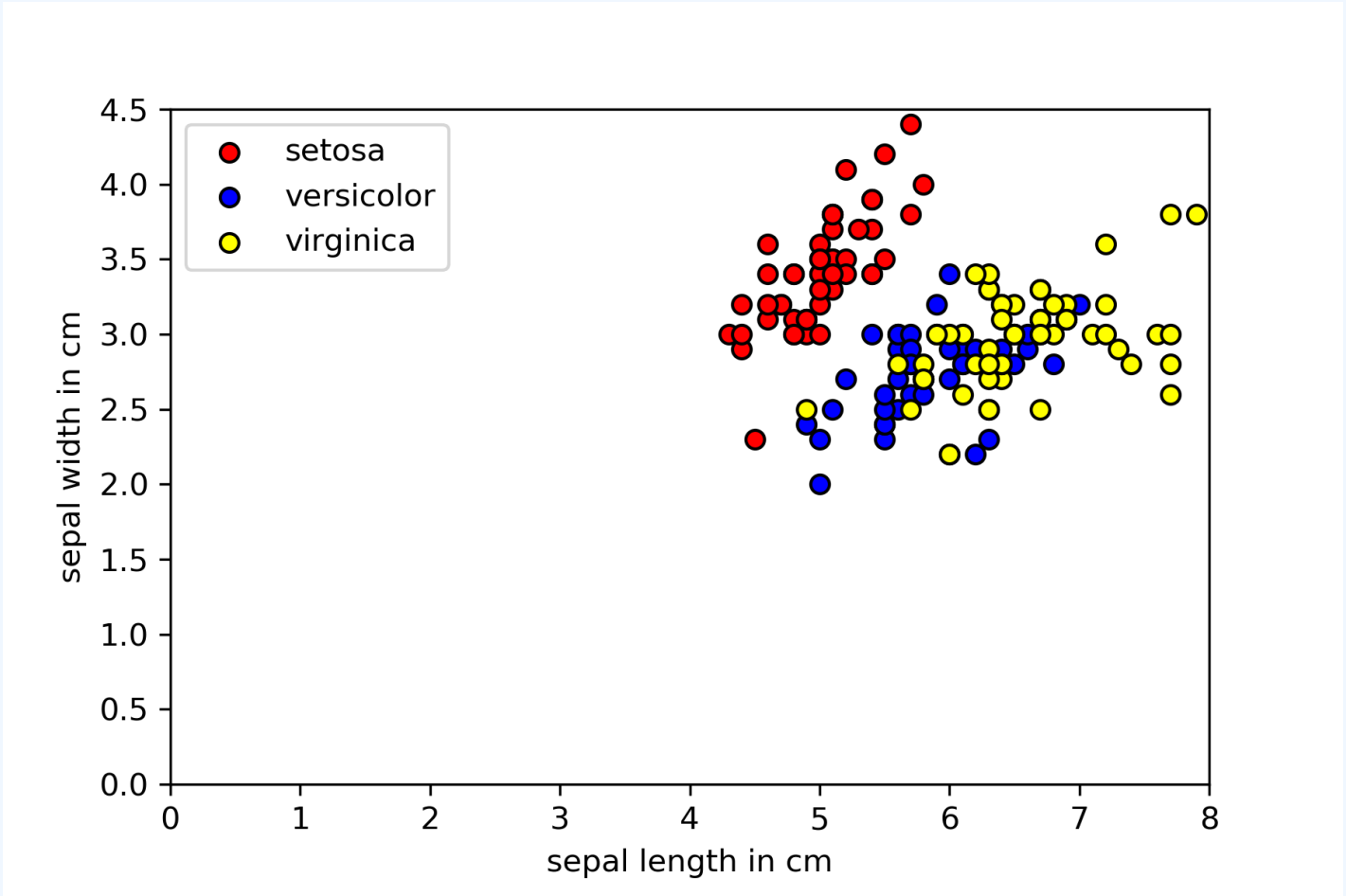


Figure: Data set Iris

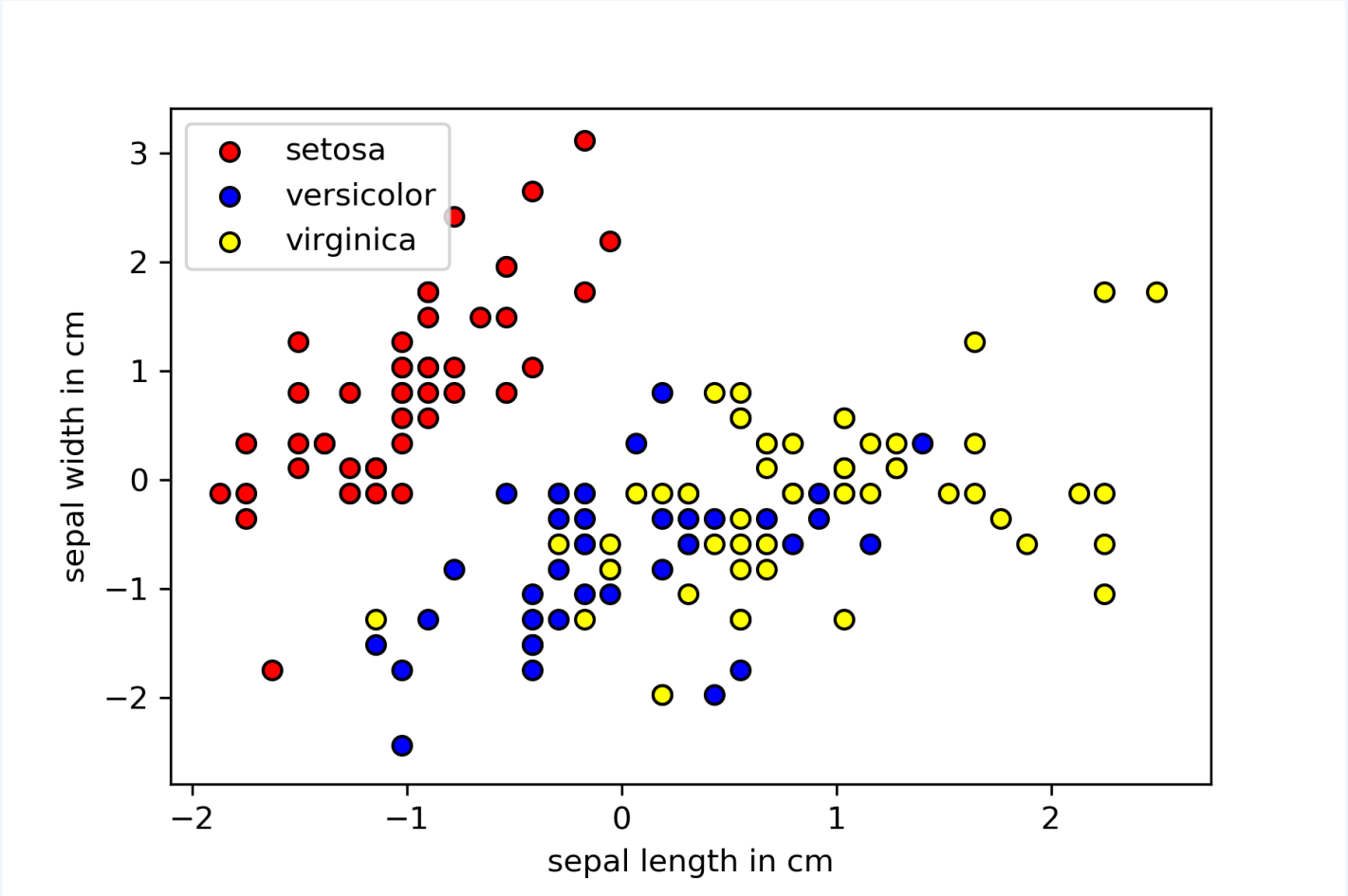


Figure: Data set Iris standardizzato

Preparazione dei dati

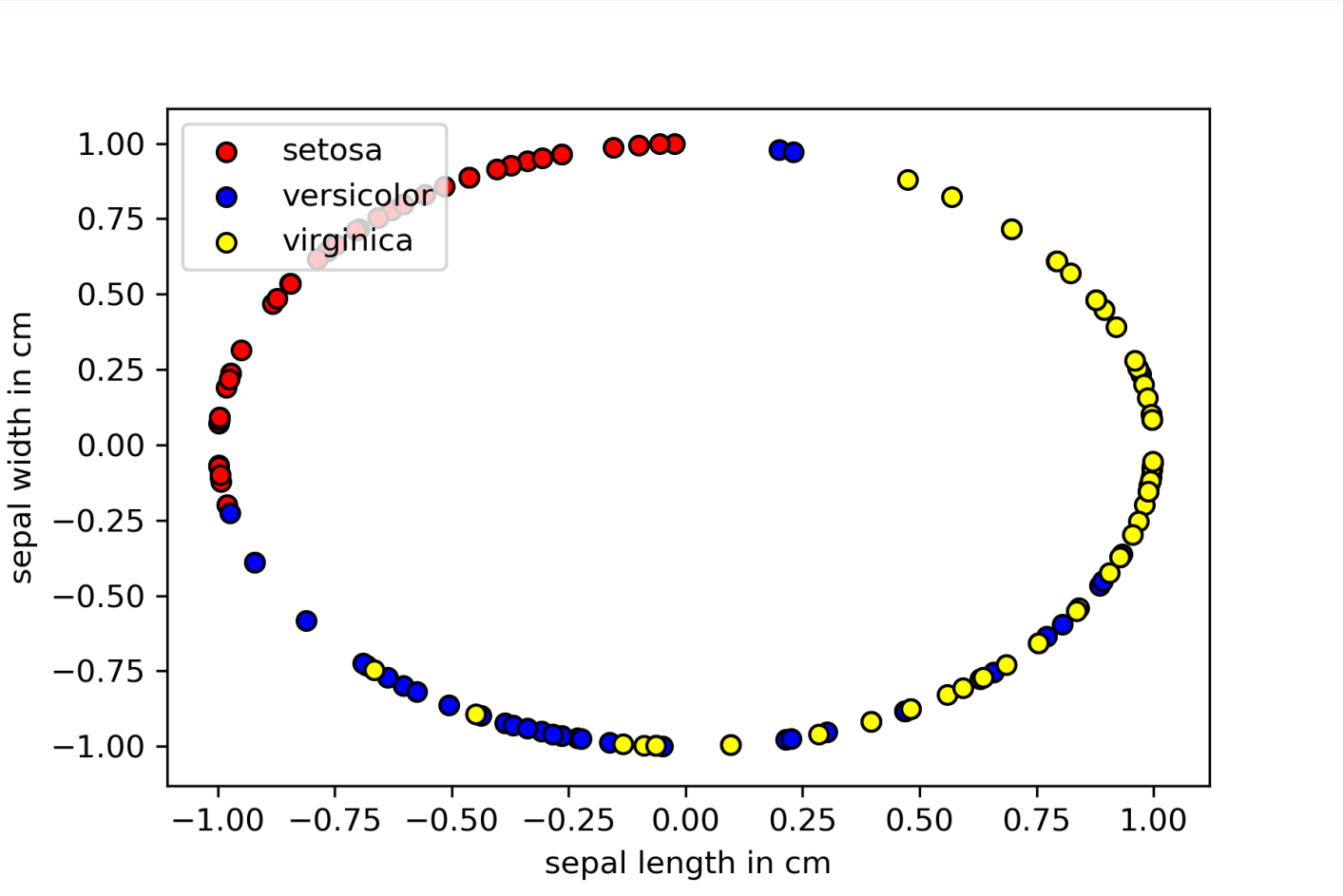


Figure: Data set Iris normalizzato (2 caratteristiche)

Preparazione dei dati

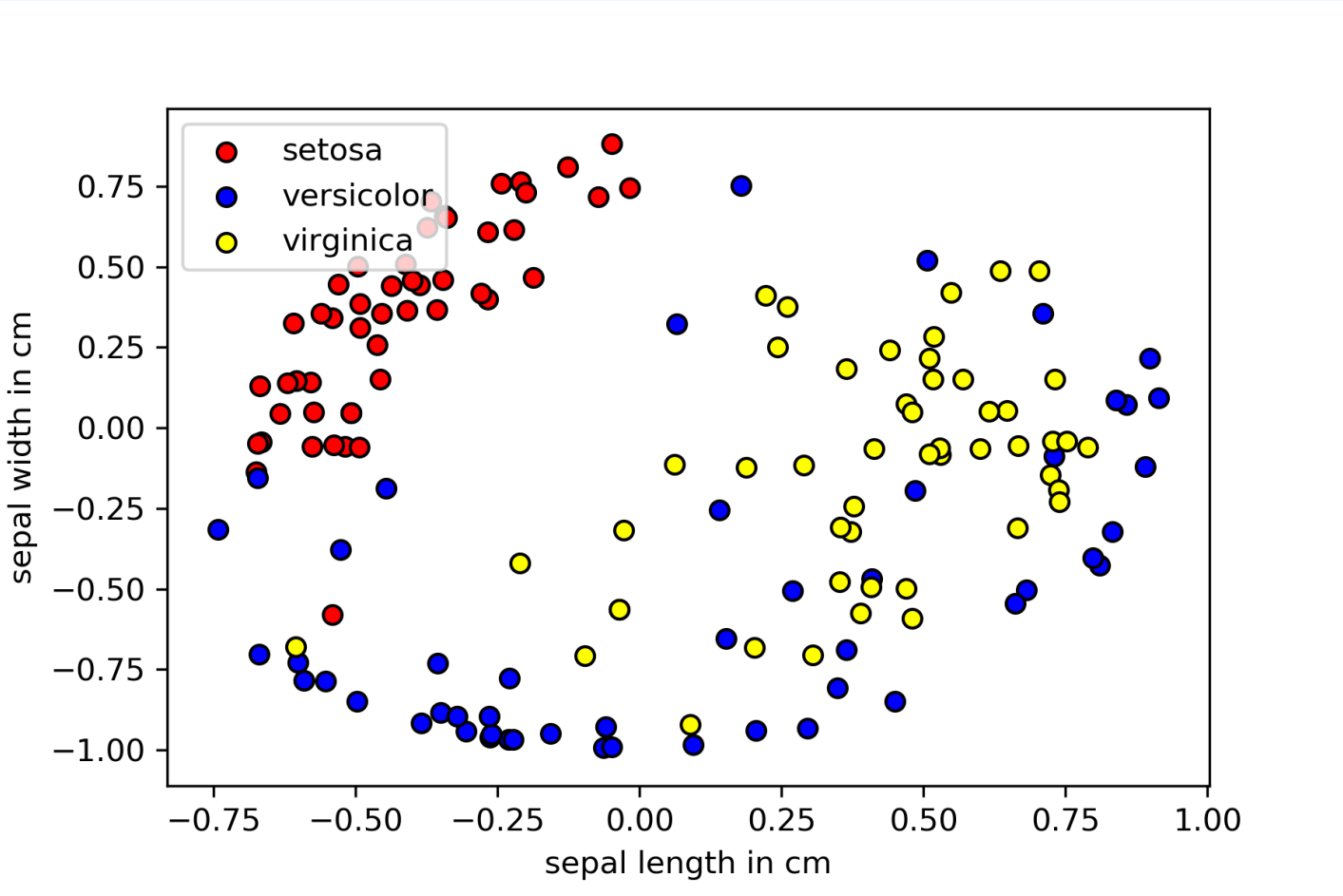
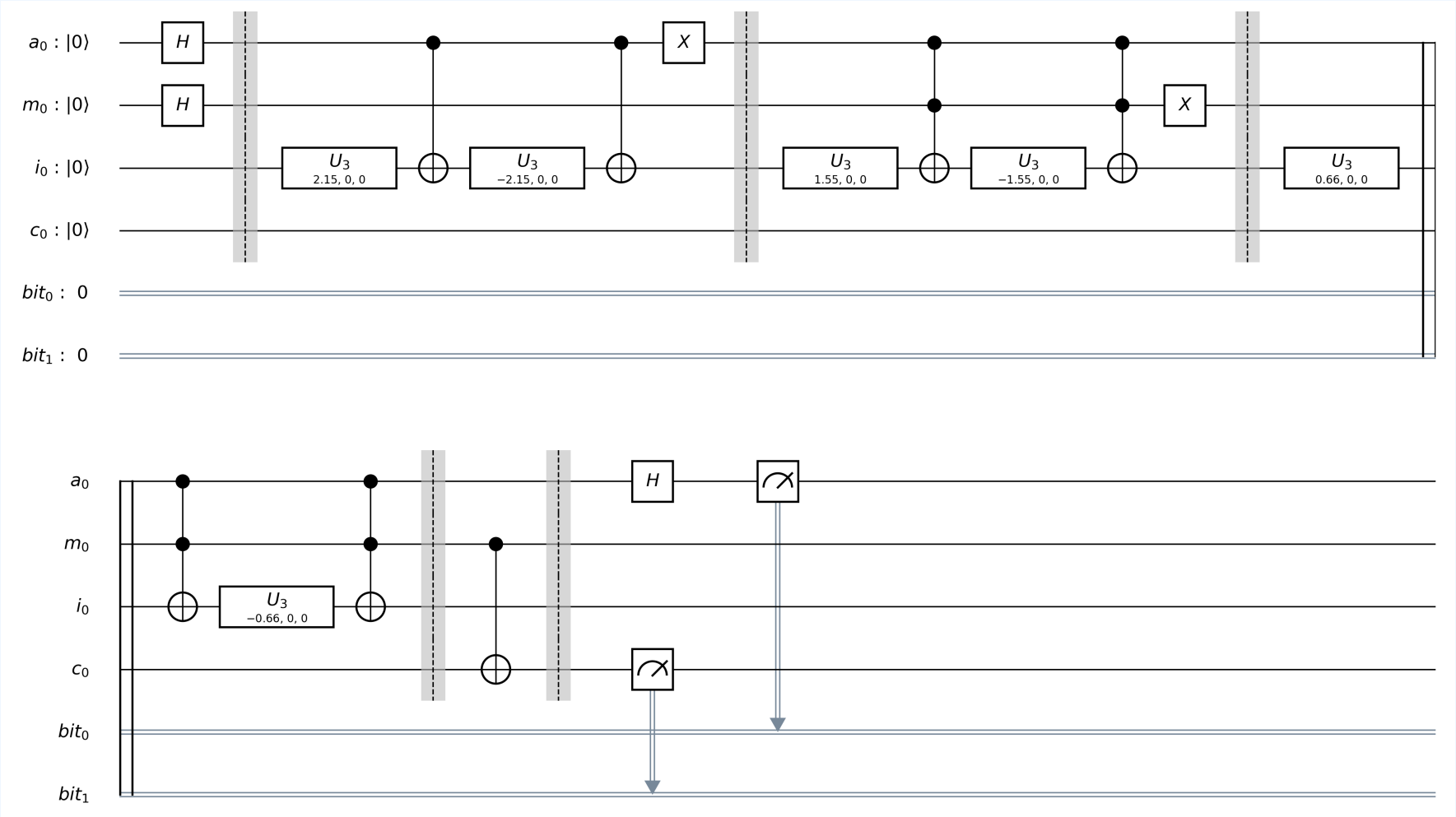


Figure: Data set Iris normalizzato (4 caratteristiche)

Il circuito quantistico

Il circuito quantistico per un classificatore binario è il seguente



Per il classificatore multiclasse il disegno è più complicato.

Risultati

Classificazione setosa vs. versicolor dal data set Iris

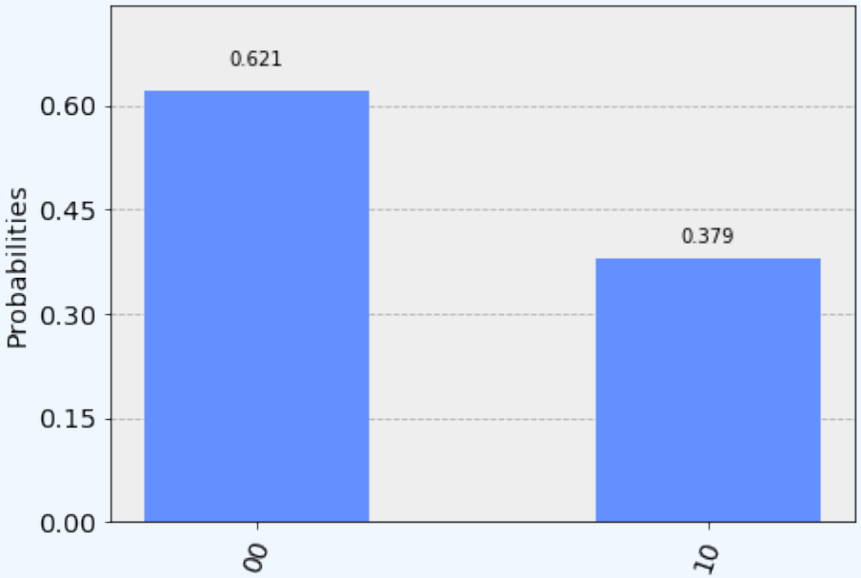


Figure: Simulazione su setosa

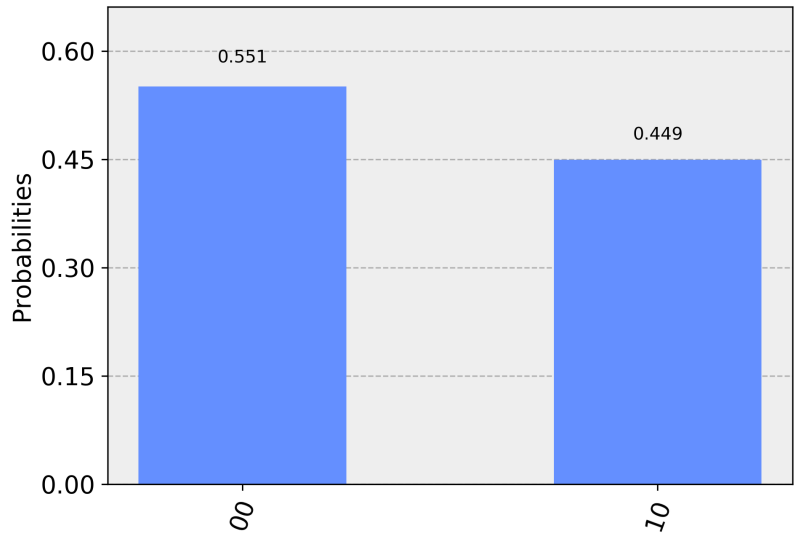


Figure: Esecuzione reale su setosa

Classificazione setosa vs. versicolor vs. virginica dal data set Iris

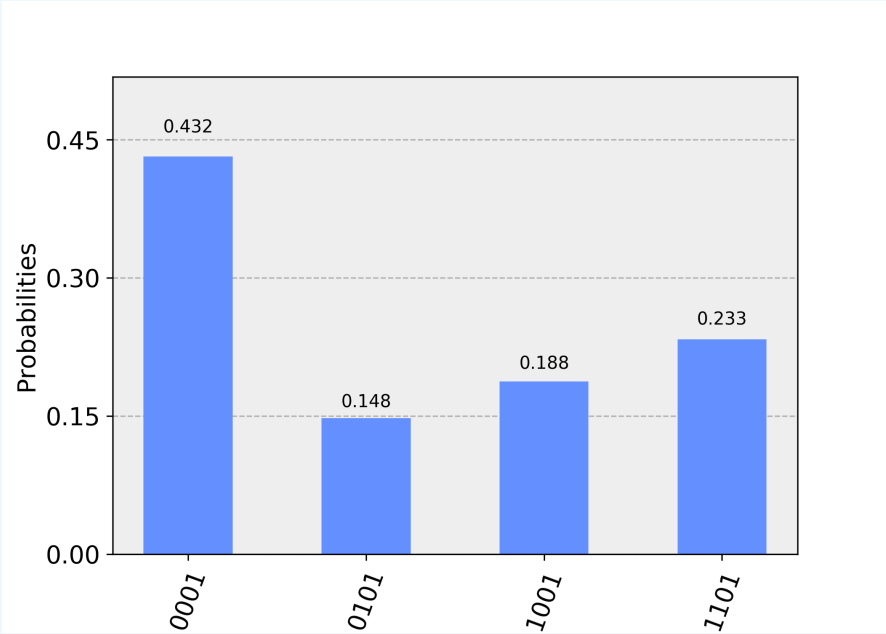


Figure: Simulazione su setosa

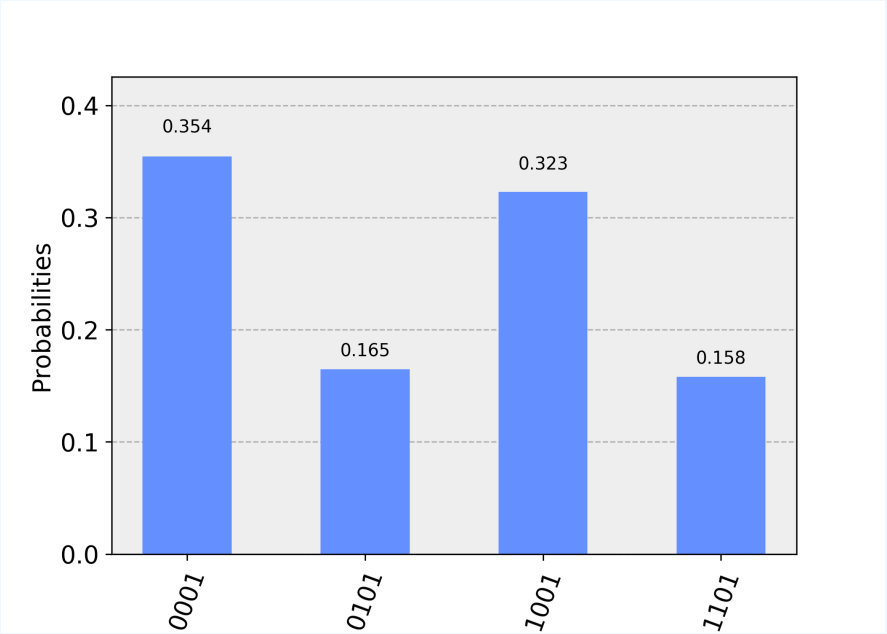


Figure: Esecuzione reale su setosa

Conclusione

Riassunto

- L'elaborazione quantistica è nella frontiera dei supercomputer e ha il potenziale di accelerare gli algoritmi di machine learning classico
- È stata riprodotta un'implementazione di algoritmo KNN quantistico di classificazione binaria su hardware di piccola scala
- Se ne è esteso il funzionamento in modo da renderlo multiclasse
- Si sono effettuati test su hardware quantistico di media scala

Prospettive

- Far girare gli algoritmi su computer con maggiori risorse, sia in termini di numero di qubit che di tempi di decoerenza
- A tal proposito, sarebbe interessante l'esecuzione sul computer a 20 qubit annunciato quest'anno
- Si attende lo sviluppo di corrispettivi quantistici per algoritmi di IA più complessi

Domande?

Algoritmo per classificatore binario

Inizializzazione dei registri quantistici

```
a = QuantumRegister(1, 'a')
m = QuantumRegister(1, 'm')
i = QuantumRegister(1, 'i')
c = QuantumRegister(1, 'c')
b = ClassicalRegister(2, 'bit')
circuit = QuantumCircuit(a, m, i, c, b)
```

Sovrapposizione degli stati

```
circuit.h(a)
circuit.h(m)
```

Codifica del vettore d'input

```
circuit.cry(x0, a[0], i[0])
circuit.x(a) # entanglement dell'ancilla con 0
```

Algoritmo per classificatore binario

Codifica dei vettori di training

```
circuit.mcry(to, a[:] + m[:], i[o], None)
circuit.x(m) # entanglement di m con o
circuit.mcry(t1, a[:] + m[:], i[o], None)
circuit.cx(m, c) # entanglement della classe 1 con m 1
```

Interferenza degli stati

```
circuit.h(a)
```

Operazione di misura

```
circuit.measure(a, b[o])
circuit.measure(c, b[1])
```

```
# circuit.draw(output='mpl')
```

Algoritmo per classificatore multiclasse

Inizializzazione dei registri quantistici

```
a = QuantumRegister(1, 'a') # knn ancilla
m = QuantumRegister(2, 'm') # training vector index
i = QuantumRegister(2, 'i') # feature index
r = QuantumRegister(1, 'r') # rotation qubit
q = QuantumRegister(5, 'q') # qram ancilla
c = QuantumRegister(2, 'c') # class
b = ClassicalRegister(4, 'bit')
circuit = QuantumCircuit(a, m, i, r, q, c, b)
```

Sovrapposizione degli stati

```
circuit.h(a)
circuit.h(m)
circuit.h(i)
circuit.h(c)
```

Algoritmo per classificatore multiclasse

Codifica dei vettori

```
# circuit.cry(theta, control, target)
# circuit.mcry(theta, controls, target, ancillae)
# » Encode the input vector »
encodeVector(circuit, inputVirginica, i, a[:] + i[:], r[0], q)
circuit.x(a) # entanglement dell'ancilla con 0
# » Encode the training vectors »
buildTrainingState(trainingArray)
```

Interferenza e misura

```
circuit.measure(r, b[0])
circuit.h(a)
circuit.measure(a, b[1])
circuit.measure(c[0], b[2])
circuit.measure(c[1], b[3])
```

Algoritmo per classificatore multiclasse

Definizione dei costruttori

```
def encodeTraining(circuit, data, i, controls, rotationQ, ancillaQ,
c, m):
# Header
encodeClass(circuit, c)
encodeIndex(circuit,m)
# Encoder
encodeVector(circuit, data, i, controls, rotationQ, ancillaQ)
# Footer
encodeClass(circuit, c)
encodeIndex(circuit, m)
```

Algoritmo per classificatore multiclasse

Definizione del codificatore

```
def encodeVector(circ, data, i, controls, rotationQ, ancillaQ):
# |00>
circuit.x(i)
circuit.mcry(data[0], controls, rotationQ, ancillaQ)
circuit.x(i)
# |01>
circuit.x(i[1])
circuit.mcry(data[1], controls, rotationQ, ancillaQ)
circuit.x(i[1])
# |10>
circuit.x(i[0])
circuit.mcry(data[2], controls, rotationQ, ancillaQ)
circuit.x(i[0])
# |11>
circuit.mcry(data[3], controls, rotationQ, ancillaQ)
```