Desarrollo de herramientas y métodos automatizados para la simulación y mejora de procesos de computación cuántica basados en inteligencia artificial

David Peral García[1][0000-0003-3299-206X], Juan Cruz-Benito[2][0000-0003-2045-8329]

and Francisco José García-Peñalvo[3][0000-0001-9987-5584]

[1] Expert Systems and Applications Laboratory - ESALAB, Faculty of Science, Universidad de Salamanca (https://ror.org/02f40zc51), Plaza de los Caídos s/n, 37008 Salamanca, Spain
daveral@usal.es
[2] IBM Quantum, IBM T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights, NY 10598, USA
juan.cruz.benito@ibm.com
[3] GRIAL Research Group, Department of Computers and Automatics, Research Institute for Educational Sciences, Universidad de Salamanca (https://ror.org/02f40zc51), Paseo de Canalejas, 169, Salamanca 37008, Spain
fgarcia@usal.es

Resumen. Con la premisa de alcanzar velocidades de cálculo exponencialmente superiores a la computación clásica, la computación cuántica está evolucionando rápidamente para convertirse en una de las áreas más populares de la ingeniería informática. Aunque, hasta hace poco, la mayor parte del trabajo en computación cuántica era puramente teórico o sus simulaciones eran implementadas en *hardware* clásico, la aparición de los denominados dispositivos *Noisy Intermediate Scale Quantum* (NISQ) ha permitido la ejecución de estos trabajos en computadores cuánticos. Recientemente, el área de aplicación de los algoritmos cuánticos se ha ampliado de forma muy notable y ha proporcionado métodos prometedores en áreas como la química, la resolución de sistemas de ecuaciones lineales, las simulaciones físicas y el aprendizaje automático. Una de las áreas más emergentes ha sido el campo del aprendizaje automático, con los dispositivos y algoritmos cuánticos existentes, ya se han producido algunos avances como la creación de redes neuronales con capas cuánticas.

Palabras clave: Computación Cuántica, Machine Learning Cuántico, Procesamiento de Lenguaje Natural Cuántico.

1 Introducción

Desde su descubrimiento, la física cuántica ha cambiado el modo de entender nuestro entorno, una de sus ramas, la mecánica cuántica ha demostrado resultados teóricos precisos y consistentes. La computación cuántica es el proceso de realizar cálculos mediante el uso de la mecánica cuántica. Esta rama estudia el comportamiento cuántico de

ciertas partículas subatómicas (fotones, electrones, etc.) para su posterior uso en la realización de cálculos, así como para procesar información a gran escala [25]. Estas ventajas se consiguen mediante el uso de mecánicas cuánticas, como el entrelazamiento o la superposición.

Estas capacidades proporcionan a las computadoras cuánticas una ventaja en términos de tiempo y coste computacional sobre las computadoras clásicas. Existen desafíos científicos para los cuales la computación es la única respuesta conocida, pero, debido a los recursos excesivos necesarios en términos de espacio (más bytes que átomos en el universo observable) o de tiempo (miles de años), utilizando la computación clásica no serían posibles de realizar [5].

Actualmente, existe una competición en curso entre los grandes laboratorios de investigación para crear la primera computadora cuántica que proporcione ventajas sustanciales para ciertos problemas en comparación con las computadoras convencionales. Además del desarrollo de tales dispositivos, también se requiere del desarrollo de herramientas y métodos automatizados que brinden asistencia en la simulación y diseño de las aplicaciones correspondientes. De lo contrario, podría llegarse a una situación en la que se tengan potentes ordenadores cuánticos, pero muy pocos medios adecuados para utilizarlos [30]

Algunas de estas ventajas anteriormente citadas, ya han permitido avances significativos para todo el campo científico del procesamiento de la información [29], gracias su capacidad para realizar un procesamiento paralelo de la información y una búsqueda rápida sobre conjuntos desordenados de datos.

Por otra parte, dentro de la aplicación de técnicas de *machine learning* clásico para la mejora dentro del mundo cuántico, ya se han realizado estudios que permiten detectar el entrelazamiento cuántico con entrenamiento no supervisado, tanto en estructuras completamente como parcialmente entrelazadas [7], la utilización de *deep learning* para mejorar el ruido producido en sistemas cuánticos [1] o para tratar de determinar las propiedades estructurales y las dinámicas moleculares en el escenario cuántico [9].

Respecto a la adaptación de algoritmos clásicos al mundo cuántico encontramos algunas innovaciones como la creación de cadenas de Markov cuántica [21] o la adaptación del algoritmo de los K-vecinos más próximos al entorno cuántico, utilizando la computación cuántica para calcular la distancia de Hamming y posteriormente un algoritmo para buscar la distancia mínima, esta mejora viene dada por la complejidad del algoritmo (O(sqrt(M) log2 M) respecto al algoritmo clásico (O(M)) [18].

Por último, relativo al diseño e implementación de algoritmos de *deep learning* híbrido, se ha propuesto la utilización de redes convolucionales gráficas híbridas (QGCNN), las cuáles, en comparación con las redes neuronales convolucionales cuánticas, el perceptrón multicapa clásico (MLP) y las redes convolucionales clásicas, puede llegar a obtener mejores rendimientos, por ejemplo, en el aprendizaje de la física de alta energía -HEP- [6]. Otro de los campos de aplicación ha sido la aplicación de redes neuronales híbridas para la predicción del crecimiento Producto Interior Bruto [2] o la utilización de máquinas de Boltzmann para clasificación de pacientes con cáncer de pulmón [15].

2 Proyecto de Tesis Doctoral

Esta tesis tratará de proponer e implementar soluciones y mejoras para el desarrollo de herramientas de simulación de circuitos cuánticos, la tarea de diseño de circuitos cuánticos, la creación y adaptación de diferentes algoritmos mediante computación cuántica, así como el uso de técnicas de inteligencia artificial clásica para la optimización tanto del procesamiento como el de los resultados de dichas tareas. Las soluciones se nutrirán de la experiencia en estructuras de datos y algoritmos eficientes adquiridos en el diseño de circuitos y sistemas convencionales durante las últimas décadas [14, 26]

El presente trabajo de investigación pretende no solo utilizar las ventajas de la computación cuántica para el mundo clásico, sino tratar de aplicar algoritmos clásicos que permitan mejorar algún aspecto del mundo cuántico, por ello se tratará de responder a las siguientes preguntas:

- ¿Qué puede aportar la inteligencia artificial al mundo de la computación cuántica?
- ¿Qué puede aportar el mundo de la computación cuántica al mundo de la computación clásica?

En los primeros dos años del transcurso de la tesis, se ha continuado la formación y el aprendizaje respecto al mundo de la computación cuántica, a la vez que se trataba de responder a la primera pregunta. Una vez obtenido suficiente conocimiento sobre el mundo cuántico comienza la etapa de tratar de aportar con nuestra investigación a este campo, con la implementación de algoritmos o funcionalidades cuánticas puras o híbridas.

Entre las posibles aportaciones de la inteligencia artificial al mundo cuántico se podrían utilizar algoritmos de *deep learning* para tratar de reducir los diferentes modelos de mitigación de ruido de los dispositivos cuánticos, como los ruidos provocados de las puertas Pauli o los relativos a las fases de los *qubits*.

Dentro del aspecto hibrido se podrían adaptar los sistemas de regresiones lineales, logísticas, o máquinas de soporte vectorial con el objetivo de mejorar el rendimiento del computador. En suma, también se puede tratar de crear una red neuronal hibrida, en la que se incorpore una capa de neuronas puramente cuánticas, o aplicar a la salida una serie de puertas cuánticas que permitan la optimización o una mejora en la red.

2.1 Metodología

Se ha escogido la metodología *Design Science* [12, 23] debido a que proporciona un proceso nominal para la realización de la investigación de la tesis, así como un modelo mental o plantilla para una estructura para los resultados de la investigación. Es decir, mejora la producción, presentación y evaluación de la investigación en ciencias del diseño siendo coherente con los principios y directrices de investigación en ciencias del diseño establecidas en estudios de investigación previos. Esta metodología consta de las siguientes partes, identificación del problema y motivación, definición de los objetivos, diseño y desarrollo, demostración, evaluación y comunicación.

Complementariamente se ha realizado una revisión sistemática de la literatura con el objeto de definir un estado de la cuestión robusto para sustentar los avances [10, 11, 17, 22].

2.2 Revisión Sistemática

Una vez se ha realizado el primer año de aprendizaje en el ámbito de la computación cuántica y *machine learning*, se ha comenzado a trabajar en la revisión sistemática de literatura. En ella [24], se presentó una revisión de la literatura publicada entre 2017 y 2021 con el objetivo de identificar, analizar y clasificar los diferentes tipos de algoritmos utilizados en el aprendizaje automático cuántico y sus aplicaciones. La metodología sigue las directrices relacionadas con los métodos de Revisión Sistemática de la Literatura, como la propuesta por Kitchenham [17] en el campo de la ingeniería del software.

En total se recogieron 2983 artículos de las revistas IEEE Digital Library, Web of Science, Science Direct, y IBM Quantum Network Papers publicados entre 2017 y 2021. IBM Quantum Network Papers es un índice mantenido por IBM. Las cadenas de consulta utilizadas para el proceso de búsqueda fueron "*quantum machine learning*", "*quantum deep learning*" o "*quantum neural network**". Al final del estudio, se han identificado 52 artículos que cumplían los criterios de inclusión y calidad. Un resumen de la identificación y selección de los artículos incluidos en esta revisión bibliográfica sistemática puede verse en el diagrama PRISMA -ver **Fig. 1.** Diagrama Prisma-.

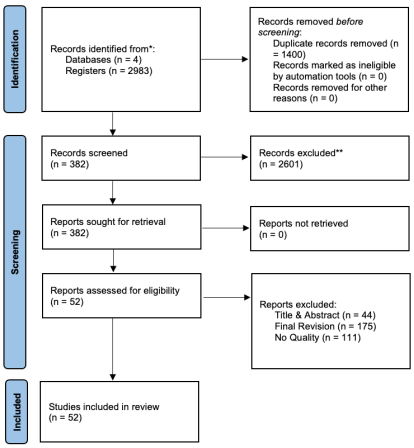

Fig. 1. Diagrama Prisma

Los principales tipos de algoritmos encontrados son implementaciones cuánticas de algoritmos clásicos de aprendizaje automático, como las máquinas de vectores de soporte o el modelo k-próximo, y algoritmos clásicos de aprendizaje profundo, como las redes neuronales cuánticas.

Como se puede observar en la imagen -ver **Fig. 2.** Neurona cuántica- [8]
el cálculo del peso cuántico se obtiene mediante la implementación de diferentes puertas de rotación $R(\theta) = \begin{matrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{matrix}$ y puertas Controlled-NOT U.

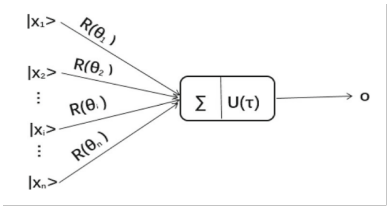

Fig. 2. Neurona cuántica

A partir de este tipo de neuronas cuánticas, es posible crear modelos de redes neuronales más complejos, como este modelo mostrado de redes neuronales cuánticas con retropropagación -ver **Fig. 3.** Red neuronal cuántica con retropropagación- [8]. Donde las neuronas de entrada y neuronas ocultas son cuánticas. El vector de entrada se define como $X = [|x_1\rangle\,|x_2\rangle|x_i\rangle \ldots |x_n\rangle|]^T$ y el vector de salida de la red como $O = [o_1 o_2 \ldots o_k \ldots o_l]^T$ y la matriz de pesos de la forma $V = (v_{ij})_{nm}$ donde v_{ij} es el peso entre el i-ésimo nodo de entrada y el j-ésimo nodo oculto.

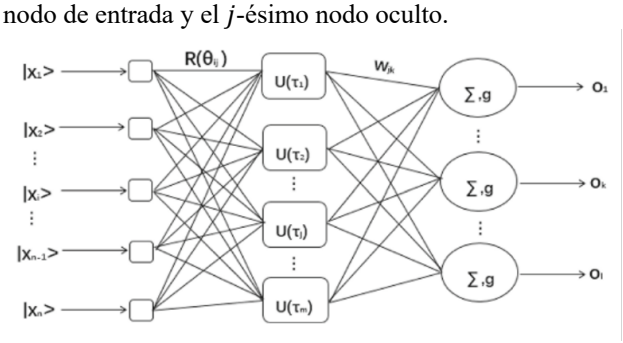

Fig. 3. Red neuronal cuántica con retropropagación

Una vez se ha realizado el análisis de los diferentes tipos de algoritmos la revisión se centra en analizar las aplicaciones de cada uno de ellos. Dentro de las aplicaciones clásicas del *machine learning* cuántico encontramos la clasificación, en particular la clasificación de imágenes, el procesamiento del lenguaje natural (NLP) o las aplicaciones destinadas a mejorar el propio proceso de aprendizaje automático. Las aplicaciones cuánticas incluyen áreas relacionadas con los circuitos cuánticos como la codificación de datos, los compiladores o la detección del entrelazamiento, la identificación de puertas defectuosas y el aprendizaje de máquinas cuánticas.

Muchos artículos, especialmente dentro de la clasificación -ver **Fig. 4.** Algoritmo de clasificación de imágenes de 4x4 pixeles- [27], tratan de resolver problemas a los que actualmente responde el aprendizaje automático clásico, pero utilizando dispositivos y algoritmos cuánticos. Aunque los resultados son prometedores, el aprendizaje automático cuántico está lejos de alcanzar todo su potencial. Para alcanzar este potencial, es

necesario mejorar el hardware cuántico, ya que los ordenadores cuánticos existentes carecen de la calidad, la velocidad y la escala suficientes para que la computación cuántica alcance todo su potencial.

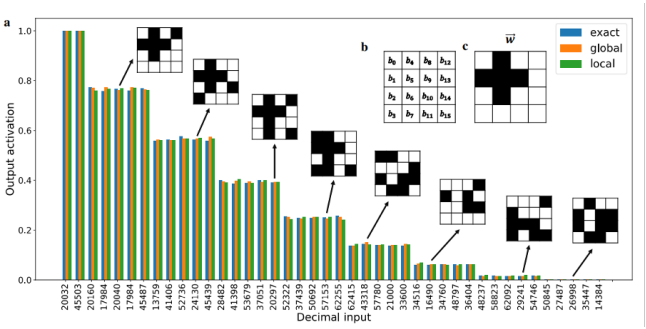

Fig. 4. Algoritmo de clasificación de imágenes de 4x4 pixeles

3 Prueba de concepto

El Procesamiento Cuántico del Lenguaje Natural (QNLP) es un área de investigación relativamente nueva, la cual utiliza modelos de NLP junto a ciertos fenómenos cuánticos como la superposición, el entrelazamiento y la interferencia para realizar tareas relacionadas con el lenguaje en el hardware cuántico.

Los avances más significativos se encuentran [4, 20], donde se proporcionan los fundamentos conceptuales y matemáticos para el procesamiento cuántico del lenguaje natural (QNLP), así como la creación de las librerías DisCoPy [13], la cuál provee de herramientas de código que permiten definir una sintaxis intuitiva para definir diagramas de cadenas y funtores monoidales, DisCoCirc [3], que permiten establecer interacciones entre oraciones en los textos para obtener el significado de ese texto y por último, Lambeq compuesta de un conjunto de herramientas que facilita permite análisis sintáctico, la reescritura y la simplificación de diagramas de cadenas, creación y manipulación de *ansatz* o circuitos cuánticos.

Como siguiente paso de la tesis se realizará una primera aproximación con una pequeña prueba de concepto, tomando algoritmos y *datasets* ya definidos y probados con resultados satisfactorios, pero añadiendo cierta complejidad o incorporando *datasets* diferentes. Se parte de la estructura establecida en (Lorenz, 2021) y de oraciones de la forma 'nombre + verbo + nombre', por ejemplo '*Alice loves Bob*', se pretende responder a la pregunta ¿Quién ama a Bob? https://github.com/CQCL/lambeq/blob/main/docs/tutorials/trainer_quantum.ipynb. En nuestra prueba se amplía la estructura de partida, utilizando la forma 'nombre + conjunción + nombre + verbo + nombre'. Esta prueba de concepto consta de las siguientes fases:

1. Se toman las frases de entrada del *dataset* y se forma un diagrama de cadenas -ver **Fig. 5.** Diagrama en bruto-.

Se convierte el diagrama a forma normal -ver

2. **Fig. 6.** Diagrama en forma normal-.
3. Se transforma el diagrama en un *ansatz* mediante el *Instantaneous Quantum Polynomial* (IQP) *ansatz* [28] -ver **Fig. 7.** *Ansatz* generado a partir del IQP *ansatz*-.
4. Una vez hecho esto se procede al entrenamiento del modelo, en el cual se obtienen unos resultados en referencia al test de validación del 88,70% -ver **Fig. 8.** Resultados del entrenamiento del modelo-.

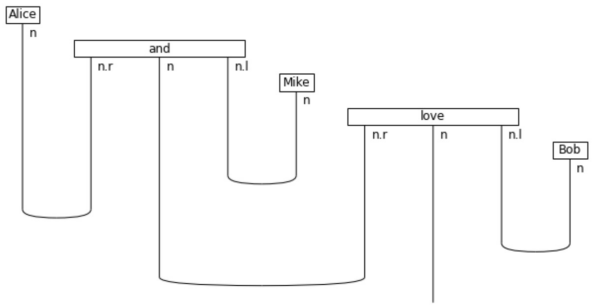

Fig. 5. Diagrama en bruto

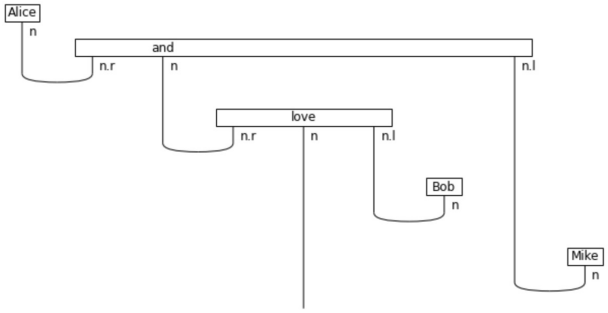

Fig. 6. Diagrama en forma normal

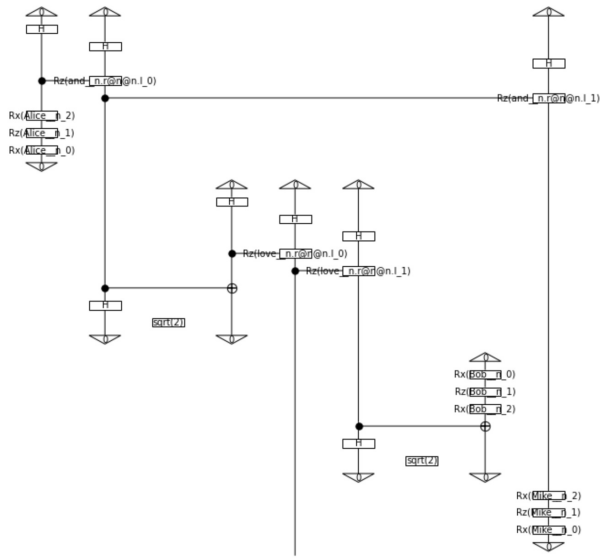

Fig. 7. *Ansatz* generado a partir del IQP *ansatz*

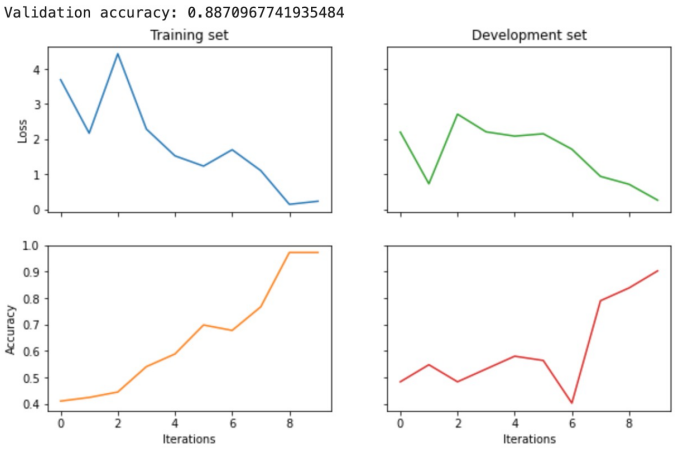

Fig. 8. Resultados del entrenamiento del modelo

Mediante esta pequeña prueba de concepto se puede concluir que una vez los dispositivos cuánticos se desarrollen y mejoren tanto su tamaño como calidad, se podrán obtener resultados significativos con ejemplos no prototípicos. Como líneas futuras de trabajo, se propone expandir en número de palabras que se pueden incluir en una misma frase para analizar hasta el punto máximo del número de *qubits* disponibles, así como la realización de un análisis semántico en vez de un análisis sintáctico.

4 Conclusiones

En objetivo principal de esta tesis es tratar de proporcionar un aporte al mundo cuántico relevante, primero recabando la suficiente información, tanto de la computación cuántica en general, aprendiendo cómo se comportan los *qubits*, los diferentes procesos físicos que permiten su implementación, así como el estudio de su comportamiento con la aplicación de las diferentes puertas lógicas cuánticas. Una vez hecho esto, se acota el tema de estudio al *machine learning* cuántico, por ello se realiza una revisión sistemática de literatura, mediante la cual se obtienen los artículos más relevantes y una visión global del tema de investigación, lo que nos permite detectar que en el campo del procesamiento del lenguaje natural cuántico se han establecido unas bases, pero el campo no ha sido desarrollado por completo. Por este motivo, se escoge este subcampo del *machine learning* como siguiente punto de partida, para ello se realiza una primera prueba de concepto que sirve para comprender el proceso de transformación desde una frase a un diagrama de bloques, así como su adaptación para la creación de un modelo. Como siguientes pasos se plantea realizar un modelo para determinar la similitud semántica, o creación de nuevos generadores de circuitos cuánticos, así como la ampliación con *datasets* de entrada más complejos o en otros idiomas.

References

1. Ai, M.-Z., Ding, Y., Ban, Y., Martín-Guerrero, J. D., Casanova, J., Cui, J.-M., . . . Guo, G.-C. (2021). Experimentally Realizing Efficient Quantum Control with Reinforce-ment Learning. Obtenido de https://arxiv.org/abs/2101.09020
2. Alaminos, D., Salas, B., & Gomez, M. F. (2021). Quantum Computing and Deep Learn-ing Methods for GDP Growth Forecasting. Computational Economics.
3. Coecke B., The mathematics of text structure, 2019.
4. Coecke B., Giovanni de Felice, Konstantinos Meichanetzidis, and Alexis Toumi. Foundations for near-term quantum natural language processing, 2020.
5. Carrascal, G., Barrio, A. d., & Botella, G. (2020). First experiences of teaching quantum computing. Journal of Supercomputing, 1-30.
6. Chen, S. Y.-C., Wei, T.-C., Zhang, C., Yu, H., & Yoo, S. (2021). Hybrid Quantum-Classical Graph Convolutional Network. Obtenido de https://arxiv.org/abs/2101.06189
7. Chen, Y., Pan, Y., Zhang, G., & Cheng, S. (2021). Detecting quantum entanglement with unsupervised learning. Obtenido de https://arxiv.org/abs/2103.04804
8. Chen B. Q., Niu X. F., Quantum Neural Network with Improved Quantum Learning Algorithm, International Journal of Theoretical Physics 59 (7) (2020) 1978–1991. doi:10.1007/s10773-020-04470-9
9. Domingo, L., & Borondo, F. (2021). Deep learning methods for the computation of vi-brational wavefunctions. Obtenido de https://arxiv.org/abs/2103.00202
10. García-Holgado, A., Marcos-Pablos, S., & García-Peñalvo, F. J. (2020). Guidelines for performing Systematic Research Projects Reviews. International Journal of Interactive Multimedia and Artificial Intelligence, 6(2), 136-144.
11. García-Peñalvo, F. J. (2022). Developing robust state-of-the-art reports: Systematic Literature Reviews. Education in the Knowledge Society, 23, Article e28600. https://doi.org/10.14201/eks.28600

12. Geerts, G. (2011). A design science research methodology and its application to ac-counting information systems research. International Journal of Accounting Infor-mation Systems, 142-151.
13. G de Felice, Toumi A., and Coecke B. DisCoPy: Monoidal categories in python. Electronic Proceedings in Theoretical Computer Science, 333:183–197, feb 2021.
14. Grover, L. K. (1996). A fast quantum mechanical algorithm for database search. Pro-ceedings of the Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 212-219.
15. Jain, S., Ziauddin, J., Leonchyk, P., Yenkanchi, S., & Geraci, J. (2020). Quantum and clas-sical machine learning for the classification of non-small-cell lung cancer patients. SN Ap-plied Sciences.
16. Kartsaklis D., Fan I., Yeung R., Pearson A, Lorenz R., Tou-mi A, G de Felice, Meichanetzidis K, Clark S, and Coecke B. lambeq: An efficient high-level python library for quantum nlp, 2021.
17. Kitchenham, B., & Charters, S. (2007). Guidelines for performing Systematic Litera-ture Reviews in Software Engineering. [Technical Report](EBSE-2007-01). https://goo.gl/L1VHcw.
18. Li J., Lin S., Yu Kai Y., and Gongde Guo G.. Quantum k-nearest neighbor classification algorithm based on hamming distance, 2021.
19. Lorenz R., Pearson A., Meichanetzidis K., Kartsaklis D, and Coecke B.. Qnlp in prac-tice: Running compositional models of meaning on a quantum computer, 2021.
20. Meichanetzidis K, Toumi A, G de Felice, and Coecke B. Grammar-aware question-answering on quantum computers, 2020.
21. Metcalf, M., Stone, E., Klymko, K., Kemper, A. F., Sarovar, M., & Jong, W. A. (2021). Quantum Markov Chain Monte Carlo with Digital Dissipative Dynamics on Quan-tum Computers. Obtenido de https://arxiv.org/abs/2103.03207
22. Moher, D., Liberati, A., Tetzlaff, J., Altman, D. G., & Group, T. P. (2009). Preferred Re-porting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses: The PRISMA Statement. PLOS Medicine, 6(7) Article e100097.
23. Peffers, K., Tuunanen, T., Rothenberger, M., & Chatterjee, S. (2007). A Design Science Research Methodology for Information Systems Research. Journal of Management In-formation Systems, 45-77.
24. Peral-García D., Cruz-Benito J., and García-Peñalvo FJ. Systematic literature review: Quantum machine learning and its applications, 2022.
25. Sgarbas, K. N. (2007). The Road to Quantum Artificial Intelligence. Obtenido de https://ar-xiv.org/abs/0705.3360
26. Shor, P. W. (1999). Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete loga-rithms on a quantum computer. SIAM Review, 303-332.
27. Tacchino F., Barkoutsos P., Macchiavello C., Tavernelli I., Gerace D., Bajoni D., Quan-tum implementation of an artificial feed-forward neural network, Quantum Science and Tech-nology 5 (4). arXiv:1912.12486, doi:10.1088/2058-9565/abb8e4
28. Vojtěch Havlíček, Antonio D. Córcoles, Kristan Temme, Aram W. Harrow, Abhinav Kan-dala, Jerry M. Chow, and Jay M. Gambetta. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. Nature, 567(7747):209–212, mar 2019.
29. Wichert, A. (2013). Principles of Quantum Artificial Intelligence. World Scientific.
30. Zulehner, A., & Wille, R. (2020). Simulation and design of quantum circuits. En Lec-ture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intel-ligence and Lecture Notes in Bioinformatics (págs. 60-82). Springer.