

# Redes Neuronales Cuánticas para la predicción de Series Temporales Multivariantes

José Daniel Viqueira Cao  
Fundación CESGA

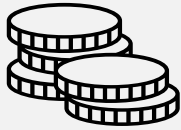
# Motivación

# SERIES TEMPORALES



## Inteligencia Artificial

- Lenguaje natural
- Reconocimiento de voz



## Finanzas

- Precios de stock
- Crisis financieras



## Meteorología-geología

- Pronóstico del tiempo
- Predicción terremotos



## Medicina

- Electroencefalogramas



## Astronomía

- Curvas de luz



## Industria

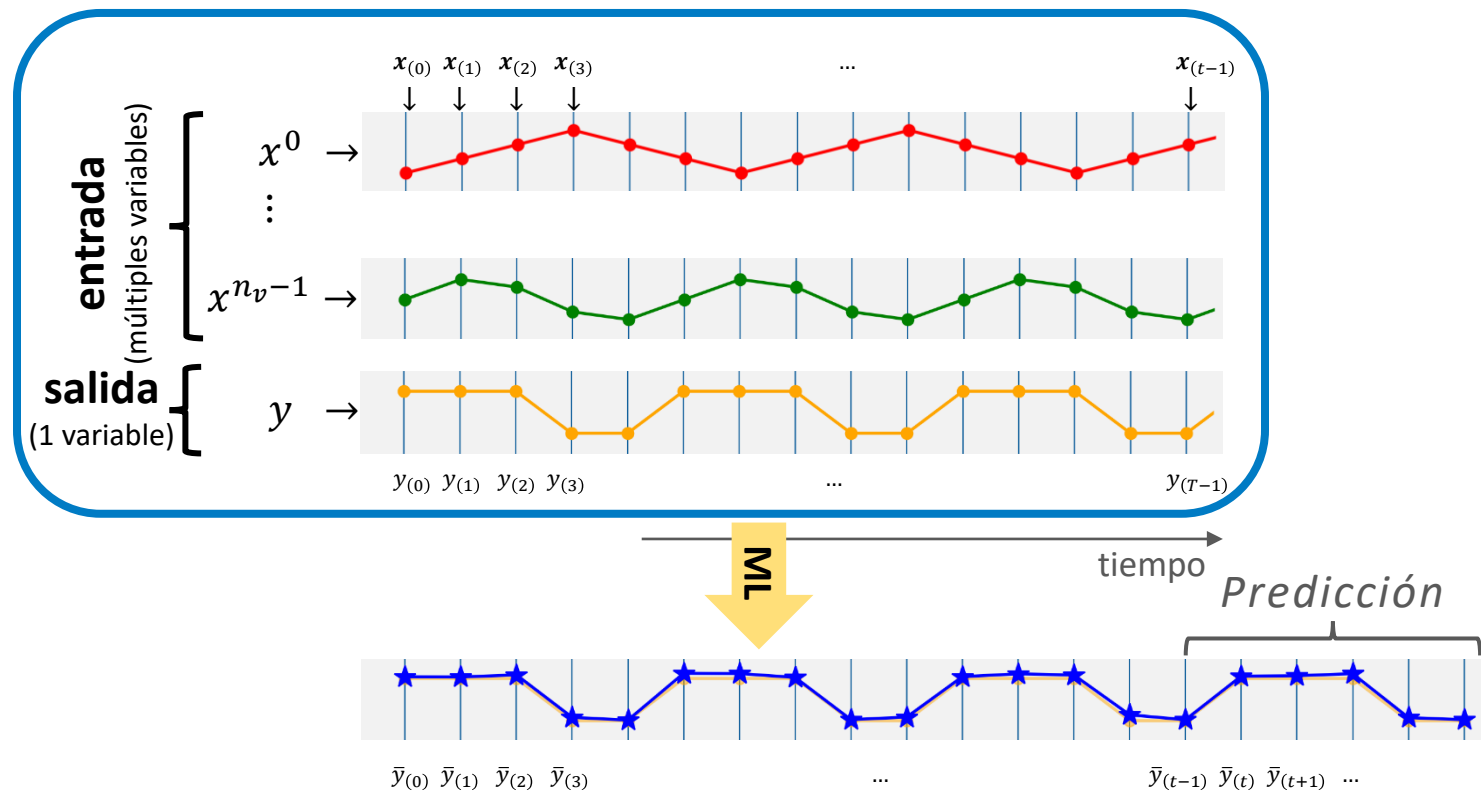
- Datos de sensores

- **Problemas** comunes que deben subsanar los algoritmos de predicción:
  - Secuencias largas
  - Alta no-linealidad
  - Alta dimensionalidad

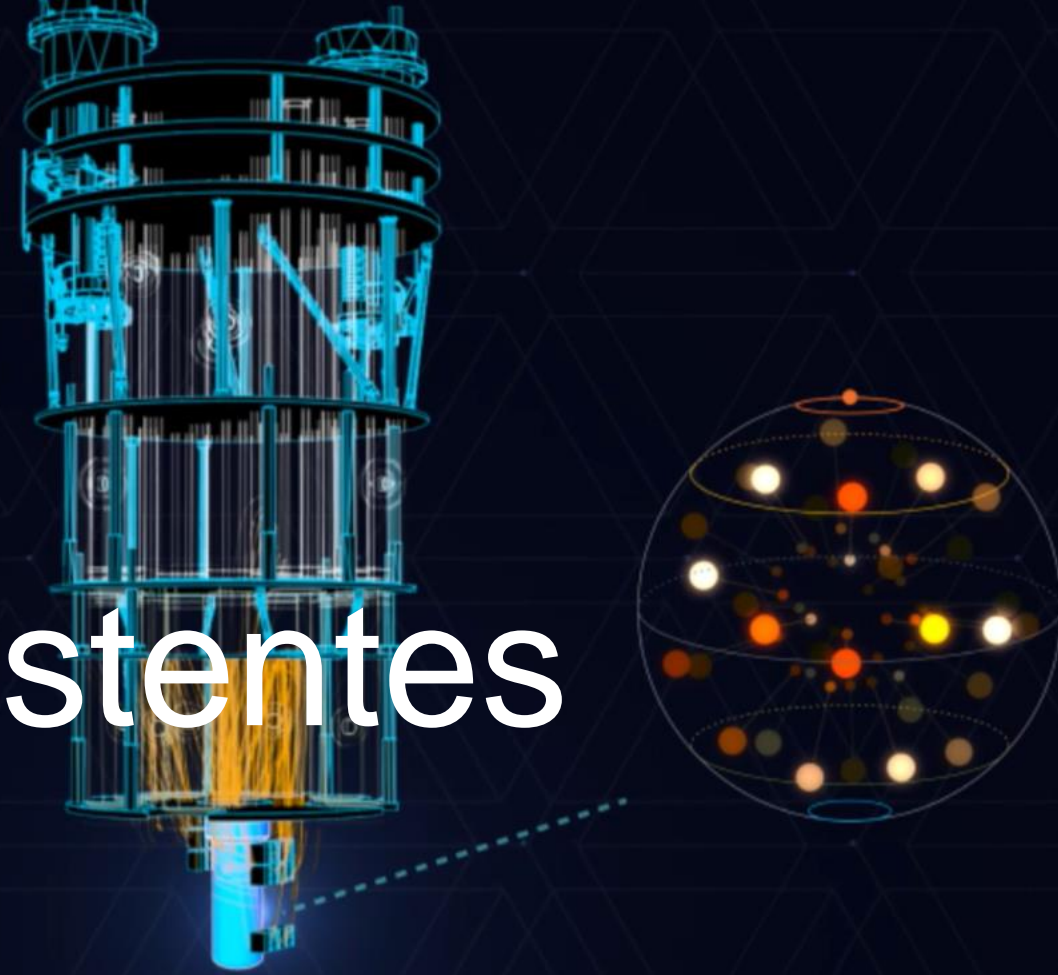


# MACHINE LEARNING PARA SERIES TEMPORALES MULTIVARIANTES

## Datos de entrenamiento



# Algoritmos existentes



# DE ALGORITMOS CLÁSICOS...

- **Redes Neuronales Recurrentes (RNNs)**

- *Long Short-Term Memory (LSTM)*
- *Gated Recurrent Unit (GRU)*
- *Echo-State Networks*
- *Transformers*

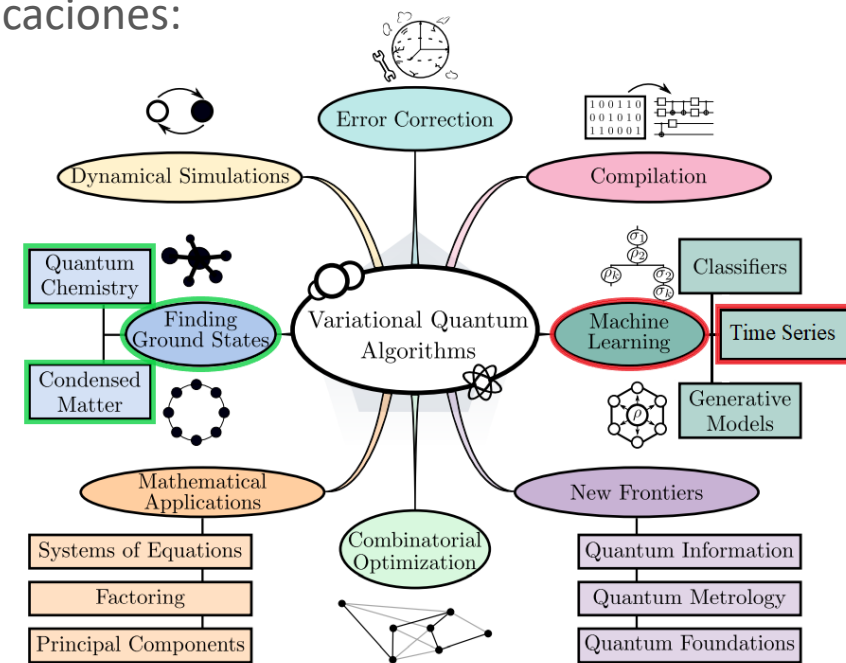
- × **Inconvenientes:**

- Durante la optimización: gradientes explosivos o *vanishing*. Una solución plausible: *backpropagation through time*.
- La **memoria** de las primeras entradas se va atenuando gradualmente. Soluciones: implementar LSTM y GRU.
- A medida que se van añadiendo más capas, los **recursos** computacionales necesarios crecen enormemente.

# ... A CUÁNTICOS

- **Quantum Machine Learning (QML):** una forma de *Algoritmos Cuánticos Variacionales (VQAs)*
  - Lo que las máquinas pueden aprender está limitado por la potencia del hardware actual
  - La computación cuántica extiende el conjunto de software disponible para ML
  - Podemos utilizar circuitos cuánticos como redes neuronales

- **VQAs:** algoritmos híbridos basados en **Circuitos Cuánticos Parametrizados** cuyos parámetros (pesos) se optimizan por un algoritmo clásico
  - Elementos de un VQA: **función de coste + ansatz + optimizador**
  - Aplicaciones:



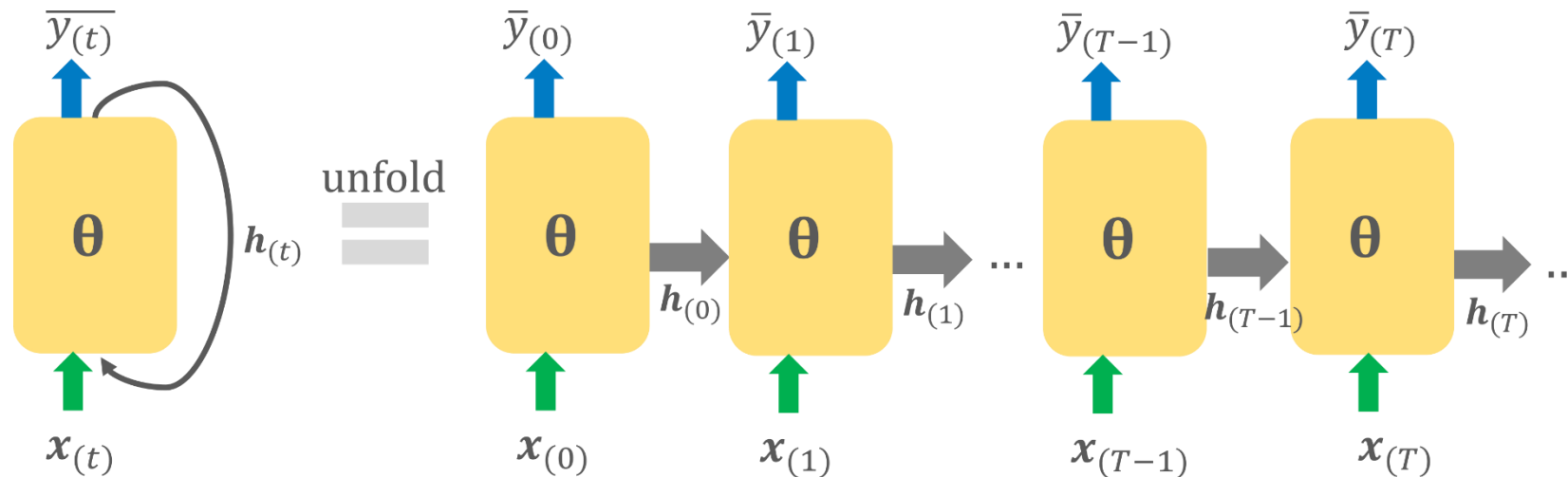
Adaptado de Nature Reviews Physics **3**, 625 (2021)

# Diseño de Redes Neuronales Recurrentes



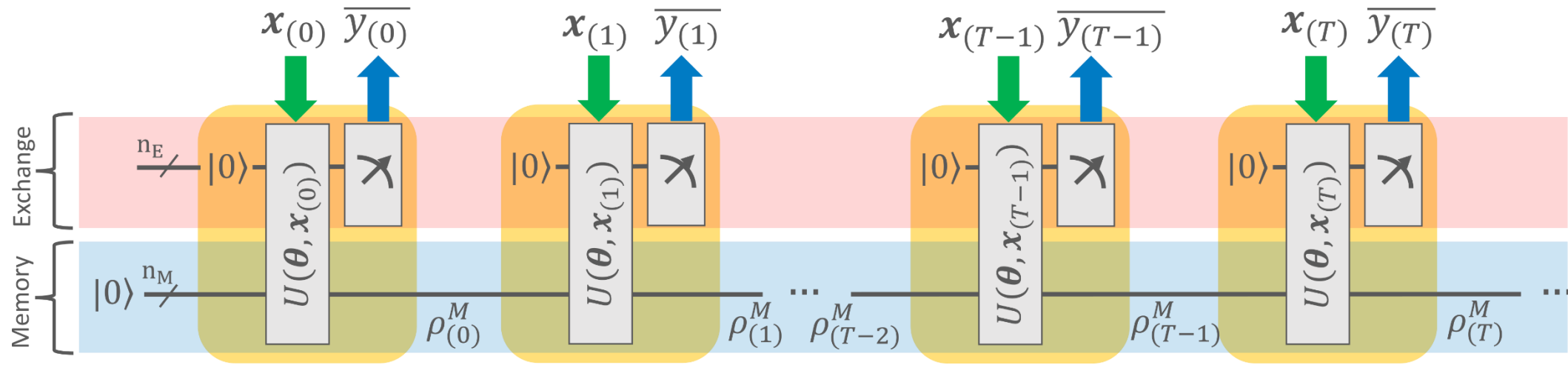
# MODELO RNN BÁSICO

- La célula RNN supervisada recibe una entrada multivariante en cada instante y devuelve:
  - una estimación como **salida**,  $\bar{y}_{(t)}$ ,
  - un **estado oculto**,  $h_{(t)}$ .
- El estado oculto se reintroduce en la célula recurrentemente.



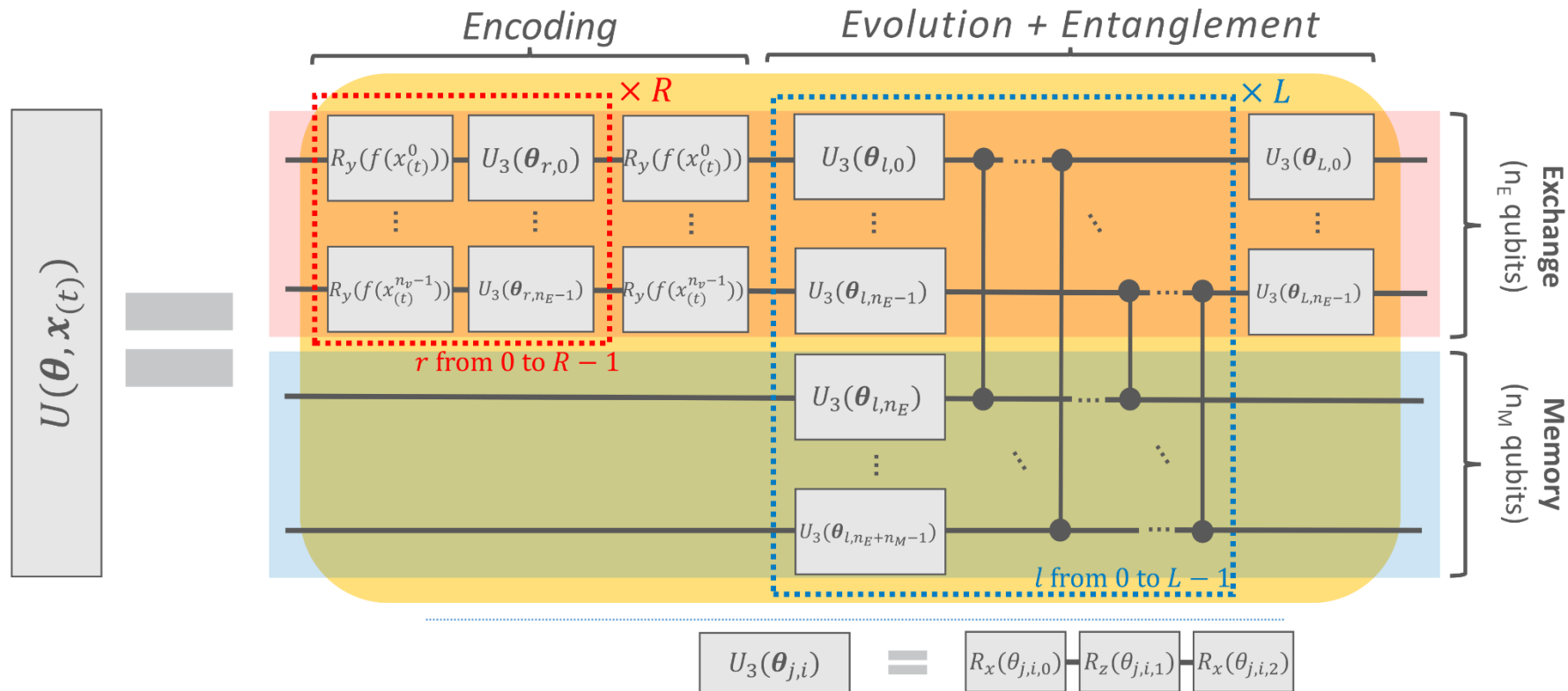
# MODELO DE CIRCUITO QRNN

- El circuito QRNN se inspira en la RNN clásica, dividiendo los cúbits en dos grupos [Phys. Rev. A **103**, 052414 (2021)]:
  - Registro de intercambio (E):** recurrentemente, recibe datos clásicos y se mide.
  - Registro de memoria (M):** nunca se mide, manteniendo información previa.
- El unitario  $U$  es nuestro *ansatz*, y codifica los datos clásicos en el circuito, aplica una evolución dependiendo del conjunto de parámetros  $\theta$  y entrelaza cúbits de E y M, transmitiendo información entre ambos registros.



# ANSATZ HARDWARE-EFFICIENT

- Este es el **unitario**  $U$  para entradas multi-variable, un *ansatz hardware-efficient*.
- El **codificado** de datos se repite  $R$  veces para conseguir un mejor poder expresivo [Quantum 4, 226 (2020)].



# VENTAJAS DE ESTE MODELO QRNN

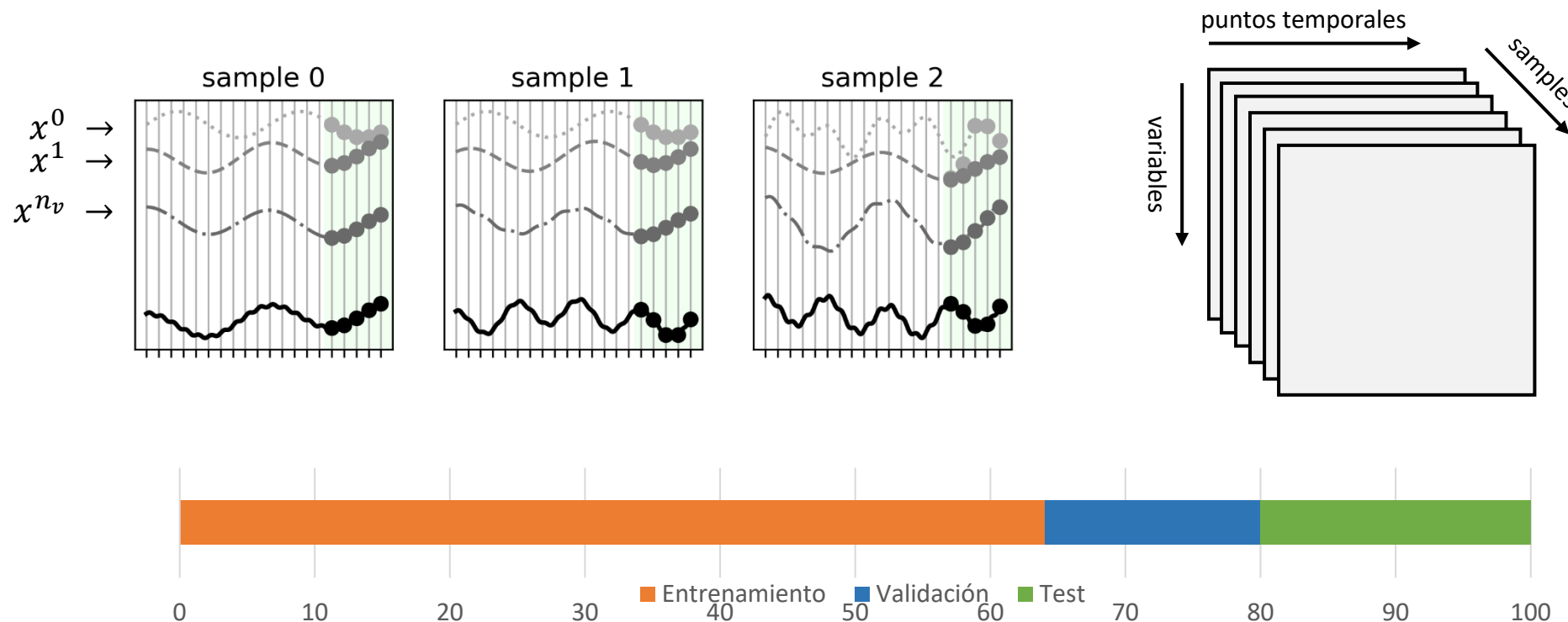
- **Codificado.** Proyectamos variables de un *dataset* en un espacio de Hilbert exponencialmente grande.
- **Capacidad.** No-linealidad por la estructura de productos tensoriales (probado).
- **Memoria.** (probado) La información de anteriores pasos temporales se transmite a través del registro M (memoria).



# Resultados

# CONFIGURACIÓN DEL ALGORITMO

- Utilizamos nuestro modelo QRNN para predecir valores futuros a partir de una serie conocida.
- La serie se divide en ventanas (*samples*), de modo que hacemos una evaluación de las salidas para cada una de ellas.



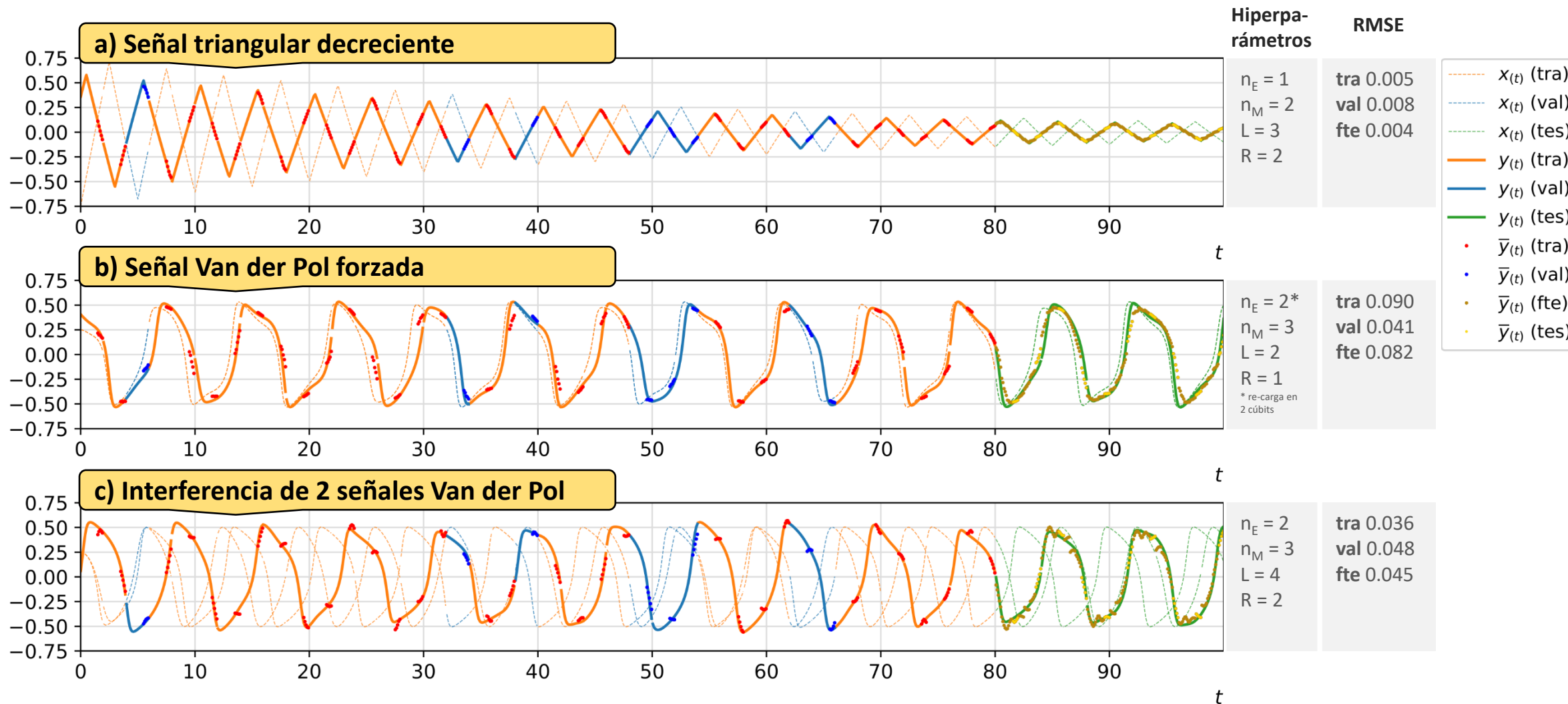
# CONFIGURACIÓN DEL ALGORITMO

- **Función de coste:** error cuadrático medio raíz (RMSE) entre las últimas 5 predicciones de cada ventana y sus respectivas referencias (*labels*).
- **Parámetros entrenables:** conjunto  $\theta$  para puertas de rotación y un *bias*,  $b$ .

$$\overline{y}_{(t)} = \left( \langle Z^{\otimes n_E} \rangle(\mathbf{x}, \theta) \right)_{(t)} + b$$

- **Optimización:** minimización del RMSE con el método **L-BFGS-B**. Inicialización aleatoria de  $\theta$ .
  - Utiliza gradientes y una aproximación del Hessiano. Se han utilizado gradientes numéricos, y también analíticos aplicando la *Parameter Shift Rule* [Phys. Rev. A **99**, 032331 (2019)].
- **Emulación ideal** del circuito cuántico con un emulador propio basado en matriz de densidad (pronto en [arXiv](#)).

# RESULTADOS CON 3 DATASETS





- La QRNN presentada tiene una implementación efectiva difícil en **computadores cuánticos** actuales, por la profundidad del circuito.
- El entrenamiento requiere de **numerosas evaluaciones** del circuito, sumado a la dificultad de entrenar redes recurrentes.
- Sin embargo, con **pocos cúbits** obtenemos una buena convergencia, a costa de añadir múltiples capas de entrelazamiento.
- Puede **modelar series** de, al menos, una y dos variables y predecir el comportamiento de una serie uni-variable dependiente de las anteriores.
- **Próximos pasos:**
  - Emulación con ruido.
  - Sofisticación del algoritmo de optimización.
  - Entrenamiento con datos ruidosos.

**DESPREGAMENTO DUNHA INFRAESTRUTURA BASEADA  
EN TECNOLOXÍAS CUÁNTICAS DA INFORMACIÓN QUE  
PERMITA IMPULSAR A I+D+i en GALICIA**

**Apoiar a transición cara a unha economía dixital**

**Operación financiada pola Unión Europea, a través do  
FONDO EUROPEO DE DESENVOLVEMENTO REXIONAL (FEDER),  
como parte da resposta da Unión á pandemia da COVID-19**

PROGRAMA OPERATIVO  
FEDER GALICIA  
2014-2020

*Unha maneira de facer Europa*

¡GRACIAS!

[jdviqueira@cesga.es](mailto:jdviqueira@cesga.es)