



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

Σχολή Τεχνολογίας

Τμήμα Ψηφιακών Συστημάτων

Κβαντική Μηχανική Μάθηση για την ανάπτυξη φαρμάκων

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Κωνσταντίνος Πανάγος (ΑΜ: 00053)

Επιβλέπων: Ηλίας Σάββας, Καθηγητής

ΛΑΡΙΣΑ, Ιανουάριος 2025



UNIVERSITY OF THESSALY

School of Technology

Digital Systems Department

Quantum Machine Learning for drug development

MASTER'S THESIS

Konstantinos Panagos (RN: 00053)

Supervisor: Ilias Savvas, Professor

LARISSA, January 2025

[2]

Υπεύθυνη Δήλωση περί Ακαδημαϊκής Δεοντολογίας και Πνευματικών Δικαιωμάτων

Με πλήρη επίγνωση των συνεπειών του νόμου περί πνευματικών δικαιωμάτων, δηλώνω ρητά ότι η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, καθώς και τα ηλεκτρονικά αρχεία και πηγαίοι κώδικες που αναπτύχθηκαν ή τροποποιήθηκαν στα πλαίσια αυτής της εργασίας, αποτελεί αποκλειστικά προϊόν προσωπικής μου εργασίας, δεν προσβάλλει κάθε μορφής δικαιώματα διανοητικής ιδιοκτησίας, προσωπικότητας και προσωπικών δεδομένων τρίτων, δεν περιέχει έργα/εισφορές τρίτων για τα οποία απαιτείται άδεια των δημιουργών/δικαιούχων και δεν είναι προϊόν μερικής ή ολικής αντιγραφής, οι πηγές δε που χρησιμοποιήθηκαν περιορίζονται στις βιβλιογραφικές αναφορές και μόνον, και πληρούν τους κανόνες της επιστημονικής παράθεσης. Τα σημεία όπου έχω χρησιμοποιήσει ιδέες, κείμενο, αρχεία ή/και πηγές άλλων συγγραφέων, αναφέρονται ευδιάκριτα στο κείμενο με την κατάλληλη παραπομπή και η σχετική αναφορά περιλαμβάνεται στο τμήμα των βιβλιογραφικών αναφορών με πλήρη περιγραφή.

Αναλαμβάνω πλήρως, ατομικά και προσωπικά, όλες τις νομικές και διοικητικές συνέπειες που δύναται να προκύψουν στην περίπτωση κατά την οποία αποδειχθεί, διαχρονικά, ότι η εργασία αυτή ή τμήμα της δεν μου ανήκει διότι είναι προϊόν λογοκλοπής.

Ο Δηλών

(Υπογραφή)

Κωνσταντίνος Πανάγος

27/01/2025

Εγκρίνεται από την Επιτροπή Εξέτασης:

Επιβλέπων

Ηλίας Σάββας

Βαθμίδα/ιδιότητα επιβλέποντα,

Τμήμα Ψηφιακών Συστημάτων, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Μέλος

Ονοματεπώνυμο Μέλους 1

Βαθμίδα/ιδιότητα μέλους 1, Τμήμα/Ιδρυμα μέλους 1

Μέλος

Ονοματεπώνυμο Μέλους 2

Βαθμίδα/ιδιότητα μέλους 2, Τμήμα/Ιδρυμα μέλους 2

Ημερομηνία έγκρισης:

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διπλωματική εργασία εξετάζει το ρόλο της κβαντικής μηχανικής μάθησης στη βελτίωση της φαρμακευτικής έρευνας. Στόχος της είναι η διερεύνηση καινοτόμων τεχνολογιών, με το συνδυασμό της μηχανικής μάθησης και της κβαντικής υπολογιστικής, που μπορούν να βελτιώσουν τη διαδικασία ανάπτυξης νέων φαρμάκων, μειώνοντας το χρόνο και το κόστος.

Πραγματοποιείται σύγκριση μεταξύ κλασικών και κβαντικών προσεγγίσεων σε ζητήματα επεξεργασίας δεδομένων, πρόβλεψης και ανάλυσης. Εξετάζονται οι βασικές αρχές της μηχανικής μάθησης και της κβαντικής υπολογιστικής, καθώς και η εφαρμογή τους σε προβλήματα μεγάλης υπολογιστικής πολυπλοκότητας, όπως η ανάλυση μοριακών αλληλεπιδράσεων. Παρουσιάζονται τόσο θεωρητικές όσο και πρακτικές προσεγγίσεις, οι οποίες αναδεικνύουν τη δυνατότητα των τεχνολογιών αυτών να βελτιώσουν την αποδοτικότητα.

Τα αποτελέσματα της έρευνας καταδεικνύουν τη δυναμική των τεχνολογιών που εξετάζονται όσον αφορά τη διαχείριση μεγάλων δεδομένων και τη μοντελοποίηση σύνθετων συστημάτων στην παραγωγική διαδικασία φαρμάκων. Η εργασία παρέχει ένα γενικό πλαίσιο για τη μελλοντική αξιοποίηση αυτών των τεχνολογιών στη φαρμακευτική έρευνα και καλλιεργεί την ανάγκη για περαιτέρω μελέτη και εξέλιξη στον κλάδο αυτό.

Λέξεις κλειδιά: Κβαντική Υπολογιστική, Μηχανική Μάθηση, Κβαντική Μηχανική Μάθηση, Ανάπτυξη Φαρμάκων.

ABSTRACT

This master's thesis examines the role of quantum machine learning in advancing pharmaceutical research. Its aim is to explore innovative technologies by combining machine learning and quantum computing to enhance the drug development process, reducing both time and cost.

A comparison is conducted between classical and quantum approaches in data processing, prediction, and analysis. The fundamental principles of machine learning and quantum computing are examined, as well as their application to problems of high computational complexity, such as the analysis of molecular interactions. Both theoretical and practical approaches are presented, highlighting the potential of these technologies to improve efficiency.

The research findings demonstrate the potential of the technologies under examination in managing large datasets and modeling complex systems within the drug production process. The thesis provides a general framework for the future utilization of these technologies in pharmaceutical research and emphasizes the need for further study and development in this field.

Key words: Quantum Computing, Machine Learning, Quantum Machine Learning, Drug Development.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον καθηγητή μου, κ. Σάββα, για την πολύτιμη και άμεση βοήθεια που μου παρείχε σε όλη τη διάρκεια της συγγραφής της συγκεκριμένης διπλωματικής εργασίας.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω και την οικογένειά μου για την αμέριστη στήριξη που μου προσέφερε σε όλη τη διάρκεια της ακαδημαϊκής μου πορείας.

Κωνσταντίνος Πανάγος

27/01/2025

Περιεχόμενα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	5
ABSTRACT.....	6
ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ.....	7
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	10
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ.....	11
2.1 Μηχανική Μάθηση – Εισαγωγή.....	11
2.2 Η Μηχανική Μάθηση στον τομέα της υγείας.....	12
2.3 Μάθηση με Επίβλεψη.....	14
2.4 Αλγόριθμοι της μάθησης με επίβλεψη.....	15
2.5 Κριτήρια επίδοσης της ταξινόμησης.....	23
2.6 Μάθηση χωρίς Επίβλεψη.....	24
2.7 Τεχνικές και αλγόριθμοι μάθησης χωρίς επίβλεψη.....	25
2.8 Μάθηση με Ενίσχυση.....	29
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ.....	33
3.1 Κβαντική Υπολογιστική – Εισαγωγή.....	33
3.2 Qubits και Καταχωρητές.....	34
3.3 Κβαντικές Πύλες και Κβαντικά Κυκλώματα.....	40
3.4 Κβαντικοί Αλγόριθμοι.....	54
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ.....	69
4.1 Κβαντική Μηχανική Μάθηση – Εισαγωγή.....	69
4.2 Κβαντικοί Αλγόριθμοι Μηχανικής Μάθησης.....	74

4.3 Μελλοντικές εφαρμογές και προοπτικές.....	84
4.4 Η κβαντική μηχανική μάθηση στη φαρμακευτική έρευνα.....	85
4.5 Μοντέλα Κβαντικής Μηχανικής Μάθησης (QML Models).....	90
4.6 Προσομοίωση φαρμακευτικών ενώσεων με κβαντικούς αλγορίθμους.....	98
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	101
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ.....	108
Παράρτημα Α.....	108
Παράρτημα Β.....	109

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η φαρμακευτική έρευνα αποτελεί έναν από τους πιο σημαντικούς και ταυτόχρονα από τους πιο απαιτητικούς τομείς όλων των επιστημών. Η ανάπτυξη νέων φαρμάκων είναι μια αρκετά περίπλοκη, αλλά και ιδιαίτερα δαπανηρή και χρονοβόρα διαδικασία. Παρά τις μεγάλες προόδους της υπολογιστικής επιστήμης, οι παραδοσιακές μέθοδοι παρουσιάζουν περιορισμούς, ιδίως όταν πρέπει να αντιμετωπιστούν πολύπλοκα μοριακά συστήματα.

Η ανάγκη για ακριβέστερα και ταχύτερα αποτελέσματα έχει οδηγήσει την επιστημονική κοινότητα στην αναζήτηση καινοτόμων τεχνολογιών που θα μπορούσαν να επιταχύνουν και να βελτιώσουν τη διαδικασία ανακάλυψης νέων φαρμάκων. Οι μέχρι τώρα μέθοδοι, όπως ο υπολογιστικός προσδιορισμός μοριακών δομών και οι πειραματικές μέθοδοι προσυμπτωματικού ελέγχου, συνήθως εμπλέκονται σε πολυάριθμα στάδια δοκιμών, με κύριο στόχο την ανακάλυψη ενώσεων που αλληλεπιδρούν επιτυχώς με συγκεκριμένους βιολογικούς στόχους. Όμως, η πολυπλοκότητα των μοριακών συστημάτων και η ανάγκη για ακριβείς προβλέψεις περιορίζουν τις δυνατότητες των κλασικών μεθόδων, αυξάνοντας, έτσι, το ρίσκο αποτυχίας και τα κόστη. Η ραγδαία ανάπτυξη της τεχνολογίας και ιδίως των κλάδων της μηχανικής μάθησης και της κβαντικής υπολογιστικής, έχουν συμβάλλει στην επίλυση των μέχρι πρότινος σύνθετων υπολογιστικών προβλημάτων.

Η μηχανική μάθηση είναι ένας κλάδος της τεχνητής νοημοσύνης και σχετίζεται με την ανάπτυξη αλγορίθμων και μοντέλων που επιτρέπουν σε ένα σύστημα να μαθαίνει από κάποια δεδομένα και να βελτιώνει την απόδοσή του για μια συγκεκριμένη εργασία. Οι σύγχρονες μέθοδοι της μηχανικής μάθησης, έχοντας την ικανότητα να επεξεργάζονται μεγάλα σύνολα δεδομένων και να μαθαίνουν από αυτά, είναι αναμφίβολα μια μεγάλη βοήθεια στον τομέα των φαρμάκων (Διαμαντάρας, 2019).

Επίσης, η κβαντομηχανική είναι ένας κλάδος της Φυσικής ο οποίος ασχολείται με τη συμπεριφορά της ύλης και του φωτός σε ατομική και υποατομική κλίμακα. Σκοπός της είναι να περιγράψει και να ερμηνεύσει

πως λειτουργεί πραγματικά ο μικρόκοσμος. Σε αυτές τις κλίμακες, ωστόσο, οι νόμοι της κλασικής φυσικής δεν μπορούν να ισχύσουν πλέον. Η επιστήμη της κβαντικής υπολογιστικής στηρίζεται στις αρχές της κβαντομηχανικής και χρησιμοποιεί ορισμένα φαινόμενά της, όπως η υπέρθεση και η διεμπλοκή. Αυτό της επιτρέπει να χειριστεί δεδομένα και να επιλύσει προβλήματα με τρόπους που δεν είναι εφικτοί από τους κλασικούς υπολογιστές, γεγονός που την καθιστά αρκετά υποσχόμενη στο πεδίο της ανάπτυξης φαρμάκων (Βικιπαίδεια, 2025).

Ο στόχος της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η διερεύνηση του ρόλου και των δυνατοτήτων των νέων τεχνολογιών και πιο συγκεκριμένα της κβαντικής μηχανικής μάθησης στην ανάπτυξη φαρμάκων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

2.1 Μηχανική Μάθηση - Εισαγωγή

Στις μέρες μας, ο κλάδος της μηχανικής μάθησης έχει γνωρίσει ραγδαία ανάπτυξη. Τα σύνθετα αλλά και τα απλούστερα προβλήματα που ολοένα και διογκώνονται, απαιτούν ευφυείς προσεγγίσεις για την πιο εύκολη επίλυσή τους. Ως μάθηση ορίζουμε τη διαδικασία κατά την οποία βελτιώνεται η επίδοση ενός συστήματος σε μια συγκεκριμένη εργασία έπειτα από την παρατήρηση πολυάριθμων παραδειγμάτων (Κόκκορας, 2020). Η διαδικασία της μάθησης προϋποθέτει την ύπαρξη τριών βασικών δεδομένων. Πρώτον, πρέπει να υπάρχει ένα περιβάλλον ώστε να παρέχονται δεδομένα στο σύστημα με τη μορφή παραδειγμάτων. Ακολούθως, είναι αναγκαία η ύπαρξη ενός κριτηρίου το οποίο θα συμβάλλει στην αξιολόγηση της επίδοσης κάθε

συστήματος. Τέλος, κρίνεται απαραίτητη η ύπαρξη μιας συγκεκριμένης εργασίας η οποία θα καλείται να εκτελεστεί από το σύστημα (Γεωργούλη, 2015). Μπορούμε να αναφέρουμε πολλά παραδείγματα εργασιών, τόσο της καθημερινότητας όσο και πιο σύνθετων, οι οποίες είναι σε θέση να βελτιωθούν μέσω της μάθησης. Ενδεικτικά, μπορούμε να επισημάνουμε ως τέτοιες εργασίες τη δημιουργία προτύπων για την αναγνώριση διάφορων αντικειμένων ανεξάρτητα από τα χαρακτηριστικά τους, την ανάλυση δεδομένων για μία κατάσταση και την ανάπτυξη συγκεκριμένης στρατηγικής, την πρόβλεψη τιμών και την ομαδοποίηση αντικειμένων που έχουν το ίδιο σημείο αναφοράς (Γεωργούλη, 2015). Οι άνθρωποι χρησιμοποιούν τη μάθηση σε όλη τη διάρκεια της ζωής τους και η διαδικασία αναγνώρισης των διάφορων αντικειμένων, γραμμάτων, συμβόλων κλπ γίνεται αυτοματοποιημένα λόγω της νοημοσύνης τους. Ωστόσο, είναι εύκολα αντιληπτό πως η διαδικασία αυτή για έναν υπολογιστή λειτουργεί τελείως διαφορετικά. Η μηχανική μάθηση είναι ένας κλάδος της τεχνητής νοημοσύνης με σκοπό τη δημιουργία αλγορίθμων, οι οποίοι θα συμβάλλουν στη βελτίωση των επιδόσεων ενός συστήματος όταν αυτό καλείται να αντιμετωπίσει κάποιο πρόβλημα. Για τη διαδικασία της εκπαίδευσης αυτών των αλγορίθμων απαιτείται ένας μεγάλος αριθμός δεδομένων με παραδείγματα, ούτως ώστε να μαθαίνουν από αυτά και μετά από αρκετές φορές που επαναλαμβάνεται η μελέτη τους, η βελτίωση να φτάνει σε ένα ικανοποιητικό επίπεδο. Συνοψίζοντας, η μηχανική μάθηση στοχεύει στην εξαγωγή σωστών κάθε φορά συμπερασμάτων από ένα σύστημα όσον αφορά δεδομένα με τα οποία έρχεται αντιμέτωπα για πρώτη φορά (Διαμαντάρας, 2019).

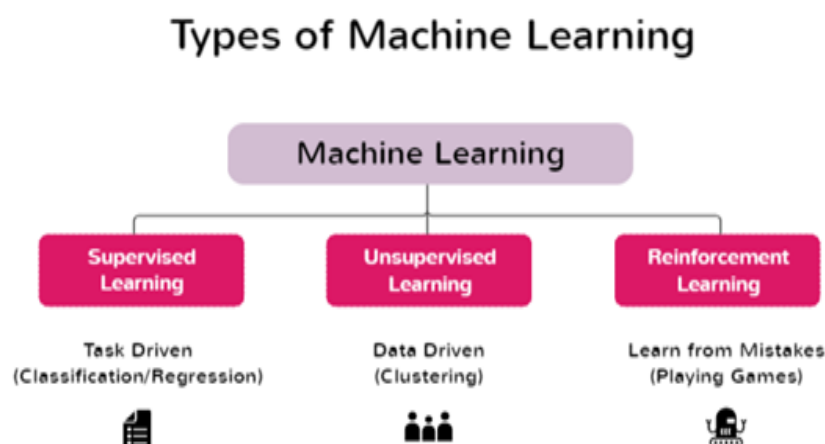
2.2 Η Μηχανική Μάθηση στον τομέα της υγείας

Εκτός των άλλων, ίσως ο σημαντικότερος τομέας στον οποίο συνεισφέρει η μηχανική μάθηση είναι αυτός της υγείας. Η ανάπτυξή της έχει βοηθήσει σε μεγάλο βαθμό στην πρόβλεψη και τον εντοπισμό προβλημάτων υγείας. Αν και ο σκεπτικισμός και η καχυποψία, όσον

αφορά την εφαρμογή της μηχανικής μάθησης για την εξαγωγή συμπερασμάτων, παραμένουν από μεγάλη μερίδα του πληθυσμού, η διάδοση αυτών των πρακτικών γίνεται με διαρκώς αυξανόμενο ρυθμό. Η χρησιμοποίησή της μπορεί, αφενός, να έχει επιφέρει μεγάλες και καινοτόμες αλλαγές στην ιατρική, αφετέρου, όμως, σε καμία περίπτωση δεν αντικαθιστά το ρόλο ενός γιατρού (Cleorhas TJ, 2013). Η λειτουργία της είναι κυρίως υποστηρικτική σε αυτό το έργο, έτσι ώστε να αποφορτίσει την καθημερινότητα των γιατρών, να προσδώσει ακρίβεια στις προβλέψεις καθώς και μεγαλύτερη ποιότητα και αποτελεσματικότητα στην περίθαλψη. Για να γίνει πιο ακριβές το μέγεθος της υποστήριξης που παρέχει είναι το γεγονός ότι δίνει τη δυνατότητα ανάλυσης εικόνων (ακτινογραφίες, μαγνητικές και αξονικές τομογραφίες κλπ) με σκοπό την ανίχνευση, την πρόβλεψη ή ακόμα και την αντιμετώπιση μιας συγκεκριμένης ασθένειας με τη βοήθεια ρομπότ (Cleorhas TJ, 2013). Εκτός αυτού, τα μοντέλα που δημιουργούνται μέσω της μάθησης χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη μιας ασθένειας βάσει των δεδομένων που υπάρχουν για έναν ασθενή. Τα δεδομένα αυτά, πέραν των εικόνων που αναφέρθηκαν, μπορεί να έχουν προκύψει από ηλεκτρικά σήματα όπως ηλεκτροκαρδιογραφήματα (ECG) και ηλεκτροεγκεφαλογραφήματα (EEG), αλλά και από απλούστερα χαρακτηριστικά όπως αιματολογικούς δείκτες, φύλο κλπ. Η εφαρμογή όλων αυτών των δεδομένων μπορεί να γίνει και μεμονωμένα καθώς και συνδυαστικά (Cleorhas TJ, 2013). Επιπλέον, σε ιατρικούς οργανισμούς με μεγάλο όγκο δεδομένων, εφαρμόζεται για την καλύτερη οργάνωση των ηλεκτρονικών αρχείων. Δεν πρέπει να παραλειφθεί το γεγονός ότι η μηχανική μάθηση συμμετέχει και σε βιολογικά προβλήματα. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται για προβλήματα σήμανσης και ανίχνευσης γονιδίων σε αλυσίδες DNA, στην πρόβλεψη ασθενειών με βάση τη γονιδιακή έκφραση στο RNA και πολλά ακόμα (Cleorhas TJ, 2013). Φαίνεται, λοιπόν, πως η μηχανική μάθηση στον κλάδο της υγείας είναι αν μη τι άλλο ιδιαίτερα χρήσιμη και μπορεί να γίνει ένας σημαντικός παράγοντας αναδόμησης και εξέλιξης της επιστήμης της ιατρικής στο άμεσο μέλλον.

2.3 Μάθηση με Επίβλεψη

Οι τύποι στους οποίους διακρίνεται η μηχανική μάθηση είναι τρεις: η μάθηση με επίβλεψη, η μάθηση χωρίς επίβλεψη και η μάθηση με ενίσχυση (Γεωργούλη, 2015) (Εικόνα 1).



Εικόνα 1. Τύποι Μηχανικής Μάθησης

(Πηγή: <https://mindthegraph.com/blog/el/machine-learning-in-science/>)

Μάθηση με επίβλεψη (Supervised Learning): Στη μάθηση με επίβλεψη ή αλλιώς εποπτευόμενη μάθηση, ο επιβλέπων δεν είναι κάποιο άτομο, αλλά η γνώση που έχουμε ότι για μια δεδομένη τιμή εισόδου (input) θα έχουμε μια συγκεκριμένη τιμή εξόδου (output) (Κόκκορας, 2020). Η διαδικασία της μάθησης σε ένα απλό μοντέλο μηχανικής μάθησης διακρίνεται σε δύο στάδια, αυτά της εκπαίδευσης και του ελέγχου. Όσον αφορά το πρώτο στάδιο, δείγματα στα δεδομένα εκπαίδευσης χρησιμοποιούνται ως είσοδοι από όπου εκπαιδεύονται από τον αλγόριθμο μάθησης και δημιουργούν το μοντέλο μάθησης. Στο δεύτερο στάδιο, το μοντέλο μάθησης χρησιμοποιεί τη μηχανή εκτέλεσης για να κάνει την πρόβλεψη των δεδομένων ελέγχου. Τα επισημασμένα δεδομένα είναι η έξοδος του μοντέλου το οποίο κάνει και την τελική του πρόβλεψη (Jiang, Gradus, Rosellini, 2020).

Επιπλέον, η μάθηση με επίβλεψη είναι η πιο συνηθισμένη τεχνική για προβλήματα ταξινόμησης, δεδομένου πως στόχος της είναι να κάνει τη μηχανή να μάθει ένα σύστημα ταξινόμησης που έχουμε δημιουργήσει. Το βασικότερο μέλημά της είναι η κατασκευή ενός ικανού εκτιμητή που θα βρίσκεται σε θέση να προβλέπει την τιμή μιας ετικέτας η οποία προέρχεται από το σύνολο των χαρακτηριστικών. Εν συνεχεία, ο αλγόριθμος μάθησης δέχεται ως εισόδους, συνοδευόμενες από τις κατάλληλες εξόδους, ένα σύνολο χαρακτηριστικών και η διαδικασία της μάθησης πραγματοποιείται μέσω της σύγκρισής τους με τις πραγματικές εξόδους, ούτως ώστε να βρεθούν σφάλματα. Ακολούθως, τροποποιεί το μοντέλο αναλόγως. Αυτό που δημιουργείται, είναι ουσιαστικά αχρείαστο εφόσον οι εισοδοί είναι διαθέσιμες, αλλά αν απουσιάζουν κάποιες από τις τιμές εισόδου, είναι αδύνατο να εξαχθεί οποιοδήποτε συμπέρασμα σχετικά με τις εισόδους (Jiang, Gradus, Rosellini, 2020).

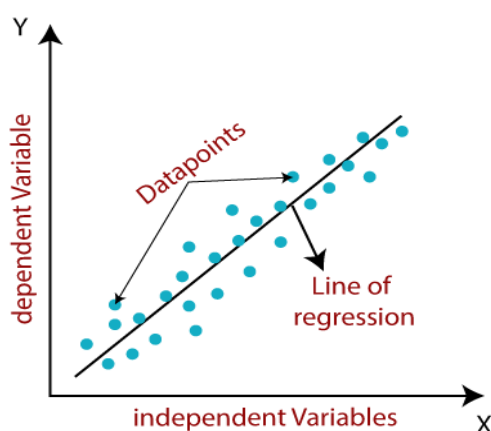
Επιπρόσθετα, η μάθηση με επίβλεψη αποτελεί την πιο διαδεδομένη μέθοδο για την εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων και δέντρων απόφασης. Αμφότερα εξαρτώνται από τις πληροφορίες οι οποίες δίνονται μέσω της προκαθορισμένης ταξινόμησης. Ακόμα, η χρησιμοποίηση της εποπτευόμενης μάθησης συμβαίνει και σε εφαρμογές που τα ιστορικά δεδομένα συμβάλλουν στην πρόβλεψη μελλοντικών συμβάντων. Χαρακτηριστικό είναι το παράδειγμα ενός πελάτη μιας τράπεζας, ο οποίος αιτείται δανείου και η συγκεκριμένη πρόβλεψη γίνεται βάσει των δεδομένων παλαιότερων πελατών (Jiang, Gradus, Rosellini, 2020).

2.4 Αλγόριθμοι της μάθησης με επίβλεψη

Οι εργασίες που εκτελούνται με την εποπτευόμενη μάθηση μπορούμε να πούμε ότι διακρίνονται σε δύο κατηγορίες, την παλινδρόμηση (regression) και την ταξινόμηση (classification). Στην πρώτη περίπτωση, η ετικέτα είναι συνεχής, ενώ στη δεύτερη περίπτωση είναι διακριτή. Ο αλγόριθμος διακρίνει τα δεδομένα εκπαίδευσης και στη συνέχεια

δημιουργεί το μοντέλο πρόβλεψης. Μετά την εκπαίδευσή του, το μοντέλο που έχει προκύψει προσπαθεί να προβλέψει τις ετικέτες σε ένα νέο σύνολο δεδομένων. Έτσι, αναλόγως με το είδος της εξόδου, η μάθηση με επίβλεψη κατηγοριοποιείται ως παλινδρόμηση εάν η έξοδος έχει τιμές μεταβαλλόμενης υποδιαστολής και ως ταξινόμηση εάν η έξοδος έχει ως τιμές ακέραιους αριθμούς (Choudhary, Gianey, 2017).

Παλινδρόμηση: Οι αλγόριθμοι που περιλαμβάνονται στην κατηγορία της παλινδρόμησης ποικίλουν. Αρχικά, υπάρχει ο αλγόριθμος της γραμμικής παλινδρόμησης (Linear Regression). Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος προσθέτει τις εισόδους οι οποίες πολλαπλασιάζονται από κάποιες σταθερές ώστε να παραχθεί η έξοδος. Έτσι, δημιουργείται μια συσχέτιση μεταξύ του Y που αναπαριστά μια εξαρτημένη μεταβλητή και του X που αναπαριστά έως και πολλές ανεξάρτητες μεταβλητές. Η μαθηματική σχέση που εκφράζει την παραπάνω συσχέτιση, ορίζεται ως: $Y = a + bX$ και σχηματίζει μία ευθεία γραμμή στην αρχή των αξόνων (Trehan, 2020) (Εικόνα 2).



Εικόνα 2. Διαγραμματική απεικόνιση της γραμμικής παλινδρόμησης
(Πηγή: <https://pub.towardsai.net/linear-regression-explained-f5cc85ae2c5c>)

Επιπρόσθετα, ένας άλλος αλγόριθμος που ανήκει στην κατηγορία της παλινδρόμησης είναι ο SVR (Support Vector Machine). Αρχικά, δημιουργεί ένα χώρο γύρω από τη συνάρτηση που επιδιώκει να βελτιστοποιήσει που ονομάζεται σωλήνας. Ο σκοπός του είναι να

βρεθεί ο σωλήνας που προσεγγίζει καλύτερα τη συνάρτηση με συνεχούς τιμές, ελαχιστοποιώντας, έτσι, το σφάλμα πρόβλεψης, δηλαδή τη διαφορά μεταξύ της προβλεπόμενης και της πραγματικής τιμής στόχου. Χρησιμοποιεί την ϵ -insensitive loss function για την επιβολή ποινών σε προβλέψεις που αποκλίνουν περισσότερο από το ϵ από την επιθυμητή έξοδο. Η τιμή του ϵ , καθορίζει το πλάτος του σωλήνα, δηλαδή την περιοχή μέσα στην οποία το σφάλμα πρόβλεψης θεωρείται αποδεκτό και δεν επιβάλλεται ποινή. Εντός αυτού του σωλήνα, οι προβλέψεις που είναι εντός του εύρους ϵ δεν τιμωρούνται, επιτρέποντας ευελιξία στις προβλέψεις. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν διαφορετικές συναρτήσεις, όπως γραμμικές ή τετραγωνικές. Σε γενικές γραμμές, επιχειρείται η εύρεση ισορροπίας μεταξύ του μεγέθους του σωλήνα και της ακρίβειας της πρόβλεψης (MathWorks, n.d.).

Επιπλέον, ένας πολύ δημοφιλής αλγόριθμος ο οποίος συμμετέχει στη λύση προβλημάτων παλινδρόμησης είναι το δέντρο απόφασης παλινδρόμησης (Decision Tree Regression). Αυτή η μέθοδος παλινδρόμησης διασπάει το δοθέν σύνολο δεδομένων σε υποσύνολα και το δέντρο αναπτύσσεται σταδιακά με επαναληπτικό τρόπο. Οι κόμβοι του δέντρου είναι τα χαρακτηριστικά του συνόλου δεδομένων και το κλαδί ενός κόμβου ισοδυναμεί με μία από τις πιθανές τιμές του χαρακτηριστικού αυτού. Το δέντρο ξεκινά από τη λεγόμενη ρίζα του, η οποία είναι ο πρώτος κόμβος με λίγα λόγια, επιλέγοντας την ιδιότητα με το μεγαλύτερο κέρδος πληροφορία, αυτή, δηλαδή, η οποία επιτρέπει τον καλύτερο διαχωρισμό των δεδομένων και μειώνει την αβεβαιότητα (Choudhary, Gianey, 2017) (Εικόνα 3).

Ένας από τους πιο δημοφιλείς αλγορίθμους που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή των δέντρων απόφασης είναι ο ID3 (Iterative Dichotomiser 3). Ο αλγόριθμος αυτός χρησιμοποιεί τη μέθοδο της Μείωσης Τυπικής Απόκλισης (SDR) για την κατασκευή του δέντρου. Η μέθοδος SDR χρησιμοποιεί τα εξής βήματα (Choudhary, Gianey, 2017):

α) Πρώτον, υπολογίζεται η τυπική απόκλιση του στόχου (Choudhary, Gianey, 2017).

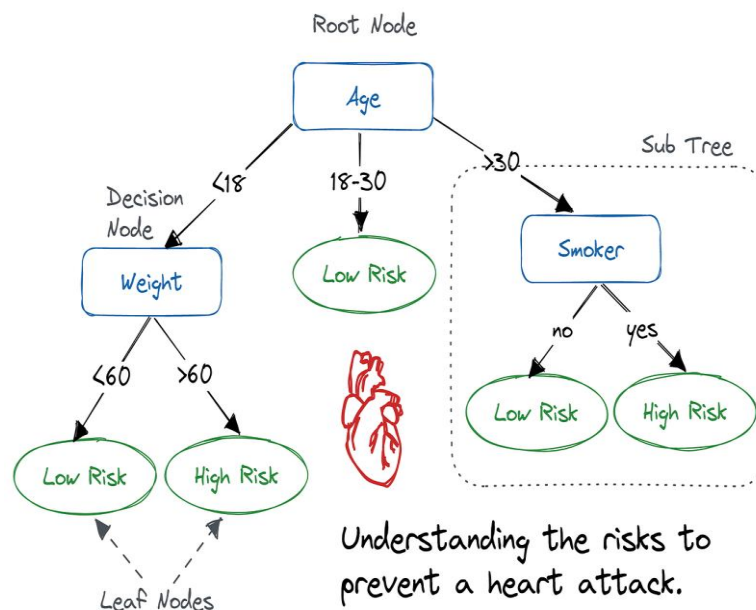
β) Έπειτα, διαχωρίζεται το σύνολο δεδομένων με βάση τα διάφορα χαρακτηριστικά. Η προκύπτουσα τυπική απόκλιση για κάθε κλάδο αφαιρείται από την τυπική απόκλιση πριν τον διαχωρισμό. Αυτή είναι η Μείωση Τυπικής Απόκλισης (SDR) και ο μαθηματικός τύπος της έχει ως εξής (Choudhary, Gianey, 2017):

$$SDR(T, X) = S(T) - S(T, X)$$

γ) Στο επόμενο βήμα, το χαρακτηριστικό που έχει τη μεγαλύτερη SDR επιλέγεται ως ο κόμβος αποφάσεων (Choudhary, Gianey, 2017).

δ) Το σύνολο δεδομένων πρέπει να διαιρεθεί με βάση τις τιμές των επιλεγμένων χαρακτηριστικών. Ένας κλάδος εξακολουθεί να διαχωρίζεται εάν η τυπική απόκλιση είναι μεγαλύτερη από μηδέν (Choudhary, Gianey, 2017).

ε) Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με αναδρομή μέχρι να επεξεργαστούν όλα τα δεδομένα (Choudhary, Gianey, 2017).



Εικόνα 3. Παράδειγμα δέντρου απόφασης

(Πηγή: <https://medium.com/@shrutimisra/interpretable-ai-decision-trees-f9698e94ef9b>)

Επίσης, ένας αρκετά γνωστός αλγόριθμος που συμμετέχει στην επίλυση προβλημάτων παλινδρόμησης είναι και ο Random Forest Regression. Σε αντίθεση με το κανονικό δέντρο απόφασης, ο Random Forest χωρίζει κάθε κόμβο χρησιμοποιώντας τη μεταβλητή που μπορεί να προβλέψει καλύτερα μέσα από ένα τυχαία επιλεγμένο υποσύνολο. Πρακτικά είναι ένας εύκολος αλγόριθμος, καθώς έχει λίγες παραμέτρους να επεξεργαστεί, τον αριθμό των δέντρων στο δάσος και τις μεταβλητές σε κάθε κόμβο του τυχαίου υποσυνόλου. Τα βήματα του αλγορίθμου είναι τα παρακάτω (Choudhary, Gianey, 2017):

α) Με βάση τα πραγματικά δεδομένα, επιλέγονται nt (ο αριθμός των δέντρων που θα δημιουργηθούν στο δάσος των τυχαίων δέντρων) δείγματα bootstrap, ώστε να μειωθεί η υπερπροσαρμογή στα δεδομένα εκπαίδευσης (Choudhary, Gianey, 2017).

β) Για κάθε δείγμα bootstrap, πρέπει να αναπτυχθεί ένα δέντρο παλινδρόμησης με κάποιες τροποποιήσεις: σε κάθε κόμβο, επιλέγονται τυχαία mt μεταβλητές πρόβλεψης (αριθμός μεταβλητών πρόβλεψης) και επιλέγεται ο καλύτερος διαχωρισμός ανάμεσα στις μεταβλητές (Choudhary, Gianey, 2017).

γ) Εκτιμώνται τα νέα δεδομένα συσσωρεύοντας τις προβλέψεις των nt δέντρων (με το μέσο όρο των προβλέψεων από όλα τα δέντρα) (Choudhary, Gianey, 2017).

Τέλος, η παλινδρόμηση LASSO μπορεί να συγκαταλεχθεί ως ένας επιπλέον αλγόριθμος για την επίλυση προβλημάτων παλινδρόμησης. Το LASSO είναι συντομογραφία του "Least Absolute Shrinkage and Selection Operator" (Λειτουργία Ελαχιστοποίησης Απόλυτης Συρρίκνωσης και Επιλογής). Λειτουργεί συρρικνώνοντας κάποιους συντελεστές και ορίζοντας άλλους ως μηδέν, διατηρώντας έτσι τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της επιλογής υποσυνόλων. Επίσης, μπορεί να μειώσει τη μεταβλητότητα και να βελτιώσει την ακρίβεια των προβλέψεων σε γραμμικά μοντέλα. Παράλληλα, εφαρμόζει μια "ποινή" στο μέγεθος των συντελεστών παλινδρόμησης, περιορίζοντας τους μεγάλους συντελεστές και βοηθώντας στη δημιουργία πιο απλών και σταθερών μοντέλων. Αυτή η παλινδρόμηση χρησιμοποιεί απόλυτες

τιμές στη συνάρτηση ποινής, αντί για τετράγωνο, γεγονός που οδηγεί στο να είναι ορισμένες από τις προβλέψεις των παραμέτρων ακριβώς μηδενικές (Choudhary, Gianey, 2017). Συνάρτηση κόστους (loss function) (Εικόνα 4):

$$\sum_{i=1}^N \left\{ y_i - \sum_{j=0}^M w_j x_{ij} \right\}^2 + \lambda \sum_{j=0}^M |w_j|$$

Εικόνα 4. Συνάρτηση κόστους

(Πηγή: <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/8320256>)

Ταξινόμηση: Όσον αφορά τον τομέα της ταξινόμησης, είναι και σε αυτή την περίπτωση αρκετοί οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται για προβλήματα ταξινόμησης. Αρχικά, συναντούμε τη λογιστική παλινδρόμηση. Παρά την αντιφατική του ονομασία, είναι ένας αξιόπιστος αλγόριθμος επίλυσης προβλημάτων δυαδικής ταξινόμησης. Χρησιμοποιείται, δηλαδή, για να προβλέψει την πιθανότητα ενός αποτελέσματος που μπορεί να έχει μόνο δύο τιμές, με γνώμονα τη λογιστική συνάρτηση S. Η συνάρτηση αυτή παίρνει οποιονδήποτε πραγματικό αριθμό και τον μετατρέπει σε μια τιμή μεταξύ 0 και 1, χωρίς όμως ποτέ να φτάνει ακριβώς στο 0 ή στο 1 (Choudhary, Gianey, 2017).

Στη συνέχεια, έχουμε έναν από τους πιο δημοφιλείς αλγορίθμους εν ονόματι KNN (K Nearest Neighbors). Πρόκειται για έναν απλό και γρήγορο αλγόριθμο που αποθηκεύει τα διαθέσιμα δεδομένα και κατηγοριοποιεί νέες περιπτώσεις με βάση την ομοιότητα, όπως αυτή μετριέται μέσω μιας συνάρτησης απόστασης. Ένα αντικείμενο κατηγοριοποιείται βάσει της πλειοψηφίας των γειτόνων του και το έπειτα εντάσσεται στην τάξη που έχει τη μεγαλύτερη ομοιότητα με τους K πλησιέστερους γείτονες. Οι πιο γνωστές συναρτήσεις απόστασης είναι η Ευκλείδεια και η Μανχάταν (Choudhary, Gianey, 2017).

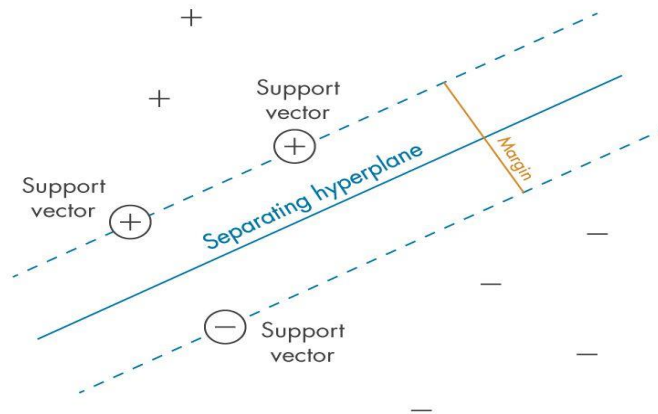
Επιπρόσθετα, ο αλγόριθμος Naïve Bayes, ο οποίος βασίζεται στο μοντέλο πιθανοτήτων του θεωρήματος Bayes, είναι ένας εύκολος και πρακτικός αλγόριθμος που δεν απαιτεί σύνθετη επαναληπτική εκτίμηση

παραμέτρων και αυτό τον καθιστά κατάλληλο για μεγάλα σύνολα δεδομένων. Η τιμή ενός χαρακτηριστικού λογίζεται ως ανεξάρτητη από την τιμή οποιουδήποτε άλλου χαρακτηριστικού, δεδομένης της κλάσης στην οποία ανήκουν τα δεδομένα. Έτσι, μπορούμε να υπολογίσουμε την εκ των υστέρων πιθανότητα $P(A|B)$, που είναι η πιθανότητα να συμβεί το γεγονός A , δεδομένου ότι έχει συμβεί το γεγονός B . Έχουμε: $P(A|B) = (P(B|A) P(A)) / P(B)$ (Choudhary, Gianey, 2017).

Επιπλέον, έχουμε τον αλγόριθμο SVM (Support Vector Machines). Ο ρόλος του είναι να μεγιστοποιεί το περιθώριο μεταξύ των δεδομένων εκπαίδευσης και του ορίου απόφασης. Για να γίνει πιο σαφές, χρησιμοποιεί τη μέθοδο του υπερεπίπεδου διαχωρισμού, καθώς βρίσκει το μέγιστο περιθώριο διαχωρισμού που ταξινομεί σωστά τα δεδομένα εκπαίδευσης και το καλύτερο υπερεπίπεδο αναπαρίσταται από τα διανύσματα υποστήριξης (Εικόνα 5). Από τα βασικότερα χαρακτηριστικά του SVM είναι η χρήση του κόλπου πυρήνα (kernel trick). Δεν αποτελεί σπάνιο φαινόμενο ο γραμμικός διαχωρισμός των δεδομένων αρχικά, με αποτέλεσμα τα δεδομένα, εν τέλει, να τοποθετούνται σε χώρο υψηλότερης διάστασης, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση πυρήνα ϕ . με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται η καλύτερη δυνατή διάκριση των κλάσεων στον χώρο. Έστω ότι έχουμε ένα σύνολο δεδομένων $D = \{(x^m, y^m)\}_{m=1}^M$, με $x^m \in \mathbb{R}^n$, $y^m \in \{-1, 1\}$, ένας SVM ικανοποιεί τις ανισότητες: α) $w^T \phi(x^m) + b \geq 1$, αν $y^m = +1$

$$\beta) w^T \phi(x^m) + b \leq -1, \text{ αν } y^m = -1$$

και όπου ϕ είναι η συνάρτηση πυρήνα. Αλλάζοντας τον πυρήνα, δίνεται η δυνατότητα και της δημιουργίας νέων μοντέλων (MathWorks, n.d.).



Εικόνα 5. Αναπαράσταση του αλγορίθμου SVM

(Πηγή: <https://www.mathworks.com/discovery/support-vector-machine.html>)

Εν συνεχεία, στην ταξινόμηση με δέντρα απόφασης, ο αλγόριθμος ID3 χρησιμοποιεί την εντροπία και το κέρδος πληροφορίας (information gain) για τη δημιουργία του δέντρου. Με την εντροπία μετράται η ομοιογένειά του. Αν η τιμή της είναι μηδέν, το δείγμα είναι εντελώς ομοιογενές, δηλαδή αποτελείται από τις ίδιες κλάσεις. Αν, όμως, είναι υψηλή, το δείγμα σημαίνει ότι είναι ετερογενές, ενώ στην αντίθετη περίπτωση είναι ομοιογενές. Με τον ID3 επιλέγεται ο διαχωρισμός των δεδομένων που μειώνει την εντροπία και αυξάνει το κέρδος πληροφορίας (Choudhary, Gianey, 2017).

Ακόμα, υπάρχει ο αλγόριθμος One Rule, ο οποίος είναι αρκετά απλός και αποτελεσματικός. Αρχικά, δημιουργεί έναν κανόνα για κάθε χαρακτηριστικό των δεδομένων και στη συνέχεια επιλέγεται αυτός που έχει το μικρότερο συνολικό σφάλμα. Για να δημιουργηθεί ένας τέτοιος κανόνας, πρέπει να κατασκευαστεί ένας πίνακας συχνοτήτων για κάθε χαρακτηριστικό σε σχέση με τις τιμές-στόχους (Choudhary, Gianey, 2017).

Τέλος, συναντούμε τον Zero Rule, έναν αλγόριθμο απλό, ο οποίος στηρίζεται στις τιμές στόχου, παραβλέποντας τα χαρακτηριστικά πρόβλεψης. Με λίγα λόγια, προβλέπει την κατηγορία που εμφανίζεται συχνότερα (Choudhary, Gianey, 2017).

2.5 Κριτήρια επίδοσης της ταξινόμησης

Η αξιολόγηση των μοντέλων που παράγονται κατά τη διάρκεια της ταξινόμησης αποτελεί μια πολύ σημαντική διαδικασία. Είναι αρκετά σύνηθες να παρουσιάζονται προβλήματα ταξινόμησης δύο κλάσεων. Για το λόγο αυτό, η αξιολόγηση της επίδοσης ενός ταξινομητή, με δεδομένο ένα σύνολο προτύπων, πραγματοποιείται με τη βοήθεια του πίνακα σύγχυσης (confusion matrix) (Εικόνα 6). Ο πίνακας αυτός απεικονίζει τον αριθμό των προβλέψεων για κάθε κατηγορία, δείχνοντας τα σωστά και τα λάθος αποτελέσματα ταξινόμησης, ενώ συνήθως είναι διαστάσεων 2x2 για δυαδικά προβλήματα, ωστόσο μπορεί να είναι μεγαλύτερος για πολυκατηγορικά προβλήματα. Σε αυτή την περίπτωση γίνεται NxN διαστάσεων, με το N να απεικονίζει των αριθμών των κατηγοριών (Choudhary, Gianey, 2017).

		Actual Values	
		Positive (1)	Negative (0)
Predicted Values	Positive (1)	TP	FP
	Negative (0)	FN	TN

Εικόνα 6. Πίνακας Σύγχυσης

(Πηγή: <https://towardsdatascience.com/understanding-confusion-matrix-a9ad42dcfd62>)

Από τον πίνακα σύγχυσης είναι δυνατό να εξαχθούν πολλές και σημαντικές πληροφορίες βάσει αρκετών μετρικών που μπορούν να υπολογιστούν.

Αρχικά, μπορεί να υπολογιστεί η ακρίβεια του μοντέλου, δηλαδή το ποσοστό των σωστών προβλέψεων. $Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$ (Διαμαντάρας, 2019)

Επίσης, υπάρχει η μετρική της ευστοχίας, η οποία δείχνει το ποσοστό των σωστών θετικών προβλέψεων επί του συνόλου των προβλέψεων θετικών παραδειγμάτων.

$$Precision = \frac{TP}{TP+FP} \text{ (Διαμαντάρας, 2019)}$$

Επιπλέον, με τη μετρική της ανάκλησης ή ευαισθησίας, υπάρχει η δυνατότητα να βρεθεί το ποσοστό των σωστών θετικών προβλέψεων επί των πραγματικών θετικών παραδειγμάτων.

$$Recall \text{ (Sensitivity)} = \frac{TP}{TP+FN} \text{ (Διαμαντάρας, 2019)}$$

Μια ακόμα μετρική θεωρείται και η ειδικότητα, η οποία συμβάλλει στην εύρεση του ποσοστού των σωστών αρνητικών προβλέψεων επί των πραγματικών αρνητικών παραδειγμάτων.

$$Specificity = \frac{TN}{TN+FP} \text{ (Διαμαντάρας, 2019)}$$

Τέλος, το F1-score χρησιμοποιείται για να συνοδεύει όποτε αυτό απαιτείται τα Precision και Recall, προσδίδοντας ένα είδος ισορροπίας ανάμεσά τους.

$$F1\text{-score} = \frac{Precision + Recall}{(Precision + Recall)/2} \text{ (Διαμαντάρας, 2019)}$$

2.6 Μάθηση χωρίς Επίβλεψη

Μάθηση χωρίς επίβλεψη: Η μάθηση χωρίς επίβλεψη ή αλλιώς μη εποπτευόμενη μάθηση, έχει ως στόχο την ανακάλυψη συσχετίσεων και ομάδων που προκύπτουν από τα δεδομένα, βάσει των ιδιοτήτων τους, καθώς είναι δεδομένα χωρίς ετικέτα. Εν αντιθέσει με την επιβλεπόμενη μάθηση, το συγκεκριμένο είδος μάθησης σκοπεύει στη δημιουργία προτύπων, τα οποία συμβάλλουν στην αποκάλυψη της δομής και της σχέσης των δεδομένων (Naeem, Ali, Anam, Ahmed, 2023).

2.7 Τεχνικές και αλγόριθμοι μάθησης χωρίς επίβλεψη

Για αυτό το είδος μάθησης, υπάρχουν οι τεχνικές της ομαδοποίησης, των κανόνων συσχέτισης, της ανίχνευσης ανωμαλιών και των αυτόματων κωδικοποιητών. Καθεμία από τις τεχνικές αυτές, επιτελεί έναν συγκεκριμένο ρόλο στην ανάλυση δεδομένων και μπορεί να συνδυαστεί για να προσφέρει ακόμα πιο βαθιές γνώσεις στο σύστημα.

Ομαδοποίηση (Clustering): Η ομαδοποίηση είναι η διαδικασία κατά την οποία τα δεδομένα χωρίζονται σε ομάδες (clusters), έτσι ώστε τα στοιχεία που βρίσκονται εντός της ίδια ομάδας να είναι μεταξύ τους περισσότερο όμοια σε σύγκριση με στοιχεία άλλων ομάδων. Για την τεχνική της ομαδοποίησης, υπάρχουν τρεις κατηγορίες στις οποίες μπορεί να χωριστεί ανάλογα με το πώς λειτουργούν. Οι κατηγορίες αυτές είναι η αποκλειστική ομαδοποίηση (exclusive clustering), η ιεραρχική ομαδοποίηση (hierarchical clustering) και η επικαλυπτόμενη ομαδοποίηση (overlapping clustering) (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Στην κατηγορία της αποκλειστικής ομαδοποίησης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο αλγόριθμος K-means. Ξεκινώντας, επιλέγει K τυχαία σημεία από τα δεδομένα για τη δημιουργία των κέντρων των ομάδων. Το K δείχνει τον αριθμό των clusters και καθορίζεται πριν την εκτέλεση του αλγορίθμου. Στη συνέχεια, αναθέτει σε κάθε σημείο στην ομάδα της οποίας το κέντρο είναι πιο κοντά στο σημείο αυτό. Έπειτα, υπολογίζει για κάθε ομάδα το μέσο όρο όλων των σημείων της και ορίζει αυτό ως νέο κέντρο. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για ένα προκαθορισμένο αριθμό βημάτων ή μέχρι να μην υπάρχει αλλαγή στο διαχωρισμό των σημείων σε ομάδες. Επίσης, είναι γνωστό ότι όσο μεγαλύτερες τιμές παίρνει το K, τόσο μικρότερες θα είναι οι ομάδες που δημιουργούνται και με μεγαλύτερη πληροφορία, ενώ φυσικά και όσο μικρότερη είναι η τιμή του K, τόσο μεγαλύτερες θα είναι οι ομάδες (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Στην κατηγορία της ιεραρχικής ομαδοποίησης, ο στόχος σχετίζεται με τη δημιουργία μιας ιεραρχίας από ομάδες και διαχωρίζεται σε συγκεντρωτική και διαιρετική. Στην πρώτη περίπτωση, χρησιμοποιείται μια τεχνική bottom-up, δηλαδή κάθε σημείο των δεδομένων μπορεί να θεωρηθεί ως ξεχωριστή ομάδα και στη συνέχεια συγχωνεύονται οι μικρές ομάδες σε μεγαλύτερες, έως ότου τελικά καταλήξουμε σε μια ενιαία ομάδα. Η απόσταση των ομάδων μπορεί να υπολογιστεί με διάφορες μεθόδους (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023):

- Single linkage: η μικρότερη απόσταση μεταξύ δύο ομάδων
- Complete linkage: η μεγαλύτερη απόσταση μεταξύ δύο ομάδων
- Ward's linkage: η απόσταση δύο ομάδων ορίζεται από την αύξηση του τετραγωνικού αθροίσματος μετά τη συγχώνευση των ομάδων
- Average linkage: ο μέσος όρος της απόστασης ανάμεσα σε δύο σημεία διαφορετικών ομάδων

Αντιθέτως, η διαιρετική ομαδοποίηση ξεκινάει από μια ενιαία ομάδα και έπειτα τη διαιρεί σε μικρότερες ομάδες.

Όσον αφορά την επικαλυπτόμενη ομαδοποίηση, δίνει τη δυνατότητα σε ένα σημείο να ανήκει ταυτόχρονα σε περισσότερες από μία ομάδες και χρησιμεύει κυρίως για δεδομένα των οποίων η ένταξη σε μια συγκεκριμένη ομάδα δεν είναι σαφής. Ορισμένοι γνωστοί αλγόριθμοι που ανήκουν σε αυτό το είδος ομαδοποίησης είναι ο Fuzzy C-Means, ο Soft K-Means και ο COOLCAT (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Κανόνες Συσχέτισης (Association Rules): Στη συγκεκριμένη μέθοδο, ο σκοπός είναι η εύρεση συσχετίσεων μεταξύ μεταβλητών σε ένα μεγάλο σύνολο δεδομένων. Με λίγα λόγια, στόχος είναι ο εντοπισμός του τρόπου με τον οποίο οι υπάρχουσες μεταβλητές συνδέονται μεταξύ τους. Για παράδειγμα, ένας άνθρωπος που αγοράζει ένα προϊόν Χ είναι πιθανό να αγοράσει και το προϊόν Υ. Είναι σημαντικό να τονιστεί, επίσης, πως σε αντίθεση με άλλες μεθόδους, μπορεί να κάνει αποδεκτά και μη αριθμητικά δεδομένα. Για τον εντοπισμό των συσχετίσεων που μπορούν να προκύψουν, υπάρχουν δύο συγκεκριμένες μετρικές, οι λεγόμενες ως support και confidence. Η πρώτη αναφέρεται στη συχνότητα με την οποία εμφανίζεται ένας συνδυασμός δεδομένων, ενώ

η δεύτερη έχει να κάνει με την πιθανότητα ένα δεδομένο να συνδέεται με ένα άλλο (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Ο πιο γνωστός αλγόριθμος που ανήκει σε αυτή την κατηγορία είναι ο Apriori. Ο αλγόριθμος αυτός αναπτύχθηκε για την εξόρυξη δεδομένων και χρησιμοποιείται για τον εντοπισμό συνόλων αντικειμένων που μπορούν να συνδυαστούν, όπως δύο προϊόντα. Για αρχή, υπολογίζει τη μετρική support των συνόλων αντικειμένων και επιλέγεται το ελάχιστο όριο αυτής της μετρικής. Έπειτα, διαλέγονται εκείνα τα σύνολα τα οποία έχουν μεγαλύτερη ή ίση τιμή support από το καθορισμένο ελάχιστο όριο. Ακολούθως, επιλέγεται ένα ελάχιστο όριο για τη μετρική confidence και βρίσκει τους κανόνες συσχέτισης που έχουν τιμή confidence μεγαλύτερη από το ελάχιστο όριο που έχει καθοριστεί. Τέλος, οι κανόνες που προκύπτουν ταξινομούνται βάσει του δείκτη lift, για να φανεί η σημασία των σχέσεων που έχουν δημιουργηθεί. Γενικά, μπορεί να ειπωθεί πως πρόκειται για έναν σχετικά απλό και εύκολα εφαρμόσιμο αλγόριθμο, ο οποίος μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε μεγάλα σύνολα δεδομένων. Ωστόσο, σε σύγκριση με άλλους αλγορίθμους, η εφαρμογή του σε μεγάλα σύνολα δεδομένων ενδέχεται να παρουσιάσει καθυστερήσει λόγω του συνεχούς ελέγχου στη βάση δεδομένων. Αυτός, επίσης, μπορεί να είναι και ο λόγος που μπορεί να παρουσιαστεί οποιαδήποτε αλλοίωση της απόδοσής του, καθώς η πολυπλοκότητά του καθορίζεται από τη σχέση $O(2^D)$, με το D να αναλογεί στο μέγεθος της βάσης δεδομένων (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Εντούτοις, υπάρχει και ένας αλγόριθμος που θεωρείται η βελτιωμένη έκδοση του Apriori, ο FP(Frequent Pattern) Growth, καθώς χρησιμοποιεί μια πιο αποτελεσματική δομή δεδομένων που ονομάζεται FP Tree. Πιο αναλυτικά, όπως και ο Apriori, έτσι και ο FP Growth σαρώνει τη βάση δεδομένων για να υπολογιστεί η μετρική support για κάθε αντικείμενο, ώστε να βρεθούν τα συχνά αντικείμενα. Στη συνέχεια, δημιουργείται το FP Tree βάσει των συχνών αντικειμένων που βρέθηκαν, με φθίνουσα σειρά συχνότητας, με τα κλαδιά του να αναπαριστούν ένα σύνολο αντικειμένων τα οποία εμφανίζονται μαζί (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

Ανίχνευση ανωμαλιών (Anomaly Detection): Η τεχνική της ανίχνευσης ανωμαλιών χρησιμοποιείται για τον εντοπισμό ακραίων τιμών σε ένα σύνολο δεδομένων. Οι ανωμαλίες αυτές μπορεί να δείχνουν μια παράδοξη δραστηριότητα στο δίκτυο, ελαττωματικό αισθητήρα ή δεδομένα που πρέπει να υποστούν μια διαδικασία εκκαθάρισης πριν αναλυθούν. Ο εντοπισμός των οποιωνδήποτε ανωμαλιών συμβαίνει συνήθως με την απόκλιση των μοντέλων από τα κανονικά πρότυπα. Μπορούν να αναγνωριστούν ή και να προβλεφθούν, ανιχνεύοντας ή προβλέποντας κάποια σημεία δεδομένων που διαφέρουν από το κανονικό μοντέλο (Liu, Ting, Zhou, 2008).

Ο αλγόριθμος Isolation Forest είναι ένας από τους πιο δημοφιλείς και αποτελεσματικούς για την ανίχνευση ανωμαλιών. Σε αντίθεση με άλλους αλγορίθμους, στηρίζεται στο γεγονός ότι οι ανωμαλίες είναι πιο σπάνιες και μπορούν να απομονωθούν σχετικά ευκολότερα από τα κανονικά δεδομένα (Cory Maklin, 2022). Αρχικά, δημιουργεί πολλά δέντρα απόφασης που ονομάζονται δέντρα απομόνωσης (iTrees). Τα δέντρα αυτά δημιουργούνται τυχαία, καθώς τυχαία είναι η επιλογή του χαρακτηριστικού που θα διαχωρίσει τα δεδομένα. Κάθε διαχωρισμός αποφέρει δύο υποσύνολα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι να απομονωθούν τα περισσότερα σημεία σε διαφορετικά υποσύνολα ή μέχρι να φτάσουμε σε ένα προκαθορισμένο βάθος δέντρου. Έπειτα, γίνεται ο υπολογισμός των διαδρομών απομόνωσης. Κάθε σημείο έχει μια διαδρομή που υπάρχει στο δέντρο και υπολογίζεται από τους διαχωρισμούς που απαιτούνται μέχρι να απομονωθεί το συγκεκριμένο σημείο από τα υπόλοιπα. Οι ανωμαλίες απομονώνονται σε μικρότερες διαδρομές, συνήθως, καθώς βρίσκονται σε απόσταση από τα κανονικά δεδομένα. Ο υπολογισμός αυτής της διαδρομής γίνεται από όλα τα δέντρα. Τέλος, για τον υπολογισμό του βαθμού ανωμαλίας, συγκρίνεται η διαδρομή ενός σημείου με έναν προκαθορισμένο αριθμό διαδρομών που έχει θεωρηθεί κανονικός. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι τα δέντρα απομόνωσης μπορούν να δημιουργούν ορισμένα μοντέλα και να αξιοποιούν την υποδειγματοληψία σε βαθμό που δεν είναι εφικτός με άλλες μεθόδους. Με λίγα λόγια δεν είναι απαραίτητο να ολοκληρώνεται πλήρως η ανάπτυξη των δέντρων, έχοντας, έτσι, τη δυνατότητα να εστιάζουν στα σημεία με πιθανές ανωμαλίες. Ο Isolation

Forest αποτελεί έναν, κατά κοινή ομολογία, αρκετά γρήγορο και αποτελεσματικό αλγόριθμο. Παρουσιάζει χαμηλό υπολογιστικό κόστος, αφού αποφεύγει τη χρήση μέτρων απόστασης ή πυκνότητας, αλλά και γραμμική χρονοπλοκότητα με χαμηλό σταθερό όρο και χαμηλές απαιτήσεις μνήμης. Δεν πρέπει να παραλειφθεί, επίσης, το γεγονός ότι είναι ένας ιδιαίτερα αποδοτικός αλγόριθμος όσον αφορά τη διαχείριση πολύ μεγάλων και περίπλοκων συνόλων δεδομένων Liu, Ting, Zhou, 2008).

Αυτόματοι Κωδικοποιητές: Σε αυτή την τεχνική της μάθησης χωρίς επίβλεψη, η λειτουργία είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με τα νευρωνικά δίκτυα και έχει ως στόχο να πραγματοποιήσει μάθηση με αναπαράσταση. Αναλυτικότερα, οι αυτόματοι κωδικοποιητές μαθαίνουν να συμπιέζουν τα δεδομένα εισόδου σε μία αναπαράσταση χαμηλότερης διάστασης και έπειτα να δημιουργούν εκ νέου τα αρχικά δεδομένα από αυτή την αναπαράσταση. Όσον αφορά την αρχιτεκτονική τους, περιέχει ένα σημείο συμφόρησης το οποίο αναγκάζει το δίκτυο να χρησιμοποιήσει μια συμπιεσμένη αναπαράσταση των αρχικών δεδομένων εισόδου. Για να γίνει πιο σαφής η συνολική λειτουργία τους, στην αρχή σχεδιάζεται ένα νευρωνικό δίκτυο έτσι ώστε να φτιαχτεί ένα σημείο συμφόρησης, το οποίο θα αναγκάζει το δίκτυο να χρησιμοποιήσει μια συμπιεσμένη μορφή των δεδομένων εισόδου. Η συμπίεση αυτή και η επακόλουθη ανασύσταση των δεδομένων ενδέχεται να παρουσιάσει δυσκολίες, εφόσον τα χαρακτηριστικά των δεδομένων δεν έχουν σχέση μεταξύ τους. Όμως, αν υπάρχει μια συγκεκριμένη δομή στα δεδομένα, η δομή αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περάσει τα δεδομένα μέσω του σημείου συμφόρησης, το οποίο είναι ένα άκρως σημαντικό στοιχείο του δικτύου (Naeem, Ali, Anam, & Ahmed, 2023).

2.8 Μάθηση με Ενίσχυση

Μάθηση με Ενίσχυση (Reinforcement Learning): Η μάθηση με ενίσχυση είναι ένα διαφορετικό από τα υπόλοιπα είδος μάθησης, το οποίο

χρησιμοποιείται όταν ένα σύστημα, το οποίο ονομάζεται πράκτορας (agent), αλληλενεργεί με το περιβάλλον, αποκτώντας ανταμοιβή. Όσον αφορά την ανταμοιβή, αυτή μπορεί να είναι είτε θετική (κέρδος) είτε αρνητική (ποινή). Εάν το περιβάλλον είναι δυναμικό, όταν εκτελεί κάποια ενέργεια ο πράκτορας, τότε το περιβάλλον περνά σε μία άλλη κατάσταση. Τότε, η ανταμοιβή εξαρτάται από την ενέργεια που έχει επιλεγεί για εκτέλεση, αλλά και από την υπάρχουσα κατάσταση του περιβάλλοντος. Εάν, από την άλλη, το περιβάλλον είναι στατικό, τότε βρίσκεται συνεχώς στην ίδια κατάσταση και η ανταμοιβή που αποκτάται από τον πράκτορα εξαρτάται από την ενέργεια που πράττει και μπορεί να εμφανιστεί είτε μετά από μία μεμονωμένη είτε μετά από μια ακολουθία ενεργειών. Υπάρχουν δύο αξίες οι οποίες μπορούν να χαρακτηριστούν ως θεμελιώδεις, η εξερεύνηση (exploration) και η εκμετάλλευση (exploitation). Η εξερεύνηση, από τη μία, αφορά τη δοκιμή διαφορετικών ενεργειών για να δοκιμαστεί η αντίδραση του περιβάλλοντος και η ανταμοιβή που έρχεται ως απότοκο. Από την άλλη, η εκμετάλλευση σημαίνει τη χρήση της γνώσης που προκύπτει από την αναζήτηση των διάφορων ενεργειών για την επιλογή της βέλτιστης. Επιπρόσθετα, η μάθηση με ενίσχυση μπορεί να χαρακτηριστεί και ως ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με σκοπό την εφαρμογή καλύτερων ενεργειών, ώστε να επιτυγχάνονται τα καλύτερα δυνατά αποτελέσματα. Η διαδικασία αυτή μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε τρία είδη, τη μη συσχετιστική μάθηση με ενίσχυση, τη συσχετιστική μάθηση με ενίσχυση και τη διαδοχική μάθηση με ενίσχυση (Barto, 1997).

Ξεκινώντας με τη μη συσχετιστική μάθηση με ενίσχυση (nonassociative reinforcement learning), σχετίζεται με την εκμάθηση ενός συστήματος μέσα από αξιολόγηση των συνεπειών που έχουν οι ενέργειές του σε μία διαδικασία. Το σύστημα κάνει ενέργειες οι οποίες επηρεάζουν μια διαδικασία, ενώ μπορεί επίσης να υπάρχουν και τυχαίοι ή άγνωστοι παράγοντες που επηρεάζουν το αποτέλεσμα. Ο κριτής αξιολογεί τις ενέργειες και στέλνει σήματα ενίσχυσης στο σύστημα, το οποίο στη συνέχεια ενημερώνει τους κανόνες παραγωγής ενεργειών και επαναλαμβάνει τη διαδικασία. Σε αυτή την κατηγορία μάθησης με ενίσχυση υπάρχουν ορισμένες θεμελιώδεις αρχές. Πρώτα,

η αβεβαιότητα μπορεί να θεωρηθεί ως το κυριότερο σημείο. Έπειτα, είναι ο ρόλος του κριτή ο οποίος αξιολογεί τις ενέργειες του συστήματος χωρίς να κατέχει πληροφορίες για τη διαδικασία. Επιπλέον, τα σήματα ενίσχυσης τα οποία είναι όλα τα μέτρα αξιολόγησης των ενεργειών και σκοπός είναι η επίτευξη της μέγιστης τιμής τους. Ακόμα, είναι οι πληροφορίες από τον κριτή, ο οποίος αξιολογεί τις ενέργειες και δε δείχνει στο σύστημα την καλύτερη. Επιπροσθέτως, είναι οι διαδικασίες επιλογής, αφού μέσω της χρήσης τυχαίων επιλογών, δίνεται η δυνατότητα σύγκρισης των αποτελεσμάτων διαφορετικών ενεργειών ώστε να επιλεγεί η βέλτιστη. Επίσης, η μάθηση μέσω δοκιμής και αξιολόγησης και τέλος η σύγκρουση εκμετάλλευσης και εξερεύνησης, καθώς το σύστημα πρέπει να φέρει σε ισορροπία τις υπάρχουσες πληροφορίες με την εξερεύνηση νέων (Barto, 1997).

Ένας αλγόριθμος που είναι ευρέως γνωστός και ανήκει σε αυτή την κατηγορία είναι ο ε-άπληστος αλγόριθμος. Ο άπληστος αλγόριθμος έχει ως αρνητικό το γεγονός ότι ελλοχεύει ο κίνδυνος της ελαχιστοποίησης της εξερεύνησης με την επιλογή των καλύτερων ενεργειών. Έτσι, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο ε-άπληστος αλγόριθμος. Ο αλγόριθμος αυτός δεν επιλέγει πάντα τη βέλτιστη ενέργεια, αλλά την επιλέγει με πιθανότητα $1-\epsilon$, ενώ επιλέγει και μία τυχαία ενέργεια με πιθανότητα ϵ , με το ϵ να προσδιορίζει ένα μικρό θετικό αριθμό. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την εξερεύνηση περισσότερων ενεργειών εκτός της τρέχουσας βέλτιστης. Το εύρος τιμών του ϵ θα πρέπει να παραμένει όσο το δυνατόν μικρότερο, ενώ αν λάβει την τιμή μηδέν, θα εξομοιωθεί με τον άπληστο αλγόριθμο (Barto, 1997).

Επιπρόσθετα, άλλη μία κατηγορία είναι η συσχετιστική μάθηση με ενίσχυση. Στην περίπτωση αυτή, το σύστημα δέχεται ως είσοδο μοτίβα ερεθισμάτων μαζί με ένα σήμα ενίσχυσης. Το βέλτιστο αποτέλεσμα εξαρτάται από τα μοτίβα ερεθισμάτων και η διαδικασία μάθησης στοχεύει στην εκμάθηση του συστήματος για την ενέργεια που μεγιστοποιεί την πιθανότητα επιτυχίας. Η μελέτη συσχετιστικών κανόνων μάθησης για νευρωνικά δίκτυα έχει γίνει αρκετά έντονη και υπάρχουν διάφορες προσεγγίσεις για να την υποστηρίξουν. Τέτοια είναι ο Κανόνας Συσχετιστικής Αναζήτησης (Associative Search Unit) που

βασίζεται στον κανόνα Hebb, ο οποίος ενισχύεται με το σήμα ενίσχυσης. Η πιθανότητα να ενεργοποιηθεί η μονάδα εξαρτάται από το συνολικό βάρος του ερεθίσματος. Η ενημέρωση των βαρών γίνεται με βάση ένα σήμα ενίσχυσης, το οποίο προσδιορίζεται από τον κριτή. Μια εναλλακτική προσέγγιση είναι η Επιλεκτική Μονάδα Εκκίνησης (Selective Bootstrap Unit), κατά την οποία επεκτείνεται ο κανόνας μάθησης LMS, έτσι ώστε να χρησιμοποιείται σε προβλήματα ενισχυτικής μάθησης. Αυτή η μονάδα ενημερώνει τα βάρη με διαφορετικούς κανόνες ανάλογα με την επιτυχία ή την αποτυχία. Εάν μια ενέργεια είναι σωστή, τα βάρη ενισχύονται προς αυτήν την κατεύθυνση, ειδάλλως προς την αντίθετη. Μια ακόμα προσέγγιση η οποία μοιάζει με την αμέσως προηγούμενη είναι η Μονάδα Ανταμοιβής-Ποινής (Reward-Penalty Unit). Η γενικότερη λειτουργία της είναι όμοια με αυτή της Επιλεκτικής Μονάδας Εκκίνησης, με μόνη διαφορά στον τρόπο με τον οποίο πραγματοποιείται η ενημέρωση των βαρών. Επιπλέον, υπάρχει η Στοχαστική Μονάδα Πραγματικής Τιμής (Stochastic Real-Valued Unit). Σε αυτή την προσέγγιση χρησιμοποιείται μια πιο περίπλοκη μέθοδος, στην οποία τα βάρη αλλάζουν βάσει της σύγκρισης ανάμεσα στην αναμενόμενη και την πραγματική ενίσχυση, ενώ ταυτόχρονα υιοθετεί και ένα στοιχείο τυχαιότητας. Τέλος, διακρίνονται οι Μέθοδοι Διακύμανσης Βαρών (Weight Perturbation), σύμφωνα με τις οποίες ο υπολογισμός της επίδοσης της μονάδας γίνεται με την εισαγωγή τυχαίων μεταβολών των βαρών. Ο συνδυασμός όλων αυτών έχει ως αποτέλεσμα την ανάπτυξη δικτύων μάθησης με ενίσχυση, με απώτερο στόχο τη μεγιστοποίηση της απόδοσης (Barto, 1997).

Όσον αφορά την τελευταία κατηγορία, αυτή της διαδοχικής μάθησης με ενίσχυση, σκοπός είναι, σε προβλήματα βέλτιστου ελέγχου ή αλλιώς διαδοχικά προβλήματα απόφασης σε διακριτό χρόνο, η βελτίωση των μακροπρόθεσμων συνεπειών μιας ενέργειας. Η προσαρμοστική μονάδα κριτικής μαθαίνει να προβλέπει το άθροισμα των μελλοντικών ενισχύσεων χρησιμοποιώντας έναν κανόνα μάθησης που βασίζεται στη διαφορά χρόνου (TD error). Αυτός ο κανόνας συμβάλλει στην πρόβλεψη για το αν μπορεί να εφαρμοστεί είτε με γραμμικές μονάδες είτε συνδυάζοντας και πολυεπίπεδα νευρωνικά δίκτυα. Ειρήσθω εν

παρόδω, η χρήση της αρχιτεκτονικής actor-critic είναι αρκετά συνήθης σε αυτή την κατηγορία μάθησης προκειμένου να επιτευχθεί η ισορροπία ανάμεσα στις άμεσες και μακροπρόθεσμες ενισχύσεις. Σε αυτή την περίπτωση, το τμήμα critic προβλέπει μελλοντικές ενισχύσεις, ενώ το actor βελτιστοποιεί την άμεση απόκριση. Επιπρόσθετα, ένας αλγόριθμος που χρησιμοποιείται στη διαδοχική μάθησης με ενίσχυση είναι ο Q-learning, ο οποίος υπολογίζει τις ενισχύσεις κάθε ενέργειας, ούτως ώστε να επιλεγεί η καλύτερη από το σύστημα. Συνδέεται με τις τεχνικές του δυναμικού προγραμματισμού που επιλύουν σύνθετα στοχαστικά προβλήματα ελέγχου, δηλαδή προβλήματα όπου πρέπει να ληφθούν βέλτιστες αποφάσεις κάτω από αβεβαιότητα, ωστόσο είναι πρακτικά μη εφαρμόσιμες για μεγάλα συστήματα (Barto, 1997).

Είναι εύκολα αντιληπτό πως η μηχανική μάθηση αποτελεί μια πολύ σημαντική διαδικασία για την καλύτερη αξιοποίηση των δεδομένων και τη διευκόλυνση επεξεργασίας τους. Ωστόσο, ο ολοένα αυξανόμενος όγκος πληροφοριών που δέχονται τα συστήματα απαιτεί και συνεχή εξέλιξη των ήδη υπάρχουσων τεχνικών. Σε αυτό το κομμάτι μπορεί να συμβάλλει τα μέγιστα η κβαντική υπολογιστική, η οποία είναι σε θέση να υπόσχεται πως μπορεί να προσφέρει σημαντική επιτάχυνση των αλγορίθμων μηχανικής μάθησης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ

3.1 Κβαντική Υπολογιστική – Εισαγωγή

Η κβαντική υπολογιστική είναι ένας τομέας της επιστήμης της Πληροφορικής ο οποίος έχει αρχίσει να αναπτύσσεται ραγδαία. Σε

αντίθεση με τους κοινούς υπολογιστές που βασίζονται στα κλασικά bits 0 ή 1, οι κβαντικοί υπολογιστές χρησιμοποιούν κβαντικά bits (qubits), τα οποία χρησιμοποιούν ορισμένες από τις ιδιότητες της κβαντομηχανικής, με αποτέλεσμα να μπορούν να είναι ταυτόχρονα και 0 και 1, αλλά και οτιδήποτε άλλο μεταξύ αυτών των τιμών, χάρη στην ιδιότητα της υπέρθεσης. Με αυτό τον τρόπο, οι κβαντικοί υπολογιστές έχουν τη δυνατότητα να πραγματοποιούν πολυάριθμους και πολύπλοκους υπολογισμούς ταυτόχρονα, γεγονός που είναι καθοριστικό στην άμεση και αποτελεσματική επίλυση σύνθετων προβλημάτων. Ιδιαίτερα σημαντική είναι η συμβολή τους, για παράδειγμα, στην προσομοίωση μοριακών αλληλεπιδράσεων για την επιτάχυνση της διαδικασίας ανακάλυψης νέων φαρμάκων, καθώς οι κβαντικοί αλγόριθμοι προσφέρουν μεγάλες προοπτικές στην αποδοτική και γρήγορη επίλυση προβλημάτων τα οποία με τους κλασικούς υπολογιστές φάνταζαν ακατόρθωτα.

Η μεγάλη πρόοδος της κβαντικής υπολογιστικής έχει οδηγήσει, αναπόφευκτα, και στην ανάπτυξη εργαλείων που εξυπηρετούν τη δημιουργία κώδικα και εφαρμογών. Ένα τέτοιο εργαλείο, το οποίο είναι ευρέως γνωστό, αποτελεί το Qiskit. Πιο συγκεκριμένα, είναι ένα λογισμικό ανοιχτού κώδικα λογισμικό που προέρχεται από την IBM για την παραγωγή και το χειρισμό κβαντικών προγραμμάτων, κυρίως σε γλώσσα Python. Επιτρέπει, επίσης, στους χρήστες του τη δημιουργία και την εκτέλεση κβαντικών αλγορίθμων, την προσομοίωση κυκλωμάτων και μπορεί να εκτελεστεί είτε σε πρωτότυπες κβαντικές συσκευές είτε σε προσομοιωτές από τοπικούς υπολογιστές (Βικιπαίδεια, 2025). Επομένως, πρόκειται αναμφισβήτητα για ένα μέσο που συμβάλλει στην κατανόηση, τη διάδοση και τη χρήση της κβαντικής υπολογιστικής.

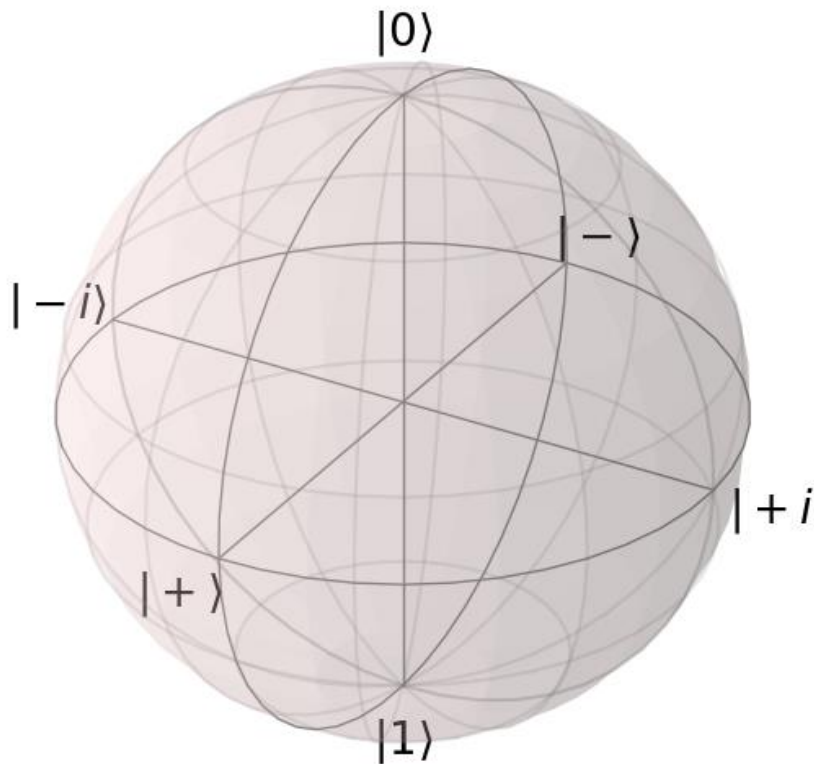
3.2 Qubits και Καταχωρητές

Το qubit ή αλλιώς κβαντικό bit είναι η θεμελιώδης μονάδα για την κωδικοποίηση πληροφορίας στους κβαντικούς υπολογιστές, όπως αντίστοιχα είναι το bit στους κλασικούς. Σε έναν κλασικό υπολογιστή, ένα bit μπορεί να έχει είτε την τιμή ένα είτε την τιμή μηδέν. Ωστόσο, στους κβαντικούς υπολογιστές η κατάσταση διαφέρει. Ένα qubit μπορεί να έχει την ίδια στιγμή και τις δύο τιμές, καθώς και οποιαδήποτε ενδιάμεση (Schneider, Smalley, 2024). Με τη μέτρησή του, είναι δυνατό να προσδιορισθούν οι πιθανότητες του να βρεθεί σε κάποια κατάσταση. Το διάνυσμα κατάστασης δείχνει τις συγκεκριμένες πιθανότητες και εκφράζεται από την ακόλουθη σχέση: $|q\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Σύμφωνα με τη σχέση αυτή, το άθροισμα των δύο στοιχείων a , b , τα οποία ονομάζονται πλάτη πιθανότητας, υψωμένα στο τετράγωνο, θα πρέπει να ισούται με ένα. Δηλαδή $a^2 + b^2 = 1$. Βέβαια, πρέπει να σημειωθεί πως υπάρχουν και δύο γνωστές καταστάσεις για ένα qubit, οι $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο στη χρήση οποιασδήποτε άλλης κβαντικής κατάστασης, αφού θα μπορεί να εκφραστεί μέσω αυτών των δύο. Για παράδειγμα, η κατάσταση $|q\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ θα μπορεί να παρουσιαστεί ως $|q\rangle = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a|0\rangle + b|1\rangle$ (Καραφυλλίδης, 2015).

Παρ' όλα αυτά, οι επιστήμη της κβαντικής υπολογιστικής εξελίσσεται συνεχώς και αυτό έχει ως αποτέλεσμα την ανάπτυξη και διαφορετικών τύπων qubits για χρήση σε εφαρμογές στις οποίες κάθε τύπος θα είναι πιο κατάλληλος. Έτσι, η διάκρισή τους γίνεται ως υπεραγώγιμα, qubits παγιδευμένων ιόντων, κβαντικών σημείων, φωτονίων και ουδέτερων ατόμων. Στην περίπτωση των υπεραγώγιμων, είναι ιδιαίτερα γνωστά για τη μεγάλη συνεκτικότητά τους. Κατασκευάζονται από υπεραγώγιμα υλικά σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες και χρησιμοποιούνται μικροκυματικά σήματα για να χειριστούν και να αλλάξουν την κατάσταση των qubits. Έπειτα, για τον επόμενο τύπο qubits, με τη χρήση ενός ειδικού λέιζερ, παγιδεύονται τα ιόντα και μπορούν να χρησιμοποιηθούν και ως qubits. Στην περίπτωση αυτή, το βασικό τους πλεονέκτημα είναι η μεγάλη χρονική διάρκεια συνεκτικότητας και οι υψηλές ακρίβειας μετρήσεις. Όσον αφορά τα qubits κβαντικών σημείων, πρόκειται για

μικρούς ημιαγωγούς οι οποίοι συλλαμβάνουν ένα ηλεκτρόνιο και το χρησιμοποιούν ως qubit. Ελέγχονται μέσω μαγνητικών πεδίων και προσελκύουν το ερευνητικό ενδιαφέρον για τις δυνατότητες επέκτασης και τη συμβατότητα με υπάρχουσα τεχνολογία ημιαγωγών που παρουσιάζουν. Στη συνέχεια, με τη ρύθμιση και τη μέτρηση των χρήση των κατευθυντικών καταστάσεων περιστροφής των φωτονίων, τα qubits φωτονίων μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την αποστολή κβαντικών πληροφοριών σε μεγάλες αποστάσεις μέσω καλωδίων οπτικών ινών και χρησιμοποιούνται στην κβαντική επικοινωνία και την κβαντική κρυπτογραφία. Τέλος, τα qubits ουδέτερων ατόμων διακατέχονται από ένα ισορροπημένο θετικό και αρνητικό φορτίο. Με χρήση λέιζερ, τα άτομα ενεργοποιούνται σε διάφορες καταστάσεις, από τις οποίες οι δύο μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη δημιουργία ενός qubit που είναι κατάλληλο για την κλιμάκωση και την εκτέλεση λειτουργιών (Καραφυλλίδης, 2015).

Ένα πολύ σημαντικό εργαλείο για την οπτική και γεωμετρική αναπαράσταση ενός qubit είναι η σφαίρα Bloch. Η σφαίρα αυτή είναι μια τρισδιάστατη σφαίρα ακτίνας 1, που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση της κατάστασης ενός qubit. Μέσω αυτής μπορούν να περιγραφούν πολλές από τις λειτουργίες που εφαρμόζονται σε μεμονωμένα qubits για την επεξεργασία κβαντικών πληροφοριών. Οποιαδήποτε αλλαγή στην κατάσταση ενός qubit, όπως οι κβαντικές πύλες που εκτελούν περιστροφές, μπορεί να απεικονιστεί ως μετακίνηση του αντίστοιχου σημείου στην επιφάνειά της. Κάθε σημείο αυτής της επιφάνειας αντιστοιχεί σε μια πιθανή κβαντική κατάσταση του qubit. Οι άξονες της σφαίρας ονομάζονται x , y και z , με το επάνω μέρος (βόρειος πόλος) να αναλογεί στην κατάσταση $|0\rangle$ και το κάτω (νότιος πόλος) στην κατάσταση $|1\rangle$ (Καραφυλλίδης, 2015) (Εικόνα 7).



Εικόνα 7. Σφαίρα Bloch

Η γενική κατάσταση ενός qubit μπορεί να γραφεί ως εξής:
 $|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle.$

Σε αυτή την έκφραση, οι θ (με τιμές από 0 έως π) και ϕ (με τιμές από 0 έως 2π) είναι πραγματικοί αριθμοί που ορίζουν ένα μοναδικό σημείο στην επιφάνεια της σφαίρας Bloch. Ο θ είναι η γωνία που σχηματίζει το διάνυσμα $|\psi\rangle$ με τον κατακόρυφο άξονα z και ο ϕ η γωνία περιστροφής γύρω από τον άξονα αυτό. Ο παράγοντας $e^{i\phi}$ δεν έχει σημαντικές συνέπειες ως προς μελέτη, καθώς η φάση ϕ είναι παγκόσμια, επομένως μη παρατηρήσιμη και μπορεί να αγνοηθεί. Ο βόρειος πόλος αντιστοιχεί στην κατάσταση $|0\rangle$ (όταν $\theta=0$) και ο νότιος πόλος στην κατάσταση $|1\rangle$ (όταν $\theta=\pi$) (Καραφυλλίδης, 2015).

Ο μοναδιαίος κύκλος στο μιγαδικό επίπεδο αναπαριστά όλους τους μιγαδικούς αριθμούς z που έχουν μέτρο 1, δηλαδή $|z|^2 = 1$. Αυτό σημαίνει ότι κάθε σημείο στον κύκλο μπορεί να περιγραφεί από μια γωνία θ (η γωνία που σχηματίζει το σημείο με τον άξονα x).

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα του Euler, μπορεί να γραφεί ένας μιγαδικός αριθμός στον κύκλο ως $z=e^{i\theta}$, όπου θ η γωνία περιστροφής γύρω από το κέντρο του κύκλου (Καραφυλλίδης, 2015).

Η ομάδα $SU(2)$ περιγράφει περιστροφές στον 2D μιγαδικό χώρο, δηλαδή τις κβαντικές καταστάσεις. Πρόκειται για μαθηματικούς μετασχηματισμούς που διατηρούν το μέτρο της κατάστασης και περιγράφουν περιστροφές σε μια αόρατη 2D επίπεδη επιφάνεια. Επίσης, η ομάδα $SO(3)$ αντιπροσωπεύει περιστροφές στον 3D πραγματικό χώρο. Υπάρχει μια αντιστοιχία μεταξύ των δύο ομάδων ($SU(2)$ και $SO(3)$), όπου οι περιστροφές της $SU(2)$ μπορούν να περιγραφούν ως περιστροφές στον 3D χώρο, αλλά με την υποσημείωση ότι κάθε σημείο στη $SU(2)$ αντιστοιχεί σε δύο διαφορετικά σημεία στην $SO(3)$ (Καραφυλλίδης, 2015).

Στη σφαίρα Bloch, σε περίπτωση εξέτασης μόνο του πάνω ημισφαιρίου, οι καταστάσεις που αντιπροσωπεύονται, αντιστοιχούν σε συγκεκριμένες διαδρομές ή συνδυασμούς των καταστάσεων $|0\rangle$ και $|1\rangle$ του qubit. Αν εξεταστούν σημεία που είναι διαμετρικά αντίθετα, τότε αυτές οι θέσεις μπορούν να θεωρηθούν ισοδύναμες όσον αφορά την κατάσταση του qubit. Αυτό συμβαίνει λόγω της φύσης των κβαντικών περιστροφών και της μαθηματικής δομής της ομάδας $SU(2)$, που διπλοκαλύπτει τον 3D χώρο (Καραφυλλίδης, 2015).

Η σφαίρα Bloch προσφέρει ένα οπτικό μέσο για να αναλύσουμε την κατάσταση ενός μεμονωμένου qubit. Όταν, όμως, συνδυάζονται πολλά qubits, σχηματίζουν κβαντικούς καταχωρητές, οι οποίοι επιτρέπουν πιο πολύπλοκες κβαντικές διεργασίες. Είναι γνωστό πως οι καταχωρητές στους κλασικούς υπολογιστές αφορούν ένα σύνολο από bits. Έτσι και στην περίπτωση των κβαντικών υπολογιστών, οι καταχωρητές είναι ένα σύνολο από qubits, τα οποία διατάσσονται και σε σειρά. Βέβαια, θα ήταν παράλειψη να μην τονιστεί ότι οι κβαντικοί καταχωρητές έχουν τη δυνατότητα να αποθηκεύουν και να επεξεργάζονται εκθετικά περισσότερη πληροφορία συγκριτικά με τους κλασικούς. Αυτό μπορεί να αποδειχθεί λαμβάνοντας ως παράδειγμα έναν απλό κβαντικό καταχωρητή που αποτελείται από δύο qubits, $|q0\rangle$ και $|q1\rangle$. Η κατάσταση του κβαντικού καταχωρητή $|qR\rangle$ δίνεται από το τανυστικό

γινόμενο των καταστάσεων των qubits που τον αποτελούν και εκφράζεται ως εξής: $|qR\rangle = |q1\rangle \otimes |q0\rangle = |q1\rangle |q0\rangle = |q1q0\rangle$ (Καραφυλλίδης, 2015).

Σε αυτό το σημείο, πρέπει να επισημανθεί ο όρος του τανυστικού γινομένου. Το σύμβολο $\otimes$ δείχνει την πράξη του τανυστικού γινομένου, το οποίο αποτελεί μια μαθηματική μέθοδο με την οποία συνδυάζονται οι καταστάσεις μεμονωμένων qubits για να περιγραφεί η κατάσταση ολόκληρου του καταχωρητή. Για παράδειγμα, έστω ότι υπάρχουν δύο qubits με τις ακόλουθες καταστάσεις: $|\psi\rangle = \alpha_1|0\rangle + \beta_1|1\rangle$ και $|\chi\rangle = \alpha_2|0\rangle + \beta_2|1\rangle$. Η συνολική κατάσταση του καταχωρητή θα υπολογιστεί με τη βοήθεια του τανυστικού γινομένου ως εξής: $\alpha_1\alpha_2|00\rangle + \alpha_1\beta_2|01\rangle + \beta_1\alpha_2|10\rangle + \beta_1\beta_2|11\rangle$. Ωστόσο, το τανυστικό γινόμενο δύο qubits μπορεί να αναπαρασταθεί και ως πίνακας. Δηλαδή, αν θεωρηθεί η κατάσταση του πρώτου qubit ως $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$

και του δεύτερου ως $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$. Το τανυστικό γινόμενο, επομένως, σε αυτή την περίπτωση υπολογίζεται με τον ακόλουθο τρόπο:

$$|\psi\rangle \otimes |\chi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1\alpha_2 \\ \alpha_1\beta_2 \\ \beta_1\alpha_2 \\ \beta_1\beta_2 \end{pmatrix}$$

Επομένως, για τον υπολογισμό της κατάστασης του κβαντικού καταχωρητή $|qR\rangle$, με $|q0\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ και

$$|q1\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \text{είναι} \quad |qR\rangle = |q1\rangle \otimes |q0\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle) = (ac)|0\rangle \otimes |0\rangle + (ad)|0\rangle \otimes |1\rangle + (bc)|1\rangle \otimes |0\rangle + (bd)|1\rangle \otimes |1\rangle$$

Αντικαθιστώντας τα γινόμενα των μεταβλητών ac , ad , bc και bd με c_0 , c_1 , c_2 και c_3 έχουμε: $|qR\rangle = c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle$. Με λίγα λόγια, ο κβαντικός καταχωρητής που προκύπτει από δύο qubits είναι ουσιαστικά ένα κβαντικό σύστημα τεσσάρων καταστάσεων (Καραφυλλίδης, 2015).

Οι τέσσερις βασικές καταστάσεις ενός κβαντικού καταχωρητή είναι οι ακόλουθες:

$$\text{i. } |0\rangle \otimes |0\rangle = |0\rangle|0\rangle = |00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{ii. } |0\rangle \otimes |1\rangle = |0\rangle|1\rangle = |01\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{iii. } |1\rangle \otimes |0\rangle = |1\rangle|0\rangle = |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{iv. } |1\rangle \otimes |1\rangle = |1\rangle|1\rangle = |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Ένας κβαντικός καταχωρητής ο οποίος αποτελείται από n qubits και βρίσκεται σε υπέρθεση, βρίσκεται σε 2^n διαφορετικές καταστάσεις. Αυτό επιτρέπει στους κβαντικούς καταχωρητές να αποθηκεύουν και να επεξεργάζονται ταυτόχρονα πολλαπλές τιμές, αυξάνοντας εκθετικά την αποθηκευτική ικανότητά τους. Το διάνυσμα κατάστασης του κβαντικού καταχωρητή με n qubits είναι ένα διάνυσμα σε χώρο Hilbert 2^n και το μήκος του ισούται με τη μονάδα (Καραφυλλίδης, 2015).

3.3 Κβαντικές Πύλες και Κβαντικά Κυκλώματα

Ένα σημαντικό αποτέλεσμα του ότι οι κβαντικοί μετασχηματισμοί είναι μοναδιαίοι, αφορά το γεγονός πως θεωρούνται αναστρέψιμοι. Οι κβαντικές πύλες, οι οποίες αποτελούν δράσεις που ασκούνται σε ένα μεμονωμένο qubit, περιστρέφουν το διάνυσμα κατάστασης του qubit μέσα στη σφαίρα Bloch και το μετατρέπουν σύμφωνα με το μαθηματικό τους μοντέλο. Παρότι είναι αρκετά μεγάλος ο αριθμός που υπάρχουν διαθέσιμες, στην προκειμένη περίπτωση θα αναλυθούν οι σημαντικότερες και οι ευρέως χρησιμοποιούμενες (Καραφυλλίδης, 2015).

Πύλη Hadamard: Η κβαντική πύλη Hadamard προσδιορίζεται με το σύμβολο H και περιγράφεται από τον ακόλουθο πίνακα:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

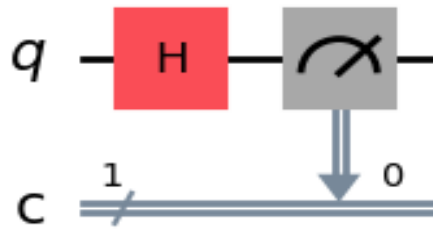
Παρατηρώντας τη δράση της σε ένα qubit το οποίο βρίσκεται σε κατάσταση $|0\rangle$ έχουμε:

$$H|0\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) |0\rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) |1\rangle.$$

Όταν, από την άλλη, ένα qubit βρίσκεται σε κατάσταση $|1\rangle$ θα ισχύει:

$$H|1\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) |0\rangle - \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) |1\rangle.$$

Με λίγα λόγια, όταν η πύλη Hadamard χρησιμοποιηθεί σε μία από τις δύο καταστάσεις που μπορεί να έχει ένα qubit, τότε το θέτει σε υπέρθεση, με αποτέλεσμα να έχει ίσες πιθανότητες 50% να είναι είτε 0 είτε 1. Αν παρατηρηθεί η δράση της συγκεκριμένης πύλης στις καταστάσεις υπέρθεσης του qubit που προέκυψαν προηγουμένως, θα διαπιστωθεί ότι επιστρέφει το qubit στη βασική του κατάσταση (Καραφυλλίδης, 2015) (Εικόνα 8).



Εικόνα 8. Σχηματική αποτύπωση της πύλης Hadamard

Η υπέρθεση είναι μια θεμελιώδης έννοια της κβαντικής υπολογιστικής κατά την οποία τα qubits έχουν την ικανότητα να βρίσκονται σε δύο καταστάσεις ταυτόχρονα. Οι πιθανότητες για καθεμία από αυτές τις καταστάσεις καθορίζονται από τους συντελεστές που περιγράφουν την κατάσταση του qubit πριν τη μέτρηση. Όταν μετράται το qubit, καταρρέει σε μία από τις δύο καταστάσεις, με πιθανότητες που προκύπτουν από αυτούς τους συντελεστές (Καραφυλλίδης, 2015).

Πύλη Αδράνειας: Η συγκεκριμένη πύλη είναι η απλούστερη που υπάρχει, καθώς δεν προκαλεί καμία μεταβολή στην κατάσταση του qubit που εφαρμόζεται. Ορίζεται από το σύμβολο I και αναπαρίσταται από τον τύπο που ακολουθεί (Καραφυλλίδης, 2015):

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Υποθέτοντας ότι εφαρμόζεται η πύλη αδράνειας σε qubit με κατάσταση 0, δηλαδή $q = |0\rangle$, τότε θα ισχύει:

$$I|q\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 * 1 & + & 0 * 0 \\ 0 * 1 & + & 1 * 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |q\rangle.$$

Πύλες Pauli: Οι πύλες Pauli (X, Y, Z) θεωρούνται ιδιαίτερα σημαντικό κομμάτι των κβαντικών πυλών, αφού κάθε πύλη ενός qubit μπορεί να μπορεί να εκφραστεί ως γραμμικός συνδυασμός των πυλών Pauli και

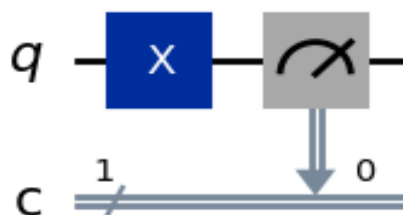
της πύλης αδράνειας. Συμπερασματικά, αυτές οι πύλες συμβάλλουν στην εκτέλεση των περιστροφών του διανύσματος κατάστασης ενός qubit στη σφαίρα Bloch (Καραφυλλίδης, 2015).

1. Η πύλη X είναι η κβαντική εκδοχή της κλασικής λογικής πύλης NOT (Εικόνα 9). Αλλάζει την κατάσταση ενός qubit από $|0\rangle$ σε $|1\rangle$ και αντίστροφα (Πίνακας 1). Η μαθηματική της αναπαράσταση είναι η εξής:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Για παράδειγμα, έστω ότι εφαρμόζεται σε ένα qubit με κατάσταση $|1\rangle$, θα είναι:

$$X|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 * 0 + 1 * 1 \\ 1 * 0 + 0 * 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle.$$



Εικόνα 9. Σχηματική απεικόνιση της πύλης X

Input Qubit	Output Qubit
$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
$ 1\rangle$	$ 0\rangle$

Πίνακας 1. Καταστάσεις ενός qubit με την εφαρμογή της πύλης X

2. Η πύλη Y είναι μία άλλη πύλη τύπου Pauli και λειτουργεί παρόμοια με την πύλη X, ωστόσο μαζί με την αντιστροφή της

κατάστασης του qubit περιλαμβάνει και μια ανατροπή φάσης. Μαθηματικά εκφράζεται με τον ακόλουθο τύπο:

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Με λίγα λόγια, αν εφαρμοστεί σε ένα qubit με κατάσταση $|0\rangle$, θα

$$\text{ισχύει: } Y|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = i|1\rangle.$$

Αντίθετα, αν εφαρμοστεί σε ένα qubit με κατάσταση $|1\rangle$, θα

$$\text{ισχύει: } Y|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -i|0\rangle.$$

3. Η πύλη Z είναι η τελευταία πύλη τύπου Pauli και επιφέρει μια αλλαγή φάσης στην κατάσταση του qubit, χωρίς, όμως, να ανατρέπει την κατάστασή του. Η αλλαγή της φάσης αναφέρεται μόνο όταν το qubit βρίσκεται σε κατάσταση $|1\rangle$, διότι την πολλαπλασιάζει με -1, ωστόσο δε μετατρέπει το $|0\rangle$ σε $|1\rangle$ ή το αντίστροφο.

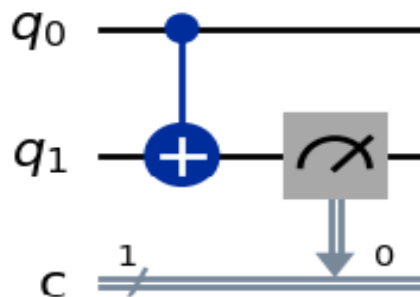
Για παράδειγμα, έστω ότι υπάρχει ένα qubit $|q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ και εφαρμόζεται σε αυτό η πύλη Z. Τότε, θα ισχύει ότι: $Z|q\rangle = Z(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha Z|0\rangle + \beta Z|1\rangle$.

Παρατηρείται, δηλαδή, ότι παρέμεινε αμετάβλητος ο συντελεστής της κατάστασης $|0\rangle$ και έλαβε αρνητικό πρόσημο ο συντελεστής της κατάστασης $|1\rangle$.

Πύλη CX: Η πύλη CX ή αλλιώς CNOT (Controlled-NOT) είναι μια ελεγχόμενη πύλη που δρα σε δύο qubits (Εικόνα 9). Το ένα λέγεται qubit ελέγχου και προσδιορίζεται από το σύμβολο c (control), ενώ το άλλο qubit στόχος και συμβολίζεται με t (target). Η κατάσταση του qubit ελέγχου πριν εφαρμοστεί η συγκεκριμένη πύλη είναι $|c_i\rangle$ και του qubit στόχος $|t_i\rangle$. Μετά την εφαρμογή της γίνονται $|c_o\rangle$ και $|t_o\rangle$. Επιπλέον, η πύλη CX αλλάζει την κατάσταση του δεύτερου qubit μόνο όταν το qubit ελέγχου είναι στην κατάσταση $|1\rangle$. Αντιθέτως, όταν το qubit ελέγχου

βρίσκεται στην κατάσταση $|0\rangle$, τότε διατηρεί την κατάσταση του qubit στόχος ως έχει. Πρέπει, επίσης, να τονιστεί πως η κατάσταση του qubit ελέγχου, οποιαδήποτε κι αν είναι αυτή, παραμένει πάντα ανεπηρέαστη. Η μαθηματική προσέγγισή της είναι η εξής:

$$CX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



Εικόνα 10. Σχηματική αποτύπωση της πύλης CX

Για να γίνει πιο κατανοητή η δράση της πύλης, θα παρουσιαστούν οι καταστάσεις ορισμένων κβαντικών καταχωρητών (Πίνακας 2).

$ c_i t_i\rangle$	$ c_o t_o\rangle$
$ 00\rangle$	$ 00\rangle$
$ 01\rangle$	$ 01\rangle$
$ 10\rangle$	$ 11\rangle$
$ 11\rangle$	$ 10\rangle$

Πίνακας 2. Καταστάσεις κβαντικών καταχωρητών πριν και μετά την εφαρμογή της πύλης CX

Αυτό που παρατηρείται στην προκειμένη περίπτωση είναι ότι στις δύο πρώτες καταστάσεις όπου το qubit ελέγχου είναι $|0\rangle$, η κατάσταση του qubit στόχος δεν αλλάζει, με αποτέλεσμα να παραμένουν αμετάβλητες. Στις άλλες δύο, όμως, όπου το qubit ελέγχου είναι $|1\rangle$, το qubit στόχος μετατράπηκε από $|0\rangle$ σε $|1\rangle$ και έτσι άλλαξαν και οι καταστάσεις των καταχωρητών (Καραφυλλίδης, 2015).

Πύλη CCX: Η πύλη CCX ή CCNOT (Controlled-Controlled-NOT), είναι γνωστή και ως Toffoli gate και είναι μια ελεγχόμενη πύλη τριών qubits. Τα δύο ονομάζονται qubits ελέγχου και το τρίτο qubit στόχος, ενώ οι καταστάσεις τους πριν την εφαρμογή της πύλης είναι $|c_{1i}\rangle$, $|c_{2i}\rangle$ και $|t_i\rangle$ και μετά $|c_{1o}\rangle$, $|c_{2o}\rangle$ και $|t_o\rangle$. Με τη δράση της, στην περίπτωση που και τα δύο qubits ελέγχου είναι σε κατάσταση $|1\rangle$, τότε μεταβάλλεται η κατάσταση του τρίτου qubit στόχος. Πρέπει, επίσης, να επισημανθεί ότι οι καταστάσεις των qubits ελέγχου δεν αλλάζουν σε καμία περίπτωση. Η συγκεκριμένη πύλη, είναι μια επέκταση της πύλης CX και ως εκ τούτου αναπαρίσταται μαθηματικά με τον ακόλουθο τρόπο (Καραφυλλίδης, 2015):

$$CCX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Για να γίνει πιο σαφές, θα αναπτυχθεί ένα παράδειγμα από καταχωρητές τριών qubits και την επίδραση της πύλης CCX (Πίνακας 3).

$ c_i t_{2i} t_{1i}\rangle$	$ c_o t_{2o} t_{1o}\rangle$
$ 000\rangle$	$ 000\rangle$
$ 001\rangle$	$ 001\rangle$
$ 010\rangle$	$ 010\rangle$
$ 011\rangle$	$ 011\rangle$
$ 100\rangle$	$ 100\rangle$
$ 101\rangle$	$ 101\rangle$
$ 110\rangle$	$ 111\rangle$
$ 111\rangle$	$ 110\rangle$

Πίνακας 3. Καταστάσεις κβαντικών καταχωρητών πριν και μετά την εφαρμογή της πύλης CCX

Οι κβαντικές πύλες αποτελούν βασικά στοιχεία της κβαντικής υπολογιστικής. Ωστόσο, για να αξιοποιήσουμε πλήρως την υπολογιστική δύναμη των qubits, οι πύλες αυτές πρέπει να συνδυαστούν κατάλληλα για να σχηματίσουν κβαντικά κυκλώματα.

Τα κβαντικά κυκλώματα είναι καθοριστικά για την εκτέλεση κβαντικών υπολογισμών και μπορούν να περιγραφούν ως αλληλουχίες κβαντικών πυλών που λειτουργούν σε qubits και καταχωρητές με στόχο την υλοποίηση κβαντικών αλγορίθμων. Σε αντίθεση με τα κλασικά κυκλώματα, τα οποία χρησιμοποιούν bits που λαμβάνουν τιμές 0 ή 1, τα κβαντικά κυκλώματα βασίζονται στη χρήση των qubits, τα οποία μπορούν να βρίσκονται σε υπέρθεση, μια ιδιότητα που επιτρέπει την

επεξεργασία πληροφορίας με τρόπο που υπερβαίνει τις δυνατότητες των κλασικών συστημάτων. Κάθε κύκλωμα μπορεί να περιλαμβάνει πολλαπλές πύλες, εξ αυτών που προαναφέρθηκαν, οι οποίες εφαρμόζονται σε ένα ή περισσότερα qubits. Οι πύλες αυτές συνδυάζονται προκαλώντας σύνθετες αλληλεπιδράσεις και δημιουργώντας καταστάσεις που επιτρέπουν την υλοποίηση αλγορίθμων και την εκτέλεση προηγμένων υπολογιστικών λειτουργιών που είναι ανέφικτες με τα κλασικά κυκλώματα. Είναι σημαντικό, επίσης, να αναφερθεί ότι τα κβαντικά κυκλώματα αναπαριστούν τη χρονική σειρά και τον τρόπο με τον οποίο δρουν οι κβαντικές πύλες στους κβαντικούς καταχωρητές (quantumzeitgeist, 2024).

Ακολουθούν παραδείγματα διάφορων κβαντικών κυκλωμάτων:

Κύκλωμα 1:

```
from qiskit import QuantumCircuit

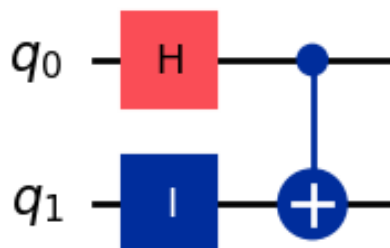
qc = QuantumCircuit(2)

qc.h(0)

qc.id(1)

qc.cx(0, 1)

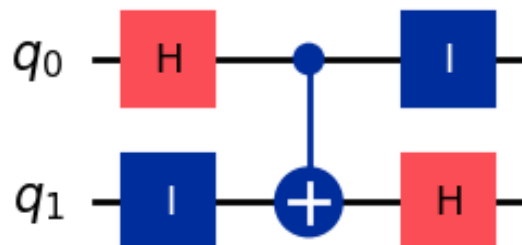
qc.draw('mpl')
```



Στο κύκλωμα αυτό υπάρχουν δύο qubits, όπου στο πρώτο εφαρμόζεται μία πύλη Hadamard, στο δεύτερο μία πύλη αδράνειας και στη συνέχεια συνδέει τα δύο qubits με μια πύλη CX.

Κύκλωμα 2:

```
from qiskit import QuantumCircuit  
  
qc = QuantumCircuit(2)  
  
qc.h(0)  
  
qc.id(1)  
  
qc.cx(0, 1)  
  
qc.id(0)  
  
qc.h(1)  
  
qc.draw('mpl')
```



Σε αυτό το κύκλωμα υπάρχουν δύο qubits, όπου σε αρχική φάση είναι πανομοιότυπο με το Κύκλωμα 1, ωστόσο στη συνέχεια προστίθεται μια πύλη αδράνειας στο πρώτο qubit και στο δεύτερο μια πύλη Hadamard.

Κύκλωμα 3:

```
from qiskit import QuantumCircuit  
  
circuit = QuantumCircuit(3)
```

```

circuit.h(0)

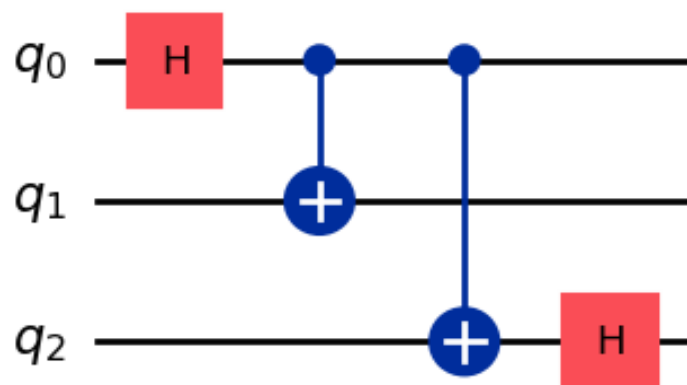
circuit.cx(0, 1)

circuit.cx(0, 2)

circuit.h(2)

circuit.draw('mpl')

```



Στο συγκεκριμένο κύκλωμα υπάρχουν τρία qubits. Στο πρώτο δρα μια πύλη Hadamard, ενώ το δεύτερο συνδέεται με το πρώτο με μια πύλη CX. Έπειτα, το τρίτο συνδέεται κι αυτό με το πρώτο με μια πύλη CX και μετά εφαρμόζεται και μια Hadamard.

Κύκλωμα 4:

```

from qiskit import QuantumCircuit

circuit = QuantumCircuit(4)

for qubit in range(4):
    circuit.h(qubit)

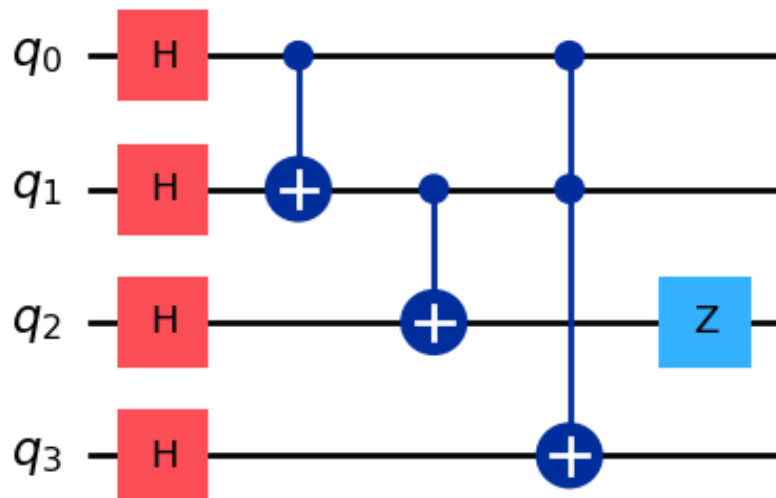
circuit.cx(0, 1)
circuit.cx(1, 2)

circuit.ccx(0, 1, 3)

circuit.z(2)

```

```
circuit.draw('mpl')
```

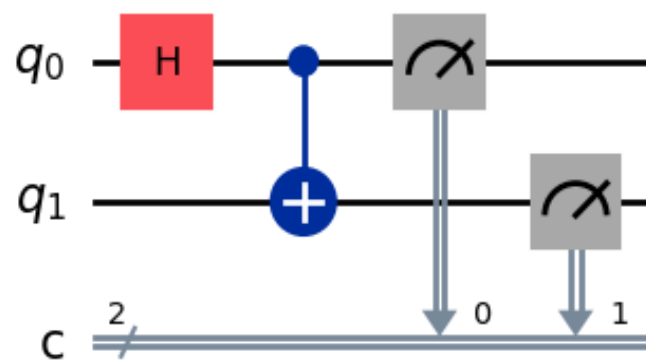


Στο κύκλωμα αυτό διακρίνονται τέσσερα qubits. Αρχικά, μια πύλη Hadamard δρα σε όλα τα qubits. Στη συνέχεια, εφαρμόζεται η πύλη CX από το πρώτο στο δεύτερο και από το δεύτερο στο τρίτο. Επιπλέον, υπάρχει μια πύλη CCX από το πρώτο και το δεύτερο qubit στο τελευταίο και τέλος εφαρμόζεται και μια πύλη Z στο τρίτο.

Η διεμπλοκή αποτελεί μια θεμελιώδη ιδιότητα της κβαντικής υπολογιστικής και κύριο χαρακτηριστικό των κβαντικών κυκλωμάτων. Η ιδέα της ιδιότητας αυτής ξεκίνησε τον προηγούμενο αιώνα από μια ομάδα επιστημόνων, τους Albert Einstein, Boris Podolsky και Nathan Rosen, οι οποίοι χρησιμοποίησαν δύο κβαντικά συστήματα που ενώ αλληλεπίδρασαν, απομακρύνθηκαν μεταξύ τους, αλλά με κάποιο τρόπο συνέχισαν να αλληλεπιδρούν αν και απομακρυσμένα. Ως εκ τούτου, οι φυσικές μετρήσεις των στοιχείων ασκούσαν επιρροή η μία στην άλλη. Ο Γερμανός Erwin Schrodinger, το 1935, για να εκφράσει τη διαδικασία της απομακρυσμένης αλληλεπίδρασης κβαντικών συστημάτων που περιγράφηκε, χρησιμοποίησε το γερμανικό όρο *verschränkung*, δηλαδή στα ελληνικά διεμπλοκή. Συνοπτικά, ως κβαντική διεμπλοκή μπορεί να οριστεί η ιδιότητα κατά την οποία τα qubits είναι αλληλεξαρτώμενα και η κατάσταση του ενός έχει την ικανότητα να συνδέεται άμεσα με την κατάσταση του άλλου, ανεξάρτητα από την απόσταση που τους χωρίζει.

Η βασικότερη αρχή της είναι ότι δύο κβαντικά συστήματα βρίσκονται σε κβαντική διεμπλοκή, όταν η κατάστασή τους δεν μπορεί να γραφεί ως τανυστικό γινόμενο των βασικών τους καταστάσεων. Για παράδειγμα, στη γνωστή και ως κατάσταση Bell, όπου $|q\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$. Αυτή η κατάσταση δεν μπορεί να γραφεί ως τανυστικό γινόμενο των επιμέρους καταστάσεων δύο qubits, κάτι που δείχνει ότι οι δύο καταστάσεις βρίσκονται σε διεμπλοκή (Καραφυλλίδης, 2015).

Για να επιτευχθεί η διεμπλοκή ανάμεσα σε δύο qubits απαιτείται η χρήση δύο κβαντικών πυλών, της Hadamard και της CX. Έτσι, το κβαντικό κύκλωμα που προκύπτει από αυτό τον συνδυασμό είναι το ακόλουθο:



Η κβαντική τηλεμεταφορά είναι μια διαδικασία που επιτρέπει τη μεταφορά κβαντικής πληροφορίας ανεξάρτητα από την απόσταση που χωρίζει τον αποστολέα και τον παραλήπτη και χωρίς την ύπαρξη κάποιου κβαντικού καναλιού. Η διαδικασία αυτή αξιοποιεί το φαινόμενο της διεμπλοκής και βασίζεται σε κβαντικές καταστάσεις που είναι γνωστές ως καταστάσεις Bell (Bell States) (Σάββας, 2023).

Ας υποθέσουμε ότι ο Κέβιν επιθυμεί να μεταφέρει μια πληροφορία με κατάσταση $|x\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ στον Πέτρο, όπου οι συντελεστές a, b

είναι άγνωστοι, καθώς πρόκειται για μια άγνωστη κβαντική κατάσταση. Σύμφωνα με το θεώρημα μη κλωνοποίησης (No-cloning theorem), δεν είναι εφικτό να αντιγραφεί μια άγνωστη κβαντική κατάσταση, γεγονός που καθιστά αδύνατη τη χρήση κλασικών μεθόδων αντιγραφής ή αποθήκευσης για τη μεταφορά της πληροφορίας.

Για να ξεπεραστεί το πρόβλημα αυτό, η διαδικασία της κβαντικής τηλεμεταφοράς απαιτεί τη συμμετοχή ενός τρίτου ατόμου, στην προκειμένη ο Λουίζ, που λογίζεται ως βοηθητικό qubit (auxiliary qubit). Ο Λουίζ δημιουργεί μια κατάσταση Bell μεταξύ του δικού του qubit και αυτού του Πέτρου.

Στη συνέχεια, ο Κέβιν επιδρά στο qubit που θέλει να τηλεμεταφέρει αφενός μέσω μιας πύλης CX με qubit ελέγχου την κατάσταση $|x\rangle$ και αφετέρου μέσω μιας πύλης Hadamard στην κατάσταση $|x\rangle$. Μετά την επίδραση της πύλης CX, η κατάσταση συστήματος μπορεί να περιγραφεί ως εξής: $\frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle + a|011\rangle + b|110\rangle + b|101\rangle)$. Με την εφαρμογή και της πύλης Hadamard, η οποία επηρεάζει το πρώτο qubit θέτοντάς το σε υπέρθεση, η κατάσταση του συστήματος γίνεται:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle + a|011\rangle + b|110\rangle + b|101\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a|000\rangle + a|100\rangle + a|011\rangle + a|111\rangle + b|010\rangle + b|110\rangle + b|001\rangle + b|101\rangle).$$

Έπειτα, ο Κέβιν μετράει το qubit της, αποθηκεύει το αποτέλεσμα σε δύο κλασικά bits και τα στέλνει στον Πέτρο. Έτσι, είναι:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} (a|000\rangle + a|100\rangle + a|011\rangle + a|111\rangle + b|010\rangle + b|110\rangle + b|001\rangle + b|101\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle(a|0\rangle + b|1\rangle) + |01\rangle(a|1\rangle + b|0\rangle) + |10\rangle(a|0\rangle - b|1\rangle) + |11\rangle(a|1\rangle - b|0\rangle)).$$

Επομένως, ο Πέτρος θα λάβει με ίσες πιθανότητες 00, 01, 10 και 11.

Αφού λάβει τα δύο bits, εκτελεί μία από τις ακόλουθες ενέργειες ανάλογα με την τιμή τους:

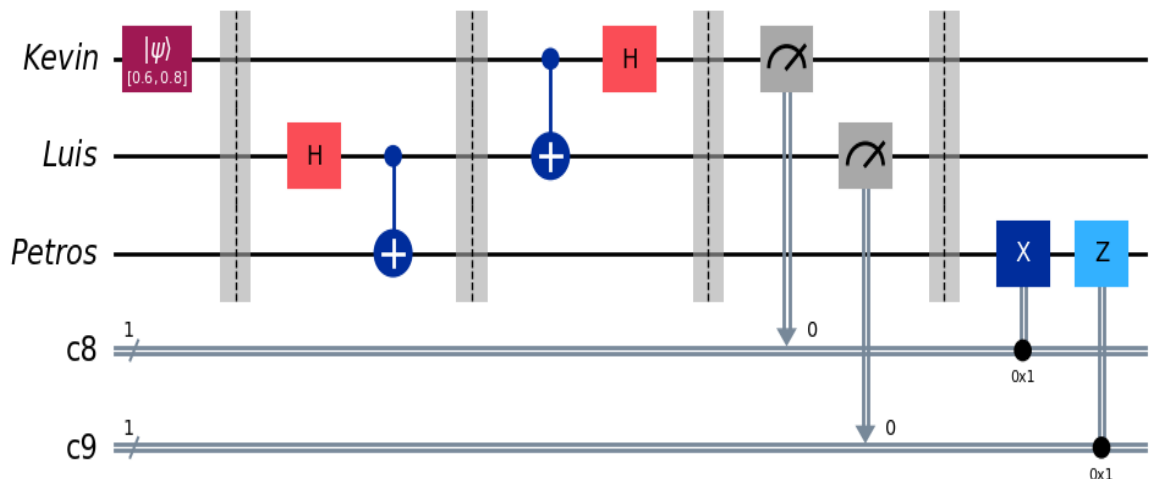
- 00: Δεν κάνει καμία ενέργεια.
- 01: Εφαρμόζει την πύλη X.
- 10: Εφαρμόζει την πύλη Z.
- 11: Εφαρμόζει διαδοχικά τις πύλες XZ.

Έχουμε: $|11\rangle(a|1\rangle - b|0\rangle) \rightarrow a\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - b\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}$

Μετά την εφαρμογή της πύλης X είναι: $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}$

Τέλος, μετά την εφαρμογή της πύλης Z έχουμε: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |x\rangle$

Συνοπτικά, μετά από αυτές τις ενέργειες η τηλεμεταφορά ολοκληρώνεται επιτυχώς και ο Πέτρος ανακτά την αρχική κατάσταση $|x\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ (Σάββας, 2023) (Εικόνα 10).



Εικόνα 11. Απεικόνιση της τηλεμεταφοράς μέσω κυκλώματος

3.4 Κβαντικοί Αλγόριθμοι

Deutsch–Jozsa:

Ο αλγόριθμος Deutsch–Jozsa είναι ένας από τους πρώτους κβαντικούς αλγορίθμους που δείχνουν την υπεροχή της κβαντικής υπολογιστικής έναντι της κλασικής και αναπτύχθηκε από τους David Deutsch και Richard Jozsa το 1992. Αντιμετωπίζει ένα θεωρητικό πρόβλημα, αυτό

του Deutsch και χρησιμοποιείται για την επίδειξη βασικών αρχών κβαντικής πληροφορίας, παρόλο που δεν έχει πρακτικές εφαρμογές. Ο αλγόριθμος Deutsch αφορά τη διάκριση αν μια συνάρτηση δύο τιμών $f:\{0,1\} \rightarrow \{0,1\}$ είναι σταθερή ή ισορροπημένη με μία μόνο κβαντική κλήση. Ο αλγόριθμος Deutsch-Jozsa επεκτείνει αυτή την ιδέα για συναρτήσεις πολλών εισόδων $f:\{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}$, όπου n είναι ο αριθμός των qubits εισόδου (Σάββας, 2022).

Το πρόβλημα στον αλγόριθμο αυτό είναι η ύπαρξη μιας συνάρτησης $f(x)$ η οποία προσδιορίζεται είτε ως σταθερή είτε ως ισορροπημένη. Στην πρώτη περίπτωση, έχει την ίδια τιμή (0 ή 1) για όλες τις εισόδους x , ενώ στη δεύτερη έχει τιμή 0 για τις μισές εισόδους και 1 για τις άλλες μισές. Ο στόχος είναι να προσδιοριστεί αν η $f(x)$ είναι σταθερή ή ισορροπημένη, με όσο το δυνατόν λιγότερες κλήσεις στη συνάρτηση (Σάββας, 2022).

Σε ένα κλασικό υπολογιστικό σύστημα, η μοναδική μέθοδος για να προσδιοριστεί η κατηγορία της $f(x)$ είναι μέσω ερωτήσεων. Αυτό σημαίνει ότι ένας αποστολέας πρέπει να στείλει σε έναν παραλήπτη αρκετές διαφορετικές τιμές του x και να αναλύσει τις απαντήσεις. Στην χειρότερη περίπτωση, ο αποστολέας θα χρειαστεί να ελέγξει τουλάχιστον $2^{n-1} + 1$ τιμές (όπου n είναι ο αριθμός των bits που χρησιμοποιούνται για την είσοδο), ώστε να είναι σίγουρος για την κατηγορία της συνάρτησης. Από την άλλη, υπάρχει και η κβαντική μέθοδος. Ο αλγόριθμος του Deutsch και η γενίκευσή του, ο αλγόριθμος Deutsch-Jozsa δηλαδή, χρησιμοποιούν την ιδιότητα της κβαντικής υπέρθεσης για να λύσουν το πρόβλημα με μία μόνο κλήση στη συνάρτηση $f(x)$. Με άλλα λόγια, αντί να υπολογίσει διαδοχικά την $f(x)$ για πολλές τιμές x , ο κβαντικός αλγόριθμος υπολογίζει όλες τις τιμές ταυτόχρονα μέσω κβαντικής παράλληλης επεξεργασίας. Συνοπτικά, με την κβαντική μέθοδο, αρχικά, ο αποστολέας τοποθετεί τα qubits σε μια κατάσταση υπέρθεσης, όπου όλα τα πιθανά x συνυπάρχουν ταυτόχρονα. Έπειτα, ο παραλήπτης υπολογίζει την $f(x)$ για όλες τις τιμές του x ταυτόχρονα και κωδικοποιεί το αποτέλεσμα στη φάση του κβαντικού καταστάσεων και τέλος, ο αποστολέας με μια πύλη Hadamard αναλύει τα αποτελέσματα και μέσω μιας μέτρησης και

διαπιστώνει αν η $f(x)$ είναι σταθερή ή ισορροπημένη. Στην περίπτωση που η $f(x)$ είναι σταθερή, όλες οι συνιστώσες της κατάστασης παρεμβαίνουν κατασκευαστικά, ενισχύοντας το αποτέλεσμα $|0\rangle^n$. Αντίθετα, όταν η $f(x)$ είναι ισορροπημένη, οι συνιστώσες ακυρώνονται, αφήνοντας μηδενική πιθανότητα για το αποτέλεσμα $|0\rangle^n$. Όπου $|0\rangle^n$, εννοείται ένας κβαντικός καταχωρητής με n qubits, όπου όλα βρίσκονται σε κατάσταση $|0\rangle$ (Σάββας, 2022).

Η επίλυση του προβλήματος με μία μόνο κλήση στη συνάρτηση αναδεικνύει την υπολογιστική υπεροχή των κβαντικών αλγορίθμων. Παρότι το συγκεκριμένο πρόβλημα δεν έχει άμεσες πρακτικές εφαρμογές, αποτελεί ένα από τα πρώτα παραδείγματα που δείχνουν πώς οι κβαντικοί υπολογιστές μπορούν να είναι εκθετικά ταχύτεροι από τους κλασικούς σε συγκεκριμένα προβλήματα (Σάββας, 2022).

Για την αναλυτική περιγραφή του αλγορίθμου, τα βήματα εκτέλεσής του είναι τα ακόλουθα. Αρχικά, τοποθετούνται τα qubits εισόδου σε μια κατάσταση υπέρθεσης. Χρησιμοποιείται η πύλη Hadamard για να δημιουργηθεί μια ομοιόμορφη υπέρθεση όλων των πιθανών τιμών του x . Η κατάσταση γίνεται $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle$, με $N=2^n$. Στη συνέχεια, εφαρμόζεται μια κβαντική υπορουτίνα η οποία αντιστρέφει τη φάση των καταστάσεων $|i\rangle$ για τις οποίες $f(i)=1$. Έτσι, η νέα κατάσταση έχει ως εξής: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{f(i)} |i\rangle$. Η φάση $(-1)^{f(i)}$ ενσωματώνει τις πληροφορίες της συνάρτησης f στην υπέρθεση. Ακολούθως, εφαρμόζεται ο μετασχηματισμός Hadamard για να εισαγάγει συμβολή μεταξύ των τιμών του $f(i)$ στην υπέρθεση. Η συμβολή αναφέρεται στον τρόπο με τον οποίο οι πιθανότητες από διαφορετικές κβαντικές καταστάσεις προστίθενται ή ακυρώνονται μεταξύ τους λόγω των φάσεων τους. Ανάλογα με τις τιμές της συνάρτησης $f(x)$, οι φάσεις $(-1)^{f(x)}$ σε κάθε κατάσταση οδηγούν είτε σε ενίσχυση, όπου κάποιες καταστάσεις αποκτούν μεγαλύτερη πιθανότητα, είτε σε ακύρωση, όπου οι πιθανότητες κάποιων άλλων καταστάσεων μηδενίζονται. Μετά την εφαρμογή του μετασχηματισμού Hadamard, η κατάσταση γίνεται $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} (\sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{f(i)+i*j}) |j\rangle$, όπου $i*j$ το εσωτερικό γινόμενο των δυαδικών αναπαραστάσεων των i και j . Τέλος, διακρίνεται η παρατήρηση του αποτελέσματος, το οποίο εξαρτάται από το αν η $f(x)$ είναι σταθερή ή ισοσταθμισμένη. Αν είναι σταθερή, όλες οι τιμές του $(-1)^{f(i)}$ είναι ίδιες δημιουργώντας συμμετρία. Οι τιμές $|j\rangle$ για $j \neq 0$

μηδενίζονται, και το αποτέλεσμα είναι $|0\rangle$ με πιθανότητα 1. Αν, από την άλλη, είναι ισοσταθμισμένη, οι θετικές και αρνητικές συνεισφορές αλληλοαναιρούνται για το $|0\rangle$ και η μέτρηση δίνει ένα $|j\rangle \neq |0\rangle$ (Σάββας, 2022).

Ειδικότερα, θα αναλυθεί ένα παράδειγμα ανάλυσης των βημάτων του αλγορίθμου, χρησιμοποιώντας 2 qubits εισόδου. Η αρχική κατάσταση του συστήματος ορίζεται ως $|0\rangle^{\otimes n} \otimes |1\rangle$, επομένως στην προκειμένη περίπτωση είναι $|\psi_0\rangle = |00\rangle|1\rangle$. Στο επόμενο βήμα εφαρμόζεται η πύλη Hadamard σε όλα τα qubits και η κατάσταση γίνεται:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2} \sum_{x \in \{0,1\}^2} |x\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$$

Άρα για $n=2$ qubits έχουμε:

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2} (|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle).$$

Στη συνέχεια, εφαρμόζεται ο μετασχηματισμός oracle με την απεικόνιση $|x\rangle|y\rangle \rightarrow |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle$ και η κατάσταση γίνεται:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle).$$

Ακολούθως, η πύλη Hadamard θα εφαρμοστεί ξανά μόνο στα 2 qubits αυτή τη φορά, καθώς δεν μας αφορά το qubit ελέγχου. Ως εκ τούτου, χρησιμοποιώντας και τη σχέση $H^{\otimes n} |x\rangle = \frac{1}{2} \sum_{z \in \{0,1\}^2} (-1)^{x \cdot z} |z\rangle$, προκύπτει ότι:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{z \in \{0,1\}^n} \left(\sum_{x \in \{0,1\}^n} (-1)^{x \cdot z + f(x)} \right) |z\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle).$$

Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το γεγονός πως αν η $f(x)$ είναι σταθερή δίνει ίδια τιμή για όλες τις εισόδους, άρα η πιθανότητα το αποτέλεσμα να είναι $|00\rangle$ είναι 1. Αν, από την άλλη, η $f(x)$ είναι ισορροπημένη, τότε τα αποτελέσματα εξουδετερώνονται μεταξύ τους και το τελικό 0 που εξάγεται σημαίνει πως και η πιθανότητα για την κατάσταση $|00\rangle$ είναι επίσης 0 (Σάββας, 2022).

Για να γίνει πιο κατανοητό, ακολουθεί ένα παράδειγμα αναπαράστασης των βημάτων του αλγορίθμου με τη βοήθεια κυκλωμάτων. Έστω ότι για την επίλυση του προβλήματος της

συνάρτησης $f(x)$ με τον αλγόριθμο Deutsch, χρησιμοποιούμε δύο qubits. Το πρώτο θα χρησιμοποιηθεί για την είσοδο, ενώ το δεύτερο θα τοποθετηθεί πρώτα σε κατάσταση $|1\rangle$ και στη συνέχεια θα υποβληθεί σε επεξεργασία. Στο πρώτο βήμα εφαρμόζεται η πύλη Hadamard σε κάθε qubit και χρησιμοποιείται για να δημιουργήσει υπέρθεση των πιθανών καταστάσεων των qubits, παρέχοντας τη δυνατότητα εξέτασής τους ταυτόχρονα. Έτσι, η κατάσταση του συστήματος θα είναι:

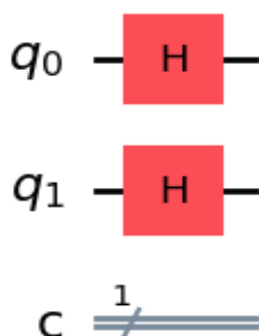
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle).$$

```
from qiskit import QuantumCircuit

qc = QuantumCircuit(2, 1)

qc.h(0)
qc.h(1)

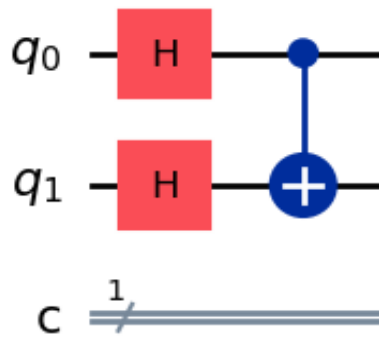
qc.draw('mpl')
```



Στο επόμενο βήμα εφαρμόζεται μια κβαντική υπορουτίνα που αλλάζει τη φάση των καταστάσεων με τη συνάρτηση $f(x)$ να επιστρέφει 1. Αυτή η υπορουτίνα ενσωματώνει τις πληροφορίες της συνάρτησης $f(x)$ στην κβαντική κατάσταση. Στο υπάρχον παράδειγμα, αυτό γίνεται με την εφαρμογή της πύλης CX.

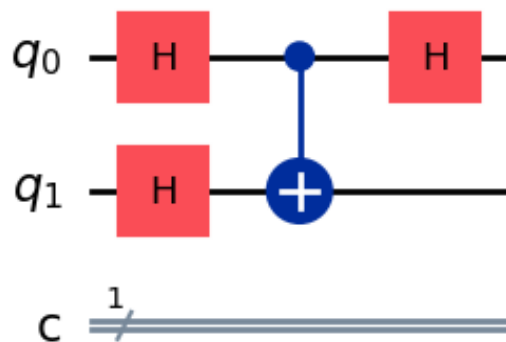
```
qc.cx(0, 1)

qc.draw('mpl')
```



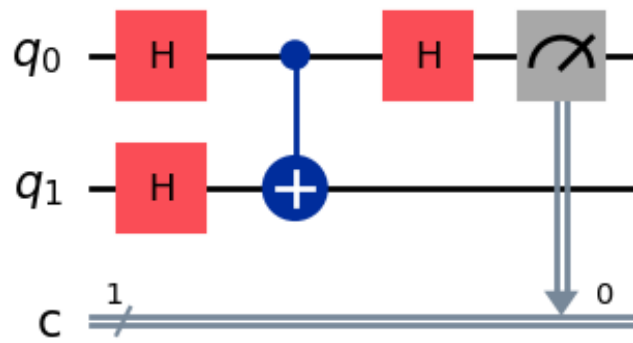
Έπειτα, εφαρμόζεται εκ νέου η πύλη Hadamard στο πρώτο qubit. Αυτό είναι ιδιαίτερα σημαντικό ούτως ώστε να υπολογιστεί αν η συνάρτηση $f(x)$ είναι σταθερή ή ισοσταθμισμένη.

```
qc.h(0)
qc.draw('mpl')
```



Στο τελευταίο βήμα μετράται το πρώτο qubit για να αποφασιστεί αν η συνάρτηση είναι σταθερή ή ισοσταθμισμένη. Αν το αποτέλεσμα της μέτρησης είναι $|0\rangle$, η συνάρτηση είναι σταθερή, ενώ αν είναι $|1\rangle$, η συνάρτηση είναι ισοσταθμισμένη.

```
qc.measure(0, 0)
qc.draw('mpl')
```



Bernstein-Vazirani:

Ο συγκεκριμένος κβαντικός αλγόριθμος δημιουργήθηκε το 1997 από τους Ethan Bernstein και Umesh Vazirani. Είναι γνωστός για τη συμβολή του στη λύση του προβλήματος της εύρεσης μιας άγνωστης δυαδικής ακολουθίας u μήκους n , όπου υπάρχει το δικαίωμα υποβολής ερωτημάτων της μορφής $q^*u \bmod 2$. Στόχος είναι να βρεθεί η ακολουθία u με τον ελάχιστο αριθμό ερωτημάτων (Σάββας, 2022).

Σε έναν κλασικό υπολογιστή, για να προσδιορίσουμε μια άγνωστη δυαδική ακολουθία u μήκους n , είναι απαραίτητο να κάνουμε τουλάχιστον n ερωτήματα, κάθε ένα από τα οποία αποκαλύπτει ένα bit πληροφορίας σχετικά με την u . Για παράδειγμα, έστω ότι $u=101$, τότε θα δημιουργηθούν τρία διαφορετικά ερωτήματα, τα $q_1=001$, $q_2=010$ και $q_3=100$, το καθένα εκ των οποίων αποκαλύπτει μόνο ένα bit πληροφορίας (Σάββας, 2022).

Το πρόβλημα αυτό ξεπερνάται με τη χρήση της κβαντικής υπολογιστικής. Κι αυτό διότι με τη χρήση του αλγορίθμου Bernstein-Vazirani, μπορεί να βρεθεί η ακολουθία u με μία μόνο κλήση στο U_{f_u} που υπολογίζει τη συνάρτηση $f_u(q) = q^*u \bmod 2$. Ο αλγόριθμος εκμεταλλεύεται τις ιδιότητες της υπέρθεσης και της παρέμβασης για να κωδικοποιήσει όλες τις πληροφορίες της ακολουθίας u σε μία μόνο

κατάσταση του συστήματος. Η υλοποίησή του ακολουθεί τα παρακάτω βήματα (Σάββας, 2022):

Πρώτα απ' όλα, δημιουργείται ένας καταχωρητής εισόδου με n qubits ξεκινώντας από την κατάσταση $|0\rangle^{\otimes n}$ και ένα ancilla qubit από την κατάσταση $|1\rangle$. Ο καταχωρητής είναι αυτός στον οποίο θα αποθηκεύονται οι πληροφορίες, ενώ το ancilla qubit είναι ένα βοηθητικό qubit που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της συνάρτησης $f_u(q) = q * u \bmod 2$ και ξεκινάει από την κατάσταση $|1\rangle$ γιατί η πράξη XOR που εκτελείται από την U_{f_u} το απαιτεί, ώστε να αντιστρέψει την κατάστασή του αν $f_u(q) = 1$ (Σάββας, 2022).

Στη συνέχεια, υπάρχει η εφαρμογή της πύλης Hadamard σε όλα τα qubits εισόδου. Η κατάσταση τους μετά το μετασχηματισμό Hadamard είναι $\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{q=0}^{2^n-1} |q\rangle$. Η εφαρμογή του, όμως, ισχύει και για το ancilla qubit με αποτέλεσμα η κατάστασή του από $|1\rangle$ να αλλάζει σε $\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$ (Σάββας, 2022).

Στο τρίτο βήμα, γίνεται χρήση ενός oracle. Πρόκειται για έναν κβαντικό μετασχηματισμό ο οποίος υπολογίζει τη συνάρτηση $f_u(q) = q * u \bmod 2$ και αλλάζει τη φάση των ερωτημάτων q που εισάγονται βάσει της άγνωστης δυαδικής ακολουθίας u , με αποτέλεσμα να ισχύει: $|q\rangle \rightarrow (-1)^{f_u(q)} |q\rangle$. Μετά από τη διαδικασία αυτή, η κατάσταση του συστήματος είναι η ακόλουθη:

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{q=0}^{2^n-1} (-1)^{q * u} |q\rangle \quad (\text{Σάββας, 2022}).$$

Έπειτα, εφαρμόζεται εκ νέου η πύλη Hadamard σε όλα τα qubits εισόδου. Μετά την εφαρμογή του oracle, η κατάσταση του κβαντικού συστήματος περιέχει πληροφορίες για το u , κωδικοποιημένες στις φάσεις των qubits. Η πύλη Hadamard εφαρμόζεται ξανά για να αντιστρέψει τη διαδικασία δημιουργίας υπέρθεσης. Έτσι, αντί να υπάρχουν διάσπαρτες φάσεις, η πληροφορία συγκεντρώνεται σε μία μόνο κατάσταση, αυτή της $|u\rangle$ (Σάββας, 2022).

Τέλος, διακρίνεται και το στάδιο της μέτρησης των qubits. Μετά τη δεύτερη εφαρμογή της πύλης Hadamard, τα n qubits περιέχουν πληροφορίες που επιτρέπουν την ανάκτηση της μυστικής

συμβολοσειράς s με βεβαιότητα. Η βεβαιότητα προκύπτει από το γεγονός πως όταν εφαρμόζεται η πύλη Hadamard στα κύρια qubits μετά τον oracle, μετατρέπονται σε μια κατάσταση που ταιριάζει ακριβώς με τη μυστική συμβολοσειρά s . Ως εκ τούτου, η μέτρησή τους αποκαλύπτει πάντα το σωστό αποτέλεσμα (Σάββας, 2022).

Για να γίνουν πιο κατανοητά τα βήματα του αλγορίθμου, παρατίθεται το ακόλουθο παράδειγμα. Έστω ότι είναι μια μυστική συμβολοσειρά τριών bits, η $s=\{101\}$. Η αρχική κατάσταση του κυκλώματος αποτελείται από τρία κύρια qubits που βρίσκονται σε κατάσταση $|0\rangle$ και ένα ancilla qubit το οποίο είναι σε κατάσταση $|1\rangle$. Επομένως, η αρχική κατάσταση του συστήματος είναι (Σάββας, 2022):

$$|000\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ακολουθως, εφαρμόζεται η πύλη Hadamard σε όλα τα qubits. Έτσι, μετατρέπεται κάθε qubit από τις καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ σε υπέρθεση. Επομένως, ισχύει ότι $H|0\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$ και $H|1\rangle = \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$. Η κατάσταση του συστήματος γίνεται ως εξής:

$$H^{\otimes 3} = H \otimes H \otimes H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}
\text{Άρα } H^{\otimes 3} |000\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}} (|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle + |011\rangle \\
&\quad + |100\rangle + |101\rangle + |110\rangle + |111\rangle) \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} |x\rangle
\end{aligned}$$

Στο επόμενο βήμα, γίνεται η εφαρμογή του oracle. Ο συγκεκριμένος μετασχηματισμός είναι αυτός που υλοποιεί τη συνάρτηση $f(x) = x^*s \bmod 2$, έχοντας $s=\{101\}$. Ο ρόλος του oracle είναι να εφαρμόσει μια πύλη CX στα qubits που αντιστοιχούν στο 1 της s. Η συνάρτηση $f(x)$ αναστρέφει την κατάσταση του ancilla qubit αν το αποτέλεσμα της πράξης x^*s είναι 1. Το κύκλωμα μπορεί να γραφεί ως εξής (Σάββας, 2022):

$$\frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} |x\rangle \rightarrow \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} (-1)^{f(x)} |x\rangle$$

Έχοντας υπόψη, όμως, ότι $f(x)=x^*s$ η διαδικασία αυτή μπορεί να γραφεί και ως εξής:

$$\frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} (-1)^{x^*s} |x\rangle$$

Επομένως, είναι:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} (-1)^{x*s} |x\rangle = \\
& = \frac{1}{2\sqrt{2}} ((-1)^{000*101} |000\rangle \\
& + (-1)^{001*101} |001\rangle + \dots + (-1)^{111*101} |111\rangle) \\
& = \frac{1}{2\sqrt{2}} (|000\rangle - |001\rangle + |010\rangle - |011\rangle - |100\rangle + |101\rangle - |110\rangle + |111\rangle) \\
& = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Στη συνέχεια, εφαρμόζεται για δεύτερη φορά η πύλη Hadamard στα πρώτα 3 qubits. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να δημιουργείται μία κατάσταση η οποία επιτρέπει την ανάκτηση της μυστικής συμβολοσειράς s . Μετά την εφαρμογή της πύλης, η κατάσταση του συστήματος είναι η εξής:

$$\begin{aligned}
& H^{\otimes 3} \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{x \in \{0,1\}^3} (-1)^{x*s} |x\rangle = \\
& = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$= \left(\frac{1}{2\sqrt{2}}\right)^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= |101\rangle$$

Τέλος, γίνεται η μέτρηση των qubits. Τα τρία πρώτα θα αποδώσουν τη μυστική συμβολοσειρά $s=\{101\}$ με απόλυτη ακρίβεια (Σάββας, 2022).

Ακολουθεί και η δημιουργία του κβαντικού κυκλώματος για το παράδειγμα που παρατέθηκε για τη μυστική συμβολοσειρά $s=\{101\}$.

```
from qiskit import QuantumCircuit

s = '101'

n = len(s)
bv_circuit = QuantumCircuit(n + 1, n)

bv_circuit.x(n)
```

```

bv_circuit.h(n)

for qubit in range(n):
    bv_circuit.h(qubit)

for qubit, bit in enumerate(reversed(s)):
    if bit == '1':
        bv_circuit.cx(qubit, n)

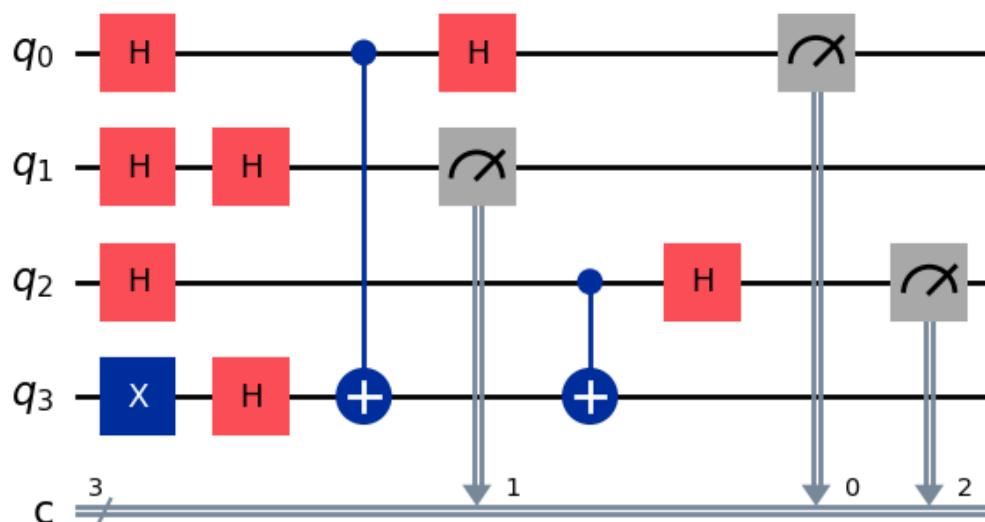
for qubit in range(n):
    bv_circuit.h(qubit)

bv_circuit.measure(range(n), range(n))

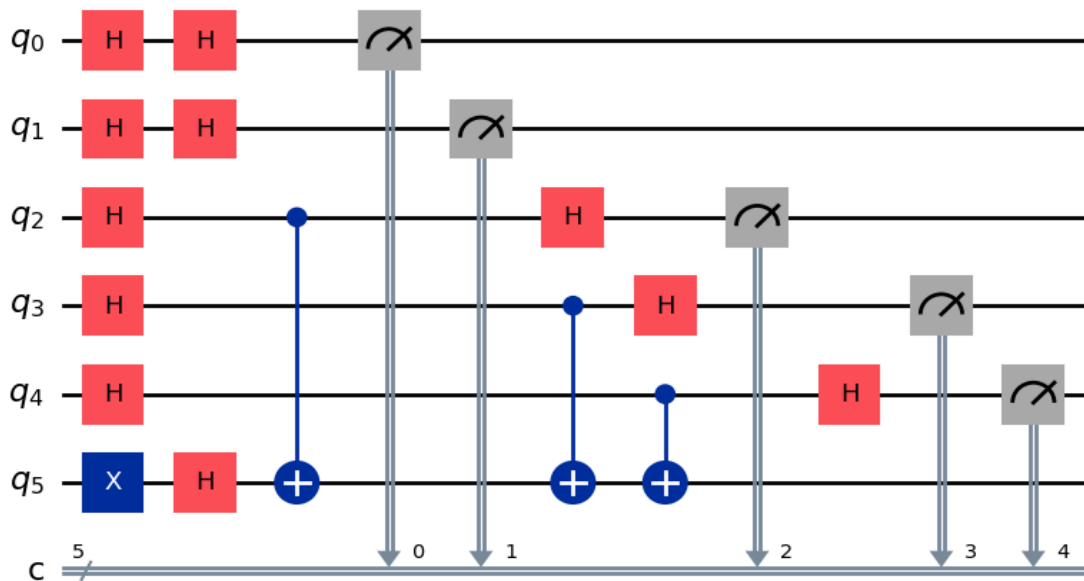
print("Bernstein-Vazirani Κβαντικό Κύκλωμα:")
print(bv_circuit)

bv_circuit.draw('mpl')

```



Επιπρόσθετα, ακολουθεί η περίπτωση κβαντικού κυκλώματος μιας μυστικής συμβολοσειράς $s=\{11100\}$.



Ο αλγόριθμος Bernstein-Vazirani, επίσης, είναι ιδιαίτερα χρήσιμος και στην αναζήτηση συμβολοσειρών. Στη διαδικασία της αναζήτησης, κάθε χαρακτήρας της συμβολοσειράς μετατρέπεται σε bits, ώστε να αξιοποιηθεί από τον αλγόριθμο και στη συνέχεια αντιστοιχίζονται στους αντίστοιχους χαρακτήρες του κωδικού ASCII (Σάββας, 2022). Ο παρακάτω κώδικας παρουσιάζει τη γενική διαδικασία αναζήτησης της συμβολοσειράς, ενσωματώνοντας τις βασικές λειτουργίες του αλγορίθμου.

```
"""
0. Είσοδος συμβολοσειράς s και διαχωρισμός της σε χαρακτήρες.
1. Για κάθε χαρακτήρα x:
    - Μετατροπή του σε αριθμό nx
    - Μετατροπή του nx σε δυαδικό bnx
    - Ανακάλυψη του bnx σε b_isit
    - Μετατροπή του σε δεκαδικό d_isit
    - Μετατροπή του σε χαρακτήρα is_x
"""

def DecimalToBinary(n):
    return bin(n).replace("0b", "")

def BinaryToDecimal(n):
    return int(n, 2)

from qiskit import QuantumCircuit, execute, Aer
from qiskit.visualization import plot_histogram
```

```

s = input("Κρυφή συμβολοσειρά: ")

is_s = ""

for x in s:
    nx = ord(x)
    bnx = DecimalToBinary(nx)
    n = len(bnx)

    circuit = QuantumCircuit(n + 1, n)
    circuit.h(range(n))
    circuit.x(n)
    circuit.h(n)
    circuit.barrier()

    for i, digit in enumerate(reversed(bnx)):
        if digit == "1":
            circuit.cx(i, n)
    circuit.barrier()

    circuit.h(range(n))
    circuit.barrier()

    circuit.measure(range(n), range(n))

    simulator = Aer.get_backend('qasm_simulator')
    result = execute(circuit, backend=simulator, shots=1).result()
    counts = result.get_counts()

    b_isit = list(counts.keys())[0]
    d_isit = BinaryToDecimal(str(b_isit))
    is_x = chr(d_isit)
    is_s += is_x

print(is_s)

```

Για παράδειγμα, έστω ότι η μυστική συμβολοσειρά s είναι η “HELLO”. Αρχικά, πρέπει η συγκεκριμένη λέξη να μετατραπεί σε bits. Κάθε χαρακτήρας του ASCII κωδικοποιείται σε 8 bits, οπότε η λέξη “HELLO” θα μετατραπεί στους εξής ASCII κωδικούς:

- H → 72 → 01001000
- E → 69 → 01000101
- L → 76 → 01001100
- L → 76 → 01001100
- O → 79 → 01001111

Επομένως, η μυστική συμβολοσειρά s γίνεται:

$s=\{01001000\ 01000101\ 01001100\ 01001100\ 01001111\}$.

Έπειτα, εφαρμόζονται όλα τα βήματα του αλγορίθμου, όπως περιγράφηκαν προηγουμένως. Με τη μέτρηση θα αποκαλυφθεί η δυαδική αναπαράσταση της λέξης και μετά υπάρχει η δυνατότητα να μετατραπεί ξανά σε χαρακτήρες ASCII ώστε να γίνει ανάκτηση της αρχικής της μορφής (Σάββας, 2022).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΜΑΘΗΣΗ

4.1 Κβαντική Μηχανική Μάθηση – Εισαγωγή

Η ραγδαία ανάπτυξη της μηχανικής μάθησης και η εισαγωγή της σε ολόένα και περισσότερους κλάδους, έχει συμβάλλει στη συνεχή πρόοδό τους και στην αποτελεσματική επίλυση τόσο καθημερινών όσο και πιο πολύπλοκων προβλημάτων. Παρά την αυξανόμενη υπολογιστική ισχύ τα τελευταία χρόνια, χάρη στη συνεχή πρόοδο των επεξεργαστών και των GPU, οι ανάγκες της μηχανικής μάθησης, συχνά, ξεπερνούν τις δυνατότητες των κλασικών υπολογιστών. Το γεγονός αυτό οφείλεται στον τεράστιο όγκο δεδομένων που απαιτείται για την εκπαίδευση μοντέλων, ο οποίος συνεχώς αυξάνεται. Αν και ο Νόμος του Moore, που προβλέπει τον διπλασιασμό της επεξεργαστικής ισχύος ανά δύο χρόνια, αποτέλεσε σημαντικό παράγοντα προόδου, οι φυσικοί περιορισμοί των παραδοσιακών τεχνολογιών κάνουν απαραίτητη την αναζήτηση νέων λύσεων. Έτσι, η κβαντική υπολογιστική θεωρείται ως η ιδανικότερη. Μπορεί να είναι σε αρχικό στάδιο αυτή τη στιγμή, αλλά ήδη

προαναγγέλλεται ως μια επαναστατική τεχνολογία που θα επηρεάσει σημαντικά την επιστήμη και την κοινωνία στο μέλλον. Οι ιδιότητές της, όπως η υπέρθεση και η διεμπλοκή, δίνουν τη δυνατότητα στους κβαντικούς υπολογιστές να εκτελούν πολλαπλές πράξεις ταυτόχρονα, μειώνοντας δραστικά το χρόνο υπολογισμού πολυπλοκότερων προβλημάτων (Σάββας, 2022). Η κβαντική μηχανική μάθηση (QML) είναι ένας σχετικά νέος κλάδος που συνδυάζει τη μηχανική μάθηση με την κβαντική υπολογιστική, εξετάζοντας τα πλεονεκτήματα της χρήσης κβαντικών υπολογιστών για εργασίες μηχανικής μάθησης. Αναφέρθηκε για πρώτη φορά το 2013 (Lloyd, 2013), αν και είναι γεγονός ότι οι έρευνες για συνδυασμό της κβαντικής υπολογιστικής και της μηχανικής μάθησης είχαν ξεκινήσει αρκετά νωρίτερα (Kak, 1995; Smith et al., 1998; Matsui et al., 2000; Zhou et al., 2006). Ένα χρόνο αργότερα, το 2014, ο Wittek παρουσίασε μια σύνοψη ορισμένων πρώιμων μελετών που αφορούσαν τον συγκεκριμένο τομέα (Wittek, 2014). Αυτή τη στιγμή, η κβαντική μηχανική μάθηση έχει αναδειχθεί ως ένα σημαντικό υποπεδίο της κβαντικής υπολογιστικής.

Κύριος στόχος της είναι η αξιοποίηση κβαντικών συστημάτων για τη βελτιστοποίηση της μηχανικής μάθησης, παρέχοντας ταχύτερες και αποδοτικότερες λύσεις από τους κλασικούς υπολογιστές. Αν και πρακτικά η εφαρμογή της είναι ακόμα περιορισμένη λόγω του θορύβου και του περιορισμένου αριθμού qubits στους σημερινούς κβαντικούς υπολογιστές, η συνεχής πρόοδος υποδηλώνει ότι σύντομα θα υπάρξουν σημαντικά επιτεύγματα (Σάββας, 2022).

Οι κβαντικοί υπολογιστές μέσης κλίμακας, γνωστοί ως Noisy Intermediate Scale Quantum (NISQ), χαρακτηρίζονται από περιορισμένο αριθμό qubits και επηρεάζονται από θόρυβο. Αυτή η φάση ανάπτυξης περιλαμβάνει κβαντικές συσκευές που θα είναι διαθέσιμες τα επόμενα χρόνια, αλλά ακόμα στερούνται πλήρους σταθερότητας και αξιοπιστίας. Ο όρος “NISQ” αναφέρεται σε αυτή τη μεταβατική περίοδο, κατά την οποία οι κβαντικές συσκευές παραμένουν ευάλωτες στο θόρυβο και στην έλλειψη ανεκτικότητας σε σφάλματα. Η ανάγκη για αξιόπιστες συσκευές είναι ζωτικής σημασίας, κυρίως όσον αφορά τη χρήση τους στον τομέα της βιομηχανίας, καθώς το στην παρούσα φάση

απαιτούνται λύσεις για την εξάλειψη του θορύβου. Η επόμενη σημαντική εξέλιξη θα είναι οι κβαντικοί υπολογιστές ανεκτικοί σε σφάλματα (Fault-Tolerant Quantum Computing - FTQC), οι οποίοι θα ξεπεράσουν τα τρέχοντα εμπόδια (Preskill, 2018).

Στον τομέα της κβαντικής μηχανικής μάθησης, ένα μεγάλο μέρος της έρευνας επικεντρώνεται σε υβριδικές προσεγγίσεις, οι οποίες συνδυάζουν κβαντικούς και κλασικούς υπολογιστές για τη βελτίωση της απόδοσης. Κατά κύριο λόγο χρησιμοποιούνται κβαντικοί – κλασικοί αλγόριθμοι ή κβαντικοί μεταβλητοί αλγόριθμοι ή παραμετροποιημένα κβαντικά κυκλώματα. Συχνά, αυτές οι μέθοδοι αξιοποιούν πύλες που εκτελούνται συνδυαστικά από κβαντικούς και κλασικούς υπολογιστές. Η χρήση ενός τέτοιου υβριδικού μοντέλου είναι δυνατό να εφαρμοστεί τόσο σε NISQ όσο και σε άλλους υπολογιστές βραχυπρόθεσμα προσδίδοντας αξιοπιστία και ταχύτητα στην παροχή λύσεων (Batra, 2021).

Οι συνεργασίες μεταξύ εταιρειών που δραστηριοποιούνται στην κβαντική υπολογιστική και επιχειρήσεων, έχουν οδηγήσει στην ανάπτυξη αρκετών open source λογισμικών για την ανάπτυξη εφαρμογών QML, όπως τα PennyLane, TensorFlow Quantum και Qiskit, τα οποία έχουν γνωρίσει ιδιαίτερη δημοφιλία. Οι Schuld και Petruccione, το 2021, παρουσίασαν τέσσερις διαφορετικούς συνδυασμούς κβαντικής υπολογιστικής και μηχανικής μάθησης. Αυτοί οι συνδυασμοί κατηγοριοποιούνται βάσει του τύπου δεδομένων (κλασικά ή κβαντικά) και του τύπου συσκευών (κλασικές ή κβαντικές).

- Κατηγορία CC: Αναφέρεται σε κλασικά δεδομένα που επεξεργάζονται από κλασικές συσκευές. Οι κλασικές τεχνικές μηχανικής μάθησης που αντλούν έμπνευση από την κβαντική υπολογιστική, ανήκουν σε αυτήν την κατηγορία. Για παράδειγμα, τα δίκτυα tensor, τα οποία αναπτύχθηκαν για κβαντικά συστήματα πολλών σωμάτων, εφαρμόστηκαν σε νευρωνικά δίκτυα (NN) (Stoudenmire & Schwab, 2016).

- Κατηγορία QC: Αναφέρεται σε κλασικές προσεγγίσεις μηχανικής μάθησης που βασίζονται σε κβαντικά δεδομένα. Παραδείγματα αυτών των μοντέλων περιλαμβάνουν τη χρήση νευρωνικών δικτύων για την περιγραφή κβαντικών καταστάσεων (Torlai et al., 2018) και την ταξινόμηση κβαντικών καταστάσεων που παράγονται από διάφορες πηγές.

- Κατηγορία CQ: Οι αλγόριθμοι μηχανικής μάθησης λειτουργούν σε κβαντικές συσκευές χρησιμοποιώντας κλασικά δεδομένα. Οι περισσότερες εφαρμογές QML κατατάσσονται σε αυτήν την κατηγορία, καθώς τα περισσότερα δεδομένα στη φύση είναι κλασικά. Αυτή η κατηγορία ενσωματώνει τον παράγοντα QE (Quantum Encoding), που αναφέρεται στην κωδικοποίηση κλασικών δεδομένων σε μορφή κβαντικών καταστάσεων, αυξάνοντας την πολυπλοκότητα του μοντέλου. Ο όρος "κβαντική μηχανική μάθηση" συνδέεται συνήθως με την κατηγορία CQ (Schuld, Petruccione, 2021).

- Κατηγορία QQ: Αναφέρεται σε αλγόριθμους μηχανικής μάθησης που λειτουργούν σε κβαντικές συσκευές και χρησιμοποιούν κβαντικά δεδομένα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι όταν οι μετρήσεις ενός κβαντικού συστήματος σε ένα φυσικό πείραμα χρησιμεύουν ως άμεση είσοδος σε μια κβαντική συσκευή. Οι Cong et al. (2019) έδειξαν ένα παράδειγμα για την επίλυση προβλημάτων πολλών σωμάτων κβαντικής φύσης. Ένα επιπρόσθετο παράδειγμα είναι ένας κβαντικός υπολογιστής ο οποίος προσομοιώνει ένα κβαντικό σύστημα και έπειτα αναλύει την τελική κατάσταση ή μεταδίδει δεδομένα σε άλλον κβαντικό υπολογιστή για περαιτέρω ανάλυση. Η QQ συνδέεται με την CQ, διαφέροντας μόνο στο QE στοιχείο. Οι αλγόριθμοι CQ μπορούν εύκολα να μετατραπούν σε QQ με την αφαίρεση του QE.

Η κβαντική υπολογιστική βασίζεται σε δύο κύριες μεθόδους: την Universal Quantum Computer (UQC) και την Quantum Annealing (QA). Στην πρώτη περίπτωση, η υλοποίηση των αλγορίθμων γίνεται μέσω λογικών κβαντικών κυκλωμάτων πύλης, με τις πύλες αυτές να είναι αναστρέψιμες. Πρέπει να αναφερθεί, επίσης, ότι πολλές εφαρμογές της κβαντικής μηχανικής μάθησης βασίζονται στο UQC, ενώ ο μέγιστος αριθμός qubits που είναι εφικτό να ενσωματωθούν αυτή τη στιγμή δεν ξεπερνά τα 100. Από την άλλη, όσον αφορά το QA, χρησιμοποιείται κυρίως για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης. Οι καταστάσεις του περιγράφονται μέσω ενεργειακών επιπέδων και αποσκοπούν στην εύρεση της βέλτιστης λύσης. Για παράδειγμα, συστήματα όπως αυτά που έχει κατασκευάσει η D-Wave, έχουν καταφέρει να δημιουργήσουν πάνω από 2.000 qubits και έχουν αποδειχθεί ιδιαίτερα αποτελεσματικά σε τέτοιου είδους προβλήματα. Η πλειοψηφία των πειραμάτων έχουν πραγματοποιηθεί ιδίως με τη χρήση λογισμικών ανοικτού κώδικα της python, το Qiskit από την IBM και το Cirq από την Google. Επιπλέον, η Amazon και η Microsoft παρέχουν εφαρμογές cloud, όπου οι ερευνητές μπορούν να εκτελούν κβαντικούς αλγορίθμους σε διαφορετικούς κβαντικούς επεξεργαστές (Batra, 2021).

Η ανάπτυξη και εφαρμογή των πρώτων αλγορίθμων QML προχώρησε ελέω των δυνατοτήτων που προσφέρει το κβαντικό πλεονέκτημα. Οι αλγόριθμοι αυτοί έχουν ως βάση τεχνικές απόστασης, όπως οι Quantum k-nearest, k-means και k-medoids. Ωστόσο, ένα βασικό πρόβλημα που προκύπτει σε αυτή την περίπτωση είναι η κωδικοποίηση των πραγματικών δεδομένων, καθώς συχνά απαιτείται πολύ μεγάλος χώρος υπολογιστικής μνήμης, γεγονός που καθιστά την εκμάθηση υπερβολικά δύσκολη. Για την αποτελεσματική αντιμετώπιση του ζητήματος αυτού, έχουν αναπτυχθεί τεχνικές μείωσης των διαστάσεων, όπως η Principal Component Analysis (PCA). Ο περιορισμένος αριθμός των qubits και η ανάγκη μείωσης της πολυπλοκότητας αποτελούν καίρια θέματα στην QML, δεδομένου ότι οι κλασικές μέθοδοι μάθησης είναι ήδη αρκετά αποτελεσματικές. Το αντικείμενό της είναι η ανακάλυψη πολύπλοκων μοντέλων μάθησης έναντι των υπολογισμών από τους κλασικούς υπολογιστές (Batra, 2021).

Μια εξαιρετικά ενδιαφέρουσα μέθοδός της είναι και τα κβαντικά νευρωνικά δίκτυα (Quantum Neural Networks - QNN). Διαφορετικές προσεγγίσεις περιλαμβάνουν το Quantum Perceptron, το Multilayer QNN, τα Quantum Convolutional Neural Network (QCNN), το Quantum Boltzmann Machine (QBM), καθώς και το Quantum Restricted Boltzmann Machine (QRBM). Η βασικότερη πρόκληση στην ανάπτυξη των QNN είναι ότι η κβαντομηχανική είναι γραμμική, σε αντίθεση με τα νευρωνικά δίκτυα τα οποία δημιουργούνται ως μη γραμμικά. Πιθανοτικές και στοχαστικές μέθοδοι μηχανικής μάθησης εφαρμόζονται σε κβαντικές συσκευές ούτως ώστε να αξιοποιηθούν τα πιθανολογικά αποτελέσματα του QC, των μεθόδων Quantum Bayesian και του Hidden Quantum Markov. Κάποιες άλλες ενδιαφέρουσες προσεγγίσεις που αφορούν την QML είναι η κβαντική ενίσχυση, οι κβαντικοί περίπατοι και τα δίκτυα Τενσόρ (Kwak et al,2021).

4.2 Κβαντικοί Αλγόριθμοι Μηχανικής Μάθησης

Μείωση Κβαντικής Διάστασης: Η κβαντική μείωση διαστάσεων χρησιμοποιείται κυρίως με σκοπό τη μείωση του μεγέθους δεδομένων μέσω της μείωσης του αριθμού των μεταβλητών, χωρίς, ωστόσο, να χάνονται σημαντικές πληροφορίες. Η διαδικασία αυτή αποδεικνύεται ιδιαίτερα χρήσιμη, καθώς η μάθηση σε μεγάλες διαστάσεις είναι αρκετά περίπλοκη, αφού εμπεριέχονται και πληροφορίες θορύβου, οι οποίες είναι ικανές να αυξήσουν το σφάλμα. Οι δύο βασικότεροι αλγόριθμοι για τη μείωση διαστάσεων είναι η Κβαντική Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών (QPCA) με πολυωνυμικό χρόνο και η Κβαντική Γραμμική Διακριτική Ανάλυση (QLDA). Στην πρώτη περίπτωση η μάθηση γίνεται χωρίς επίβλεψη. Ορίζει τα χαρακτηριστικά τα οποία έχουν τη μεγαλύτερη διακύμανση, κάνει χρήση του πίνακα πυκνότητας κανονικοποιημένων μεταβλητών και υπολογίζει τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα. Στην περίπτωση του QLDA η μάθηση

γίνεται με επίβλεψη. Χρησιμοποιεί τις ετικέτες δεδομένων ενώ ο στόχος είναι η ομαδοποίηση όσων δεδομένων βρίσκονται στην ίδια κλάση και παράλληλα ο διαχωρισμός αυτών που βρίσκονται σε διαφορετικές (Batra, 2021).

Ακολουθεί ένα παράδειγμα του συγκεκριμένου αλγορίθμου μέσω απεικόνισης:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

np.random.seed(42)
data_3d = np.random.rand(100, 3)

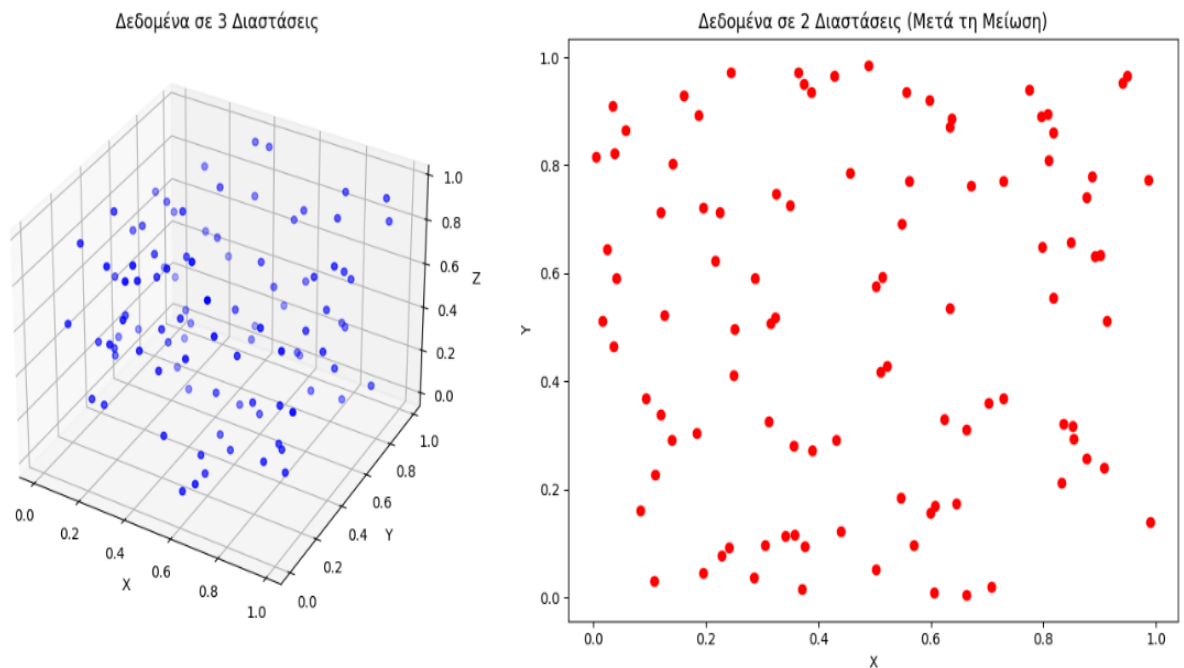
data_2d = data_3d[:, :2]

fig = plt.figure(figsize=(14, 6))

ax1 = fig.add_subplot(121, projection='3d')
ax1.scatter(data_3d[:, 0], data_3d[:, 1], data_3d[:, 2], c='blue', marker='o')
ax1.set_title("Δεδομένα σε 3 Διαστάσεις")
ax1.set_xlabel("X")
ax1.set_ylabel("Y")
ax1.set_zlabel("Z")

ax2 = fig.add_subplot(122)
ax2.scatter(data_2d[:, 0], data_2d[:, 1], c='red', marker='o')
ax2.set_title("Δεδομένα σε 2 Διαστάσεις (Μετά τη Μείωση)")
ax2.set_xlabel("X")
ax2.set_ylabel("Y")

plt.tight_layout()
plt.show()
```



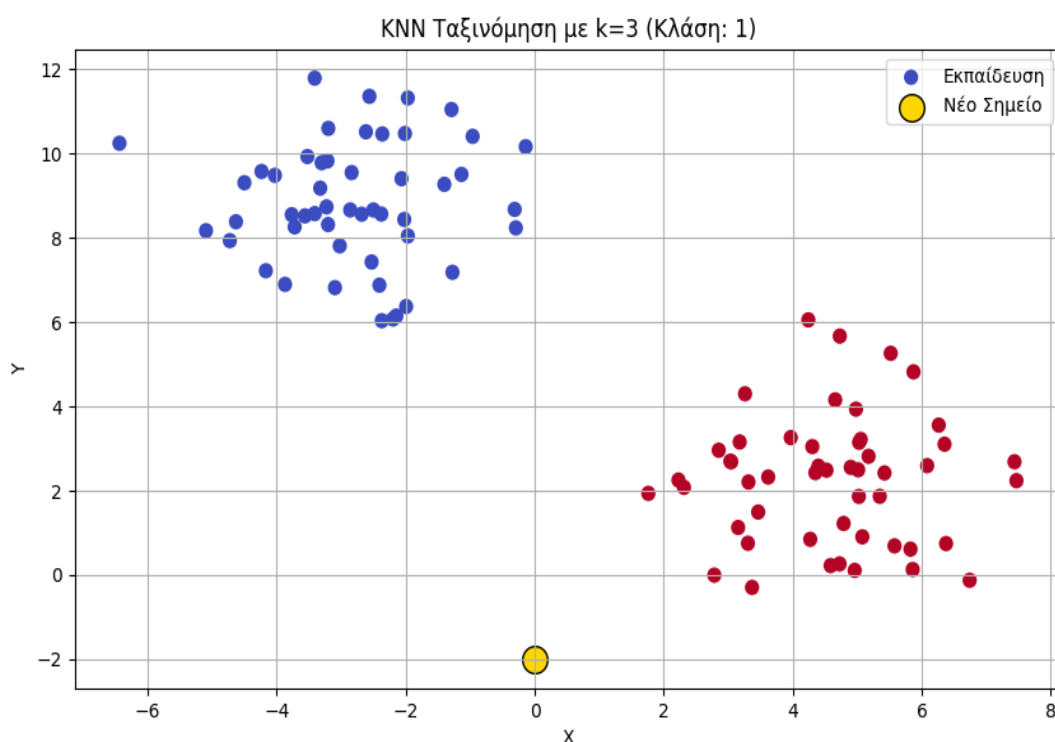
Σχήμα 1: Απεικόνιση της μείωσης κβαντικής διάστασης

Στο σχήμα αυτό παρουσιάζονται δεδομένα σε τρεις διαστάσεις, τα οποία μειώνονται σε δύο διαστάσεις χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της Μείωσης κβαντικής διάστασης.

Κβαντικός k-πλησιέστερος γείτονας: Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος αποτελεί μία από τις πιο απλές αλλά και πιο αποδοτικές μεθόδους ταξινόμησης, ενώ παράλληλα μπορεί να χρησιμοποιηθεί και σε αρκετές περιπτώσεις για εργασίες μηχανικής μάθησης. Η βασική του αποστολή έχει να κάνει με την αποδοτική αξιολόγηση της κλασικής απόστασης μέσω ενός κβαντικού αλγορίθμου. Χρησιμοποιεί διάφορες μετρικές απόστασης, όπως το εσωτερικό γινόμενο, η Ευκλείδεια απόσταση ή η απόσταση Hamming. Ως επί το πλείστον, χρησιμοποιείται η τεχνική *swipe-test*, η οποία υπολογίζει την ακρίβεια ανάμεσα σε δύο κβαντικές καταστάσεις, παρά τη χρήση διαφορετικών μεθόδων κβαντικής ενσωμάτωσης. Οι προσεγγίσεις που έχουν εφαρμοστεί έχουν καταφέρει να μειώσουν σε μεγάλο βαθμό την υπολογιστική χρονική πολυπλοκότητα του κλασικού αλγορίθμου KNN $O(n \times m)$, όπου m είναι ο

αριθμός των δεδομένων εκπαίδευσης και η εκείνος των διαστάσεων στο σύνολο εκπαίδευσης. Όσον αφορά το πρώτο μοντέλο, η χρονική πολυπλοκότητα προσδιορίζεται ως $O(R\sqrt{n \times m})$ και για το τελευταίο $O(n^3)$, η οποία εξαρτάται αποκλειστικά από τη διάσταση. Το πρώτο και το δεύτερο χρησιμοποιούν συνημιτονική απόσταση, το τρίτο απόσταση Hamming, ενώ όλα τα υπόλοιπα swipe-test (Batra, 2021).

Στο ακόλουθο σχήμα παρουσιάζεται μια γενική απεικόνιση της KNN ταξινόμησης:



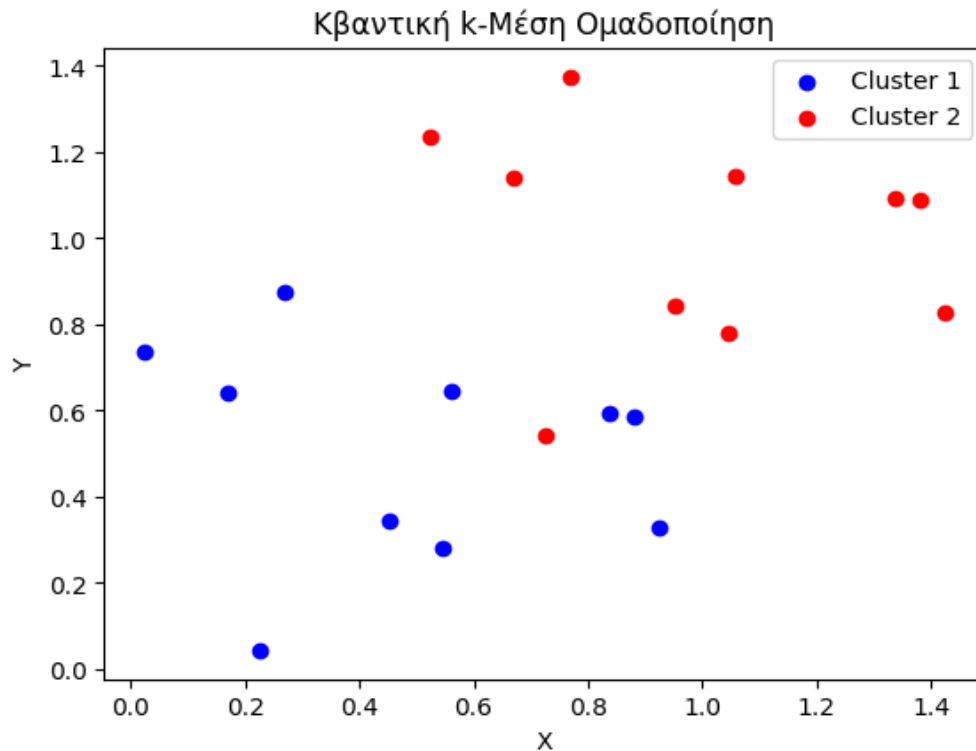
Σχήμα 2: Απεικόνιση της KNN ταξινόμησης με k=3

Στο παραπάνω σχήμα υπάρχουν τα δεδομένα σε δύο κλάσεις με διαφορετικά χρώματα (κόκκινο, μπλε), το νέο σημείο προς ταξινόμηση με κίτρινο και η προβλεπόμενη κλάση του νέου σημείου βάσει του αριθμού k πλησιέστερων γειτόνων.

Ο κώδικας που χρησιμοποιήθηκε για τη δημιουργία του Σχήματος 2 παρατίθεται στο Παράρτημα Α.

Κβαντική k-μέση/k-διάμεσος: Ο κβαντικός αλγόριθμος k-means είναι μία μέθοδος μηχανικής μάθησης χωρίς επίβλεψη, που στοχεύει στη διαίρεση αντικειμένων σε k συστάδες. Κάθε στοιχείο του συνόλου δεδομένων ανήκει στο cluster του οποίου η απόσταση από το κέντρο είναι η μικρότερη. Όπως και στην περίπτωση των κβαντικών k-πλησιέστερων γειτόνων, έτσι και στην προκειμένη, η μέτρηση της απόστασης είναι μια αρκετά χρονοβόρα διαδικασία. Σε αντίθεση με τον κλασικό αλγόριθμο k-means για τον οποίο απαιτείται πολυωνυμικός χρόνος, η κβαντική του υπόσταση χρειάζεται λογαριθμικό χρόνο. Είναι σημαντικό να αναφερθεί πως για όλες τις παραλλαγές του κβαντικού k-means χρησιμοποιούνται οι εξής συναρτήσεις: swar-test, υπολογισμός απόστασης και βελτιστοποίηση Grover (αναζήτηση του πλησιέστερου μέσου όρου), όπου η μέθοδος μέτρησης της απόστασης είναι διαφορετική. Μια αρκετά δημοφιλής παραλλαγή του αλγορίθμου αυτού είναι η k-διάμεσος. Σε αυτή την παραλλαγή γίνεται υπολογισμός των διαμέσων αντί των μέσων όρων της κάθε συστάδας (Batra, 2021).

Στο παρακάτω σχήμα παρατίθεται μια γενική απεικόνιση του αλγορίθμου k-means:



Σχήμα 3: Απεικόνιση του κβαντικού k-means με δύο clusters

Στο παραπάνω σχήμα διακρίνονται δύο clusters. Χρησιμοποιούνται τέσσερα qubits και εφαρμόζεται η πύλη Hadamard. Επιπλέον, εφαρμόζονται δύο πύλες CNOT για να προσομοιωθεί η λειτουργία του k-means.

Ο κώδικας που χρησιμοποιήθηκε για τη δημιουργία του Σχήματος 3 παρατίθεται στο Παράρτημα Β.

Κβαντικά νευρωνικά δίκτυα: Τα κβαντικά νευρωνικά δίκτυα (QNN) είναι ένα αρκετά σημαντικό κεφάλαιο στην κβαντική μηχανική μάθηση. Σε αντίθεση με άλλους αλγορίθμους, χρησιμοποιούνται τόσο στη μάθηση με επίβλεψη όσο και στη μάθηση χωρίς επίβλεψη. Ως η μεγαλύτερη πρόκλησή τους παρουσιάζεται η διαφορά ανάμεσα στη μη γραμμικότητα του Νευρωνικού Δικτύου και στη μη γραμμικότητα του

QC. Επιπλέον, άλλη μία σημαντική πρόκληση είναι και η αρχικοποίηση του χώρου των παραμέτρων τους. Οι κβαντικές ιδιότητες συμβάλλουν στην ανάπτυξη της ικανότητας επίλυσης σύνθετων προβλημάτων τα οποία απαιτούν εκθετική υπολογιστική ισχύ και μνήμη, καθιστώντας τα, έτσι, ως αδιαμφισβήτητα πιο αποδοτικά από τα κλασικά νευρωνικά δίκτυα (Kwak et al,2021).

Ακολουθεί ένα παράδειγμα για τη σχηματική απεικόνιση του συγκεκριμένου αλγορίθμου:

```
from qiskit import QuantumCircuit
from qiskit.circuit import Parameter

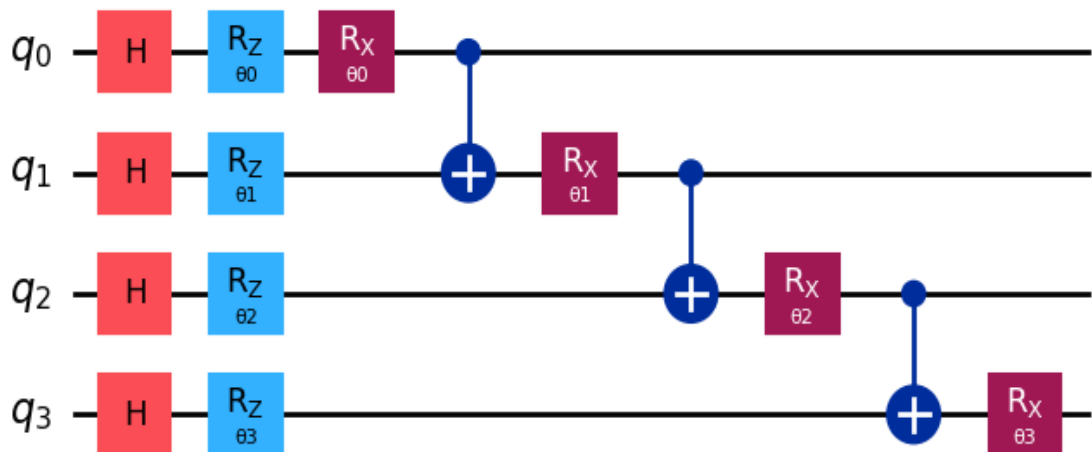
n_qubits = 4
parameters = [Parameter(f"θ{i}") for i in range(n_qubits)]

qc = QuantumCircuit(n_qubits)

for i in range(n_qubits):
    qc.h(i)
    qc.rz(parameters[i], i)

for i in range(n_qubits):
    qc.rx(parameters[i], i)
    if i < n_qubits - 1:
        qc.cx(i, i+1)

qc.draw(output='mpl')
```



Το σχήμα αυτό αντιπροσωπεύει ένα κβαντικό νευρωνικό δίκτυο. Στα qubits, αρχικά, εισάγονται πύλες Hadamard. Οι περιστροφές γύρω από τον άξονα z και άλλοι χειρισμοί, κωδικοποιούν τα δεδομένα εισόδου στο κβαντικό κύκλωμα. Επαναλαμβανόμενα επίπεδα περιστροφών (R_x , R_z) και συσχετισμών (CNOT πύλες) επεξεργάζονται τα δεδομένα. Αυτά τα επίπεδα αντιστοιχούν στις συνδέσεις ενός κλασικού νευρωνικού δικτύου, προσαρμόζοντας τις παραμέτρους ώστε να μάθουν το πρότυπο. Τέλος, τα qubits μετριοούνται για να εξαχθούν οι τελικές προβλέψεις, οι οποίες αντιπροσωπεύουν την απόκριση του δικτύου στα δεδομένα εισόδου.

Κβαντικές Bayesian μέθοδοι: Η κβαντική Bayesian μέθοδος συνδυάζει την παραδοσιακή στατιστική θεωρία κατηγοριοποίησης του Bayes με τις ιδιότητες της κβαντικής υπολογιστικής. Οι πιθανότητες που προκύπτουν χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση δεδομένων και ο στόχος είναι η ανάλυση και η πρόβλεψη κατηγοριοποίησης νέων. Η θεωρία Bayes και ο κβαντικός υπολογισμός είναι πιθανοτικές έννοιες και ο συνδυασμός τους ενδέχεται να βοηθήσει ιδιαίτερα στον τομέα της κβαντικής μηχανικής μάθησης. Αν και υπάρχουν ακόμα προκλήσεις στην ανάπτυξη της, η μέθοδος αυτή υπόσχεται σημαντική βελτίωση στην αποτελεσματικότητα πολλών εφαρμογών (Batra, 2021).

Παρακάτω ακολουθεί ένα παράδειγμα με σχηματική απεικόνιση του αλγορίθμου αυτού:

```
from qiskit import QuantumCircuit, QuantumRegister, ClassicalRegister
from qiskit.visualization import circuit_drawer
import numpy as np

n_qubits = 3
qreg = QuantumRegister(n_qubits, 'q')
creg = ClassicalRegister(n_qubits, 'c')
qc = QuantumCircuit(qreg, creg)

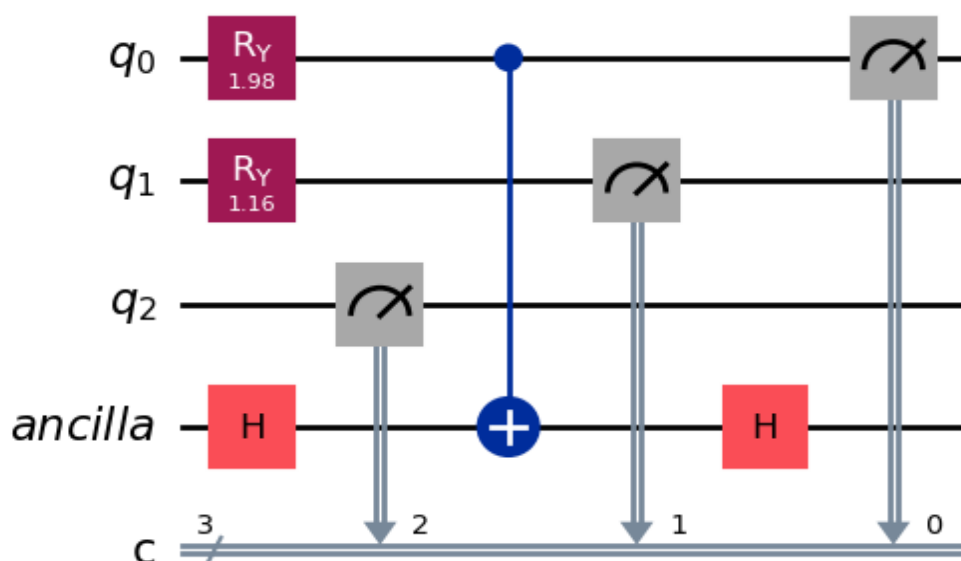
qc.ry(2 * np.arcsin(np.sqrt(0.7)), qreg[0])
qc.ry(2 * np.arcsin(np.sqrt(0.3)), qreg[1])

ancilla = QuantumRegister(1, 'ancilla')
qc.add_register(ancilla)

qc.h(ancilla[0])
qc.cx(qreg[0], ancilla[0])
qc.h(ancilla[0])

qc.measure(qreg, creg)

qc.draw(output='mpl')
```



Χρησιμοποιούνται περιστροφές πύλης RY για την κωδικοποίηση των πιθανοτήτων των δύο κατηγοριών. Έστω ότι είναι οι πιθανότητες $P(\text{class0})=0.7$ και $P(\text{class1})=0.3$. Επίσης, χρησιμοποιούμε ένα βοηθητικό qubit (ancilla) για την ενίσχυση των πιθανοτήτων συγκεκριμένων καταστάσεων. Αυτό γίνεται μέσω των πυλών CX και Hadamard, οι οποίες χρησιμοποιούνται ως εργαλεία ενίσχυσης. Ουσιαστικά η ενίσχυση χρησιμοποιείται για την αύξηση της πιθανότητας του πιο πιθανού αποτελέσματος, που συνδέεται με την Bayesian προσέγγιση της στατιστικής εκτίμησης. Τέλος, μετριοούνται τα qubits ώστε να υπολογιστεί η πιθανότητα κάθε κατηγορίας, η οποία προκύπτει από τις αρχικές περιστροφές RY και την ενίσχυση.

Εναλλακτικές προσεγγίσεις: Διάφορες άλλες προσεγγίσεις έχουν διερευνηθεί στον τομέα της κβαντικής μηχανικής μάθησης (QML). Οι μέθοδοι εκπαίδευσης συνόλων αξιοποιούν πολλαπλές στρατηγικές για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων. Όπως συμβαίνει με την κλασική ενίσχυση, η κβαντική ενίσχυση δημιουργεί ομάδες αδύναμων εκπαιδευόμενων, οι οποίοι διαδοχικά βελτιώνονται, με τον επόμενο να διορθώνει τα λάθη του προηγούμενου. Μια αναπτυσσόμενη μέθοδος QML είναι ο κβαντικός περίπατος, που αποτελεί την κβαντική εκδοχή

του κλασικού τυχαίου περιπάτου. Ο κβαντικός περίπατος μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε για αναζήτηση είτε για εκπαιδευτικούς σκοπούς. Τα Tensor Networks, χάρη στην ευελιξία τους και λιγότερων φυσικών qubits, κερδίζουν ολοένα και περισσότερο έδαφος σε εφαρμογές μηχανικής μάθησης, όπως η αναγνώριση εικόνων. Τα μοντέλα αυτά μπορούν να παρέχουν αποδοτική προσέγγιση για προβλήματα γραμμικής άλγεβρας και έχουν φυσική βάση παρόμοια, με εκείνη των κβαντικών υπολογιστών. Τέλος, ένα ακόμα στοχαστικό μοντέλο που στηρίζεται σε πιθανότητες είναι το Hidden Quantum Markov. Οι πιθανότητες αυτές είναι εκείνες της μετάβασης μεταξύ καταστάσεων (Batra, 2021).

4.3 Μελλοντικές εφαρμογές και προοπτικές

Η κβαντική μηχανική μάθηση έχει αρχίσει να εφαρμόζεται σε επιστημονικούς κλάδους όπως η κυβερνοασφάλεια, η χημεία, η φαρμακολογία και πολλούς άλλους. Παρ' όλα αυτά, για να μπορέσουν οι κβαντικοί υπολογιστές να αξιοποιηθούν πλήρως, χρειάζεται να ξεπεραστούν συγκεκριμένα εμπόδια που σχετίζονται τόσο με το υλικό όσο και με το λογισμικό. Υπάρχουν αρκετές προκλήσεις που απαιτούν λύση, όπως ο συντονισμός των κβαντικών πυλών, με σκοπό τη διόρθωση των κβαντικών σφαλμάτων. Είναι σημαντικό, επίσης, να αναφερθεί πως για την επόμενη δεκαετία, οι κβαντικοί υπολογιστές θα παρουσιάζουν μικρή ανοχή σε καταστάσεις θορύβου (Σάββας, 2022).

Στην καθημερινή χρήση, οι περισσότερες πληροφορίες που χειριζόμαστε είναι κλασικές. Για το λόγο αυτό, είναι σημαντικό να αναπτυχθούν μέθοδοι που θα επιτρέψουν την αποδοτική μετατροπή των κλασικών δεδομένων σε μορφή κατάλληλη για κβαντική επεξεργασία. Αυτή η κβαντική ενσωμάτωση αποτελεί μεγάλη πρόκληση, καθώς εξαρτάται από το είδος των δεδομένων και τον τύπο του αλγορίθμου μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιείται.

Επιπρόσθετα, δεν είναι εύκολο να αποδειχθεί ότι ένας κβαντικός αλγόριθμος αποδίδει καλύτερα από τον αντίστοιχο κλασικό, γεγονός που καθιστά αναγκαία την εφαρμογή της συγκριτικής αξιολόγησης (Σάββας, 2022).

Με βάση τους παραπάνω περιορισμούς, οι επιστήμονες συνδυάζουν τα πλεονεκτήματα των κλασικών και των κβαντικών υπολογιστών για τη δημιουργία υβριδικών κλασικών αλγορίθμων κβαντικής μηχανικής μάθησης. Αυτή η προσέγγιση είναι σημαντική στη σημερινή φάση, όπου οι κβαντικοί υπολογιστές χρησιμοποιούνται κυρίως για συγκεκριμένες εφαρμογές, στις οποίες απαιτούνται πιο σύνθετοι υπολογισμοί, ενώ όλες οι υπόλοιπες πραγματοποιούνται με κλασικούς υπολογιστές (Σάββας, 2022).

Υπάρχουν δύο βασικές προσεγγίσεις στην κβαντική υπολογιστική, η μία γενικού σκοπού (Universal Quantum Gate Model (UQGM)) και η άλλη ειδικού σκοπού (Quantum Annealing (QA)). Το δεύτερο επικεντρώνεται σε προβλήματα βελτιστοποίησης, ενώ το πρώτο έχει χρησιμοποιηθεί κυρίως για τη θεωρητική μελέτη κβαντικών αλγορίθμων. Παρόλο που έχει σημειωθεί πρόοδος, παραμένουν προκλήσεις όσον αφορά το σχεδιασμό αλγορίθμων, όπως η αντιμετώπιση των θορύβων και ο αριθμός των qubits σε βραχυπρόθεσμες συσκευές. Ένα κβαντικό κύκλωμα απαρτίζεται από δύο σκέλη, την κβαντική ενσωμάτωση και το τμήμα αξιολόγησης. Έτσι, σε περίπτωση που η κβαντική ενσωμάτωση δεν είναι η πρόποση, είναι πιθανό να αφαιρέσει κάθε προνόμιο που μπορεί να δώσει το QC (Σάββας, 2022).

4.4 Η κβαντική μηχανική μάθηση στη φαρμακευτική έρευνα

Η ανάπτυξη φαρμάκων και η ένταξή τους στο εμπόριο αποτελεί μία ιδιαίτερα δύσκολη διαδικασία, καθώς απαιτεί αρκετό χρόνο και οικονομικούς πόρους. Είναι γεγονός πως η αύξηση του κόστους και οι μεγάλες περίοδοι ανάπτυξης νέων φαρμάκων μπορούν να θεωρηθούν

ως μια σημαντική πρόκληση για τη φαρμακευτική βιομηχανία. Σύμφωνα με στατιστικά δεδομένα που έχουν προκύψει, το 92,5% των υποψήφιων φαρμάκων αποτυγχάνουν. Αυτό οδηγεί σε σημαντική απώλεια πόρων και χρόνου, με το μέσο συνολικό κόστος ανάπτυξης ενός φαρμάκου να ανέρχεται στα 879,3 εκατομμύρια δολάρια και το μέσο χρόνο ανάπτυξης στα 15 χρόνια (Sertkaya et al., 2024). Η αύξηση του κόστους ανάπτυξης νέων φαρμάκων αναμένεται να συνεχιστεί μελλοντικά, ενώ η αποτελεσματικότητα της μετατροπής της βιοϊατρικής έρευνας σε επιτυχημένα φάρμακα έχει μειωθεί σημαντικά από τη δεκαετία του 1950, σύμφωνα με τον νόμο του Eroom (Van Norman, 2017). Οι παράγοντες αυτοί τονίζουν την ανάγκη για καινοτόμες, καθώς και οικονομικά και χρονικά αποδοτικές προσεγγίσεις ανάπτυξης.

Τα τελευταία χρόνια, η συνεχής αύξηση της υπολογιστικής ισχύος καθώς και νέες προσεγγίσεις στη υπολογιστική χημεία έχουν οδηγήσει στη δημιουργία μιας νέας διαδικασίας ανακάλυψης φαρμάκων βασισμένης σε υπολογιστές, της Σχεδίασης Φαρμάκων με Υποβοήθηση Υπολογιστών (CADD) (Sliwoski et al., 2014). Με την ενσωμάτωση τεχνικών CADD, η ανακάλυψη φαρμάκων έχει γίνει πιο αποδοτική, λιγότερο δαπανηρή και πιο σύντομη. Επιπλέον, η διαδικασία ανακάλυψης φαρμάκων έχει μειώσει περαιτέρω το κόστος και το χρόνο μέσω της ενσωμάτωσης τεχνικών Μηχανικής Μάθησης (ML). Ένας παράγοντας που αύξησε τη χρήση τεχνικών ML είναι η μεγάλη ποσότητα διαθέσιμων πειραματικών βιολογικών και φαρμακευτικών δεδομένων.

Η εκπαίδευση μοντέλων ML, και ιδιαίτερα των μοντέλων Βαθιάς Μάθησης (DL), για πολύπλοκα θέματα που σχετίζονται με την ανακάλυψη φαρμάκων απαιτεί πόρους υψηλής ταχύτητας και υψηλής χωρητικότητας. Πρόσφατες έρευνες έχουν εξερευνήσει τις πιθανές προοπτικές των QC και QML για την επιτάχυνση της ανακάλυψης φαρμάκων. Ακαδημαϊκά ιδρύματα, startup επιχειρήσεις και φαρμακευτικές εταιρείες έχουν δείξει μεγάλο ενδιαφέρον για την ενσωμάτωσή τους στην ανακάλυψη φαρμάκων, οδηγώντας στη δημιουργία νέων συνεργασιών (Zinner et al., 2021; Zinner et al., 2022). Επιπλέον, οι κβαντικοί υπολογιστές είναι ικανοί να προσομοιώνουν

αποτελεσματικά πολλά σημαντικά ζητήματα στην κβαντική χημεία. Οι πρόοδοι στους τομείς της κβαντικής χημείας και της μηχανικής μάθησης μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην ανακάλυψη φαρμάκων.

Τα σύνολα δεδομένων που περιλαμβάνουν μικρά μόρια δοκιμασμένα σε βιολογικούς στόχους ή οργανισμούς αυξάνονται ραγδαία, προσφέροντας πολύτιμες πληροφορίες για την ανακάλυψη φαρμάκων. Χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία μοντέλων μηχανικής μάθησης, τα οποία βοηθούν στο σχεδιασμό φαρμάκων, την πρόβλεψη επιδράσεων και τη δημιουργία συστημάτων αξιολόγησης. Η φαρμακευτική βιομηχανία και τα ακαδημαϊκά εργαστήρια αξιοποιούν τέτοια μοντέλα για την ταχεία ανάπτυξη φαρμάκων, ακόμη και για παραμελημένες ασθένειες, όπως ο Έμπολα (Batra, 2021).

Ωστόσο, τα μεγάλα σύνολα δεδομένων δημιουργούν προβλήματα για τους κλασικούς υπολογιστές. Ορισμένες νέες μέθοδοι κβαντικής μηχανικής μάθησης υπόσχονται να ξεπεράσουν αυτά τα εμπόδια. Οι κβαντικοί υπολογιστές μπορούν να επεξεργαστούν σύνθετες περιγραφές μορίων, αν και προς το παρόν συνεχίζουν να υπάρχουν τεχνικοί περιορισμοί (Batra, 2021).

Ακόμα, προτείνονται υβριδικές λύσεις που συνδυάζουν τη χρήση κλασικών και κβαντικών υπολογιστών. Αυτές οι μέθοδοι έχουν εφαρμοστεί σε ορισμένα σύνολα δεδομένων, όπως 132 αναστολείς SARS-CoV-2, 18.886 αναστολείς *Mycobacterium tuberculosis*, 44.809 ενώσεις για τη νόσο Krabbe και άλλες μεγαλύτερες βάσεις δεδομένων με έως και 306.587 ενώσεις. Με τον όρο “αναστολείς” αναφέρονται οι χημικές ενώσεις που μειώνουν ή σταματούν τη δραστηριότητα ενός συγκεκριμένου βιολογικού στόχου, όπως ένα ένζυμο ή μια πρωτεΐνη. Όλα τα δεδομένα προετοιμάστηκαν με το Assay Central, επιτρέποντας την πρόβλεψη νέων μορίων για συγκεκριμένες ασθένειες (Batra, 2021). Το Assay Central είναι ένα λογισμικό για τη διαχείριση, την ανάλυση και τη μοντελοποίηση βιολογικών δεδομένων που σχετίζονται με την ανακάλυψη φαρμάκων (Gawriljuk, 2017).

Η βελτιστοποίηση των κλινικών δοκιμών με κβαντική μηχανική μάθηση ανοίγει νέους δρόμους για την επιτάχυνση της ανάπτυξης και

έγκρισης φαρμάκων, προσφέροντας ακρίβεια, ταχύτητα και αποδοτικότητα. Οι κβαντικοί αλγόριθμοι και οι εν γένει καινοτόμες τεχνικές της κβαντικής υπολογιστικής, προσφέρουν τη δυνατότητα αντιμετώπισης εκθετικών προβλημάτων, κάτι που υπερβαίνει τις δυνατότητες των κλασικών υπολογιστών (Farhi, 2014).

Η ανάπτυξη των φαρμάκων μέσω της κβαντικής μηχανικής μάθησης διακρίνεται σε πέντε στάδια. Όσον αφορά το πρώτο, γίνεται η αναγνώριση των μοριακών στόχων. Πιο συγκεκριμένα, αναφέρεται στην αναγνώριση των βιολογικών μορίων που είναι υπεύθυνα για την ασθένεια. Οι κβαντικοί αλγόριθμοι, όπως τα Quantum Neural Networks (QNNs) και το Quantum Principal Component Analysis (QPCA), συμβάλλουν στη γρηγορότερη και ακριβέστερη ανάλυση μεγάλων δεδομένων, εντοπίζοντας τους σωστούς μοριακούς στόχους για άλλες νέες θεραπείες. Για παράδειγμα, η εφαρμογή των QNNs στην αναγνώριση των πρωτεϊνών που σχετίζονται με καρκινικούς όγκους βελτιώνει την ταχύτητα και την ακρίβεια της διάγνωσης. Επίσης, το QPCA χρησιμοποιείται για την ανάλυση δεδομένων υψηλών διαστάσεων τα οποία σχετίζονται με βιολογικούς στόχους, όπως οι πρωτεΐνες που εμπλέκονται σε κάποια ασθένεια (Kwak et al, 2021).

Στο δεύτερο στάδιο διακρίνεται η εξόρυξη δεδομένων για τα υποψήφια προς παρασκευή φάρμακα. Αναλυτικότερα, η εξόρυξη δεδομένων αναφέρεται στη διαδικασία ανάλυσης μεγάλων βάσεων δεδομένων για την εύρεση υποψήφιων φαρμάκων. Οι κβαντικοί αλγόριθμοι, όπως ο Quantum Support Vector Machines (QSVM) και τα Quantum Generative Adversarial Networks (QGANs), βελτιώνουν την ταχύτητα και την ακρίβεια αυτής της διαδικασίας, επιτρέποντας, έτσι, την ανακάλυψη νέων ιδιοτήτων στην προσπάθεια δημιουργίας νέων φαρμάκων (Batra, 2021). Για παράδειγμα, ο αλγόριθμος QSVM χρησιμοποιείται για να διαχωριστούν διαφορετικά μόρια σε κατηγορίες, οι οποίες βασίζονται σε χαρακτηριστικά που είναι σημαντικά για την ανακάλυψη νέων φαρμάκων. Με λίγα λόγια, αντί να αναλύονται όλα τα δεδομένα ταυτόχρονα, βοηθά να διαχωριστούν τα μόρια σε ομάδες που είναι πιθανότερο να περιέχουν υποψήφια

φάρμακα, επιταχύνοντας με αυτόν τον τρόπο την διαδικασία ανακάλυψης και ανάπτυξης νέων φαρμακευτικών ουσιών.

Το τρίτο στάδιο αναφέρεται στη μοριακή σχεδίαση και βελτιστοποίηση. Για να γίνει πιο σαφές, η έννοια της μοριακής σχεδίασης και βελτιστοποίησης αφορά την ανάπτυξη και τροποποίηση των μορίων με σκοπό να αυξηθεί η φαρμακευτική τους αξία, δηλαδή ο βαθμός στον οποίο μπορεί ένα μόριο να είναι χρήσιμο ως φάρμακο. Για τους κλασικούς υπολογιστές, η διαδικασία περιλαμβάνει υπολογιστικά εργαλεία, όπως η προσομοίωση μοριακής δυναμικής, για την ανάλυση και τη μοντελοποίηση των χημικών ενώσεων. Στην κβαντική υπολογιστική, είναι δυνατό να προσομοιωθούν χημικές και μοριακές ιδιότητες με πολύ μεγαλύτερη ταχύτητα και ακρίβεια. Χάρη στην εκθετική υπολογιστική ισχύος που παρέχει, μπορεί και να επεξεργάζεται μεγαλύτερες και πιο περίπλοκες χημικές ενώσεις από τα εργαλεία των κλασικών υπολογιστών. Για να γίνει πιο κατανοητό, ο αλγόριθμος QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm) χρησιμοποιείται για τη βελτιστοποίηση της χημικής δομής των μορίων, προσδιορίζοντας τη βέλτιστη τοποθέτηση των ατόμων σε μια ένωση έχοντας ως στόχο τη βελτίωση της αποτελεσματικότητας και της ασφάλειας ενός φαρμάκου (Fahri, 2014). Επιπρόσθετα, τα κβαντικά νευρωνικά δίκτυα (QNNs) χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μορίων ενός φαρμάκου και των στόχων μέσα στο ανθρώπινο σώμα. Αυτό αποτελεί σημαντική βοήθεια στη βελτιστοποίηση της χημικής σύνθεσης των φαρμάκων, ώστε να είναι πιο αποτελεσματικά και με λιγότερες παρενέργειες.

Στο επόμενο στάδιο διακρίνεται η κλινική έρευνα και η προσωποποιημένη ιατρική. Σε αυτή την περίπτωση περιλαμβάνεται η διαδικασία δοκιμών νέων φαρμάκων σε ανθρώπους για να επιβεβαιωθεί η ασφάλεια και η αποτελεσματικότητά τους. Από την άλλη, όσον αφορά την προσωποποιημένη ιατρική, επικεντρώνεται στην προσαρμογή της θεραπείας σύμφωνα με τις γενετικές πληροφορίες του ασθενούς. Η προσωποποιημένη θεραπεία μέσω κβαντικών υπολογιστών συνδυάζει τα γενετικά δεδομένα του ασθενούς με τις κβαντικές υπολογιστικές μεθόδους για τη βελτίωση των θεραπειών. Οι

κβαντικοί υπολογιστές συμβάλλουν στην επιτάχυνση της ανάλυσης δεδομένων και στην ακριβέστερη πρόβλεψη για τον τρόπο με τον οποίο τα φάρμακα επηρεάζουν διαφορετικούς πληθυσμούς ασθενών. Για παράδειγμα, ο αλγόριθμος οι Bayesian κβαντικοί αλγόριθμοι βοηθούν στη βελτίωση της ανάλυσης αβεβαιότητας στις κλινικές δοκιμές φαρμάκων. Αυτό σημαίνει ότι επιτρέπουν στους ερευνητές να κατανοήσουν καλύτερα τις αβεβαιότητες ή τις αμφιβολίες που υπάρχουν γύρω από τα αποτελέσματα των δοκιμών και να προσαρμόσουν τις διαδικασίες δοκιμών, έτσι ώστε το φάρμακο που θα παρασκευαστεί να έχει περισσότερες πιθανότητες να είναι ασφαλές και αποτελεσματικό (Batra, 2021).

Στο πέμπτο και τελευταίο στάδιο γίνεται η παραγωγή των φαρμάκων και η κλινική τους εφαρμογή. Η παραγωγή φαρμάκων αφορά τη μαζική κατασκευή φαρμάκων και τη διάθεσή τους στην αγορά για τους καταναλωτές. Οι κβαντικοί αλγόριθμοι επιτρέπουν την ταχύτερη και πιο οικονομική παραγωγή μέσω της βελτιστοποίησης των διαδικασιών αλλά και της προσομοίωσης της παραγωγής. Παραδείγματος χάρη, ο αλγόριθμος QAOA μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη βελτιστοποίηση της διαδικασίας παραγωγής φαρμάκων, μειώνοντας το κόστος και το χρόνο παραγωγής. Επιπλέον, πρέπει να σημειωθεί πως η εφαρμογή των κβαντικών υπολογιστών στην παρακολούθηση της παραγωγικής διαδικασίας, είναι δυνατό να βελτιώσει την ποιότητα των φαρμάκων, μειώνοντας τις πιθανότητες λάθους και ενισχύοντας τη συνέπεια στη μαζική παραγωγή (Batra, 2021).

4.5 Μοντέλα Κβαντικής Μηχανικής Μάθησης (QML Models)

Κβαντική Γραμμική Παλινδρόμηση:

Οι Reddy και Bhattacharjee (2021) πρότειναν ένα μοντέλο κβαντικής γραμμικής παλινδρόμησης για την πρόβλεψη των ενεργειών ατομοποίησης μορίων. Η ακριβής και αποδοτική εκτίμηση θεμελιωδών χημικών ιδιοτήτων, όπως η ενέργεια ατομοποίησης, κρίνεται ως

μείζονος σημασίας για το σχεδιασμό και την ανακάλυψη νέων χημικών ενώσεων και φαρμάκων. Για την ανάπτυξη του μοντέλου χρησιμοποιήθηκαν το σύνολο δεδομένων QM7 και αυτοκωδικοποιητές βαθιάς συνέλιξης για την εξαγωγή χαρακτηριστικών. Επιπρόσθετα, προστέθηκε θόρυβος Gauss (Δ) με μέσο όρο 0 και τυπική απόκλιση 0.1 ούτως ώστε να γίνει η προσομοίωση της συμπεριφοράς συστημάτων NISQ (Near-Intermediate-Scale Quantum). Πρέπει να σημειωθεί πως τα αποτελέσματα του κβαντικού και του κλασικού γραμμικού μοντέλου παλινδρόμησης ήταν εξαιρετικά παρόμοια.

QSVM:

Οι Batra κ.α. (2021) χρησιμοποίησαν ένα μικρό σύνολο δεδομένων που περιλάμβανε 132 μικρά μόρια αναστολέων του ιού SARS-CoV-2 σε κύτταρα Vero. Για την ταξινόμηση αυτών των μορίων σε ενεργές ή μη κατηγορίες, εφαρμόστηκε ο QSVM. Τα μόρια αναπαραστάθηκαν χρησιμοποιώντας το δακτυλικό αποτύπωμα Morgan με ακτίνα 3, το οποίο έχει υψηλή διάσταση (π.χ., 2048 bits). Λόγω της υψηλής διάστασης, εφαρμόστηκαν διάφορες τεχνικές μείωσης διαστάσεων όπως η LDA, η PCA και δύο προσαρμοσμένες μέθοδοι, οι οποίες στη συνέχεια αξιολογήθηκαν. Η απόδοση του QSVM συγκρίθηκε με τον SVM. Σε όλους τους συνδυασμούς μείωσης διαστάσεων, ο κλασικός SVM παρουσίασε υψηλότερη ακρίβεια από τον κβαντικό QSVM.

Επιπλέον, οι Mensa κ.α. (2023) πρότειναν έναν δυαδικό κβαντικό ταξινομητή (QSVM) με σκοπό τη διάκριση ενεργών και μη ενεργών μορίων σε συγκεκριμένους στόχους. Ο κβαντικός ταξινομητής βασίστηκε στον QSVM που είχε προταθεί από τους Havlíček κ.α. (2019). Παρουσίασαν λεπτομερώς ολόκληρη τη ροή εργασίας του μοντέλου και ανέλυσαν το πώς ορισμένοι παράγοντες επηρεάζουν την απόδοση πρόβλεψης, συμπεριλαμβανομένου του αριθμού των ενεργών μορίων, της ισορροπίας κλάσεων, του αριθμού χαρακτηριστικών, της μεθόδου επιλογής χαρακτηριστικών (π.χ. PCA, ANOVA) και της τιμής της παραμέτρου κανονικοποίησης C για τον αλγόριθμο QSVM. Έγινε χρήση των συνόλων δεδομένων LIT-PCBA και COVID-19 και τα μόρια αναπαραστάθηκαν με 47 αριθμητικούς περιγραφείς που δημιουργήθηκαν από το SMILES. Ακόμα, διεξήχθησαν πειράματα τόσο σε προσομοιωτές όσο και σε πραγματικό κβαντικό υλικό από την IBM.

Σε ορισμένες περιπτώσεις, ο QSVM παρουσίασε καλύτερη απόδοση από τον κλασικό SVM όταν δοκιμάστηκε σε πραγματικό κβαντικό υλικό ή σε προσομοίωση.

Επίσης, οι Bhatia κ.α. (2023) πρότειναν έναν QSVM για την πρόβλεψη της παρουσίας ή απουσίας χημικών/φαρμακευτικών ιδιοτήτων ADMET (απορρόφηση, κατανομή, μεταβολισμός, απέκκριση και τοξικότητα). Το μοντέλο αξιολογήθηκε για τέσσερα διαφορετικά σύνολα δεδομένων, καθένα από τα οποία αντιπροσωπεύει μία συγκεκριμένη ιδιότητα. Πιο συγκεκριμένα, οι ιδιότητες αυτές αφορούσαν την HIA (απορρόφηση), CARC (καρκινογένεση), CYP2D6 (μεταβολισμός) και DILI (απέκκριση). Για την αναπαράσταση των μορίων χρησιμοποιήθηκε το αποτύπωμα Morgan (Morgan fingerprint) με 2048 bits. Επίσης, εφαρμόστηκε η μέθοδος PCA (Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών) για τη μείωση των χαρακτηριστικών και διεξήχθησαν πειράματα με 2, 4, 8 και 16 χαρακτηριστικά μορίων. Είναι απαραίτητο να σημειωθεί πως ο QSVM αξιολογήθηκε έναντι του αλγορίθμου KNN, του ταξινομητή adaboost, της λογιστικής παλινδρόμησης και τέλος του κλασικού SVC. Όσον αφορά τα αποτελέσματα, για τον ίδιο μικρό αριθμό χαρακτηριστικών, ο QSVM είχε καλύτερη απόδοση σε ορισμένες περιπτώσεις εν συγκρίσει με τους άλλους αλγόριθμους, αποδεικνύοντας με αυτόν τον τρόπο τη δυνητική υπεροχή του σε προβλήματα μικρών διαστάσεων.

Κβαντικά Νευρωνικά Δίκτυα (QNNs):

Οι Suzuki και Katouda (2020) διεξήγαγαν πειράματα για να βρουν βέλτιστα υβριδικά μοντέλα πρόβλεψης της τοξικότητας 221 φαινολών στο βολβό *Tetrahymena*. Αρχικά, αξιολόγησαν προεπιλεγμένες και προσαρμοσμένες προσεγγίσεις ενσωμάτωσης και διαπίστωσαν ότι η γωνιακή κωδικοποίηση ήταν αποτελεσματική για την αναπαράσταση δεδομένων λόγω της απλότητας και της υψηλής μη γραμμικότητάς της. Επιπλέον, τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η προσαρμοσμένη ενσωμάτωση με ενίσχυση πλέξης (custom entangler-enhanced embedding) είχε μεγαλύτερη εκφραστική δυνατότητα στην αναπαράσταση δεδομένων. Αξιολόγησαν τρία VQCs διαπιστώνοντας ότι αυτή που βασιζόταν στις πύλες CNOT είχε παρόμοια απόδοση με εκείνη που βασιζόταν στο Χαμιλτονιανό Ising, ενώ η VQC με πύλες CZ είχε χαμηλότερη απόδοση. Ο προσαρμοσμένος ενισχυτής πλέξης, ο οποίος περιλάμβανε μερικές γωνιακές περιστροφές και διαπλοκή με CNOT, ξεπέρασε την απόδοση

της VQC με επαναλαμβανόμενες στρώσεις κυκλωμάτων και μπλοκ CNOT. Αυτό το μοντέλο είχε απόδοση συγκρίσιμη με διάφορα μοντέλα RBF και ξεκάθαρα ανώτερη από διάφορα μοντέλα MLR.

Οι Batra κ.α. (2021) υλοποίησαν έναν υβριδικό δυαδικό ταξινομητή βασισμένο στον κβαντικό ταξινομητή επανεισαγωγής δεδομένων (Pérez-Salinas et al., 2020) για να χαρακτηρίσουν μόρια ως ενεργά ή ανενεργά. Οι Pérez-Salinas ανέφεραν ότι αυτός ο ταξινομητής ήταν ένα Κβαντικό Νευρωνικό Δίκτυο (QNN). Χρησιμοποιήθηκαν διάφορες προσεγγίσεις μείωσης διαστάσεων, όπως οι PCA, LDA και δύο προσαρμοσμένοι αλγόριθμοι, λόγω της υψηλής διάστασης των χημικών χαρακτηριστικών που εκπροσωπούνται από το αποτύπωμα Morgan (με ακτίνα 3). Εργάστηκαν με διάφορα σύνολα δεδομένων ενώσεων, που κυμαίνονταν από εκατοντάδες έως χιλιάδες ενώσεις, με κάθε σύνολο δεδομένων να αντιστοιχεί και σε έναν συγκεκριμένο στόχο. Σε αντίθεση με τη γραμμικότητα που παρατηρείται στην κλασική πληροφορική, παρουσιάστηκε η μη γραμμική κλιμάκωση του χρόνου υπολογισμού σε κβαντικό υπολογιστή, με πολλά ανεξάρτητα σύνολα δεδομένων διαφορετικών μεγεθών.

Οι Lau κ.α. (2023) πρότειναν το HyraCADD, μια υβριδική ροή εργασιών CADD, για να βρουν λιγάνδες που μπορούν να δεσμευτούν με πρωτεΐνες και να εξετάσουν μεταλλάξεις οι οποίες ενδέχεται να αλλάξουν τη δέσμευση φαρμάκων. Το κβαντικό μέρος της ροής εργασιών αφορά την πρόβλεψη της επίδρασης των μεταλλάξεων πρωτεϊνικών στόχων στη δέσμευση φαρμάκων. Υλοποίησαν τρεις αλγόριθμους QNN: το σταθμισμένο mQNN (Schuld et al., 2020), ο οποίος βασίζεται στον περιθωριακό ταξινομητή του PennyLane, τον qisQNN από το Qiskit, και έναν προσαρμοσμένο QNN (cQNN). Έπειτα, αξιολόγησαν τους αλγόριθμους αυτούς σε σύγκριση με το κλασικό GenoDock, ένα μοντέλο RF και έδειξαν ότι η κβαντική υπολογιστική μπορεί να συγκριθεί με την κλασική πληροφορική.

QRBF:

Οι Reddy και Bhattacharjee (2021) παρουσίασαν μια λεπτομερή μεθοδολογία για την πρόβλεψη των ενεργειών ατομοποίησης μορίων χρησιμοποιώντας διάφορα μοντέλα κβαντικής μηχανικής μάθησης. Οι συγγραφείς συνέκριναν τον κβαντικό και τον κλασικό πυρήνα Radial

Basis Function (RBF). Για την προσομοίωση της συμπεριφοράς των συστημάτων NISQ, προστέθηκαν πολυδιάστατος Γκαουσιανός θόρυβος (Δ) με μέση τιμή 0 και διακύμανση 0.1 στο σύνολο δεδομένων QM7. Εκπαίδευσαν επιτυχώς το μοντέλο QRBF και παρήγαγαν αποτελέσματα συγκρίσιμα με αυτά του κλασικού μοντέλου RBF. Το μοντέλο QRBF βασίστηκε στην απόσταση ίχνους των πινάκων πυκνότητας των κωδικοποιημένων καταστάσεων πλάτους και του κανόνα Χίλμπερτ-Σμιτ. Παρ' όλο που το κλασικό RBF υπερείχε όσον αφορά την απόδοση σε σχέση με το QRBF, η τιμή R^2 και ο συντελεστής συσχέτισης Pearson του QRBF υποδηλώνουν ότι το μοντέλο μπορεί να μάθει τη διανομή των δεδομένων εισόδου.

QRBM:

Οι Jain κ.α. (2020) παρουσίασαν ένα βιοδείκτη καρκίνου ο οποίος διακρίνει, μεταξύ αδενοκαρκινώματος και καρκινώματος από πλακώδη κύτταρα, δύο μορφές μη μικροκυτταρικού καρκίνου του πνεύμονα, χρησιμοποιώντας έναν ταξινομητή QRBM. Ένα σύνολο δεδομένων από 104 ασθενείς, το οποίο επιλέχθηκε από τα σύνολα δεδομένων Kupper και Golumbic, χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση του μοντέλου που δημιουργήθηκε στον κβαντικό υπολογιστή D-Wave 2000Q. Η διαδικασία επιλογής χαρακτηριστικών πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του XGBoost. Κύριος στόχος του μοντέλου ήταν να υποστηρίξει την εξατομικευμένη ιατρική, που στοχεύει στον εντοπισμό του συγκεκριμένου υποτύπου καρκίνου ενός ασθενούς με σκοπό την επιλογή της βέλτιστης θεραπείας. Η εξατομικευμένη ιατρική μπορεί να επηρεάσει το σχεδιασμό φαρμάκων. Οι συγγραφείς της μελέτης τόνισαν πως αν και δεν είχαν ως στόχο την απόδειξη της υπεροχής της κβαντικής προσέγγισης, το μοντέλο παρουσίασε ευνοϊκά αποτελέσματα, συγκρίσιμα με τις κλασικές μεθόδους. Οι κλασικές μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν, περιελάμβαναν τη γραμμική παλινδρόμηση, τη λογιστική παλινδρόμηση, το SVM, το τυχαίο δάσος (RF) και τα νευρωνικά δίκτυα (NN).

QLSTM:

Ο Beaudoin κ.α. (2022) πρότειναν ένα υβριδικό μοντέλο Quantum LSTM (QLSTM) για χημική αναδρομική σύνθεση, το οποίο αποτέλεσε ένα χρήσιμο βήμα στη διαδικασία ανακάλυψης φαρμάκων. Η χημική ρετροσύνθεση προσπαθεί να παράσχει αντιδρώντα που μπορούν να συνδυαστούν, χρησιμοποιώντας μια χημική αντίδραση ώστε να συνθέσουν ένα επιθυμητό μόριο. Η βασική διαφορά από το κλασικό LSTM είναι ότι αντί να επεξεργάζεται άμεσα δεδομένα από το κρυφό στρώμα και την είσοδο, το δίκτυο περνά πρώτα τα δεδομένα μέσω ενός VQC. Στη συνέχεια, το δίκτυο λειτουργεί παρόμοια με ένα κλασικό LSTM. Τέσσερα VQC συμμετέχουν στο δίκτυο. Ένα αντιπροσωπεύει την πύλη λήθης, δύο αντιπροσωπεύουν την «πύλη ενημέρωσης» και ένα αντιπροσωπεύει την πύλη εξόδου. Λόγω του περιορισμένου αριθμού qubits στο VQC, ένα πλήρως συνδεδεμένο στρώμα (FC), πριν από το VQC, μειώνει τις διαστάσεις των δεδομένων, ενώ ένα άλλο FC στρώμα, μετά το VQC, αποκαθιστά τα δεδομένα στις αρχικές τους διαστάσεις. Όσον αφορά την αξιολόγηση της απόδοσης, η διαδικασία αναδρομικής σύνθεσης απλοποιήθηκε. Επέλεξαν δύο κοινές χημικές ενώσεις (οξικό οξύ και ακετόνη) και περιόρισαν τις εισερχόμενες αντιδράσεις σε εκείνες που παράγουν αυτές τις ενώσεις. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι αν και η ακρίβεια εκπαίδευσης του QLSTM υστερούσε σε σχέση με το LSTM, ξεπέρασε το κλασικό LSTM στις δοκιμές. Το Quantum Bidirectional LSTM με Προσοχή (QBi-LSTMA) προτάθηκε από τους (Wang et al., 2022) στη μελέτη τους για την πρόβλεψη ανεπιθύμητων ενεργειών φαρμάκων (ADRs) από δύο φάρμακα, χρησιμοποιώντας δεδομένα από κοινωνικά δίκτυα. Οι ADRs συνεχίζουν να αποτελούν σημαντική αιτία νοσηρότητας και θνησιμότητας αλλά και σημαντικό εμπόδιο στη διαδικασία έρευνας φαρμάκων. Χρησιμοποιούνται έξι VQCs αντί των παραδοσιακών νευρωνικών δικτύων (Beaudoin et al., 2022). Η απόδοση του QBi-LSTMA ξεπερνά σημαντικά αυτή του Bi-LSTM και του QBi-LSTM χωρίς προσοχή. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ο μηχανισμός προσοχής μπορεί να αναπαραστήσει καλύτερα συντακτικές και σημασιολογικές πληροφορίες σε διαφορετικά περιβάλλοντα, βελτιώνοντας έτσι την ικανότητα αναγνώρισης οντοτήτων. Τα QBi-LSTMA και QBi-LSTM, χωρίς προσοχή ξεπερνούν το Bi-LSTM λόγω της ισχυρής μη γραμμικής προσεγγιστικής ικανότητας, της βέλτιστης γενίκευσης και του γρήγορου ρυθμού σύγκλισης των κβαντικών δικτύων. Το QBi-LSTMA ξεπερνά διάφορους αλγορίθμους για την πρόβλεψη ADR, όπως οι CNNWEF (CNN Word Embedding Features), RNN, και ATT-RNN (RNN με μηχανισμό προσοχής).

QCNN:

Οι Li κ.α. (2021a) χρησιμοποίησαν το μοντέλο QuanNN (Henderson et al., 2020) για την ταξινόμηση θυλάκων δέσμευσης σε πρωτεΐνες σε μία από τρεις κατηγορίες: δέσμευση νουκλεοτιδίων, δέσμευση αίμης ή άλλες. Το κβαντικό φίλτρο ήταν ένα τυχαίο κβαντικό κύκλωμα. Οι θύλακες εισόδου αναπαραστάθηκαν ως εικόνες. Το μοντέλο QuanNN, το οποίο είχε μόνο ένα επίπεδο, ενσωματώθηκε με MLP για την ταξινόμηση. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι το μοντέλο ενός επιπέδου QuanNN + MLP ξεπέρασε το μοντέλο ενός επιπέδου CNN + MLP τόσο στην ακρίβεια εκπαίδευσης όσο και στη δοκιμαστική ακρίβεια.

QGAN:

Οι Li κ.α. (2021b) πρότειναν ένα QGAN με την ονομασία QGAN-HG, το οποίο περιελάμβανε έναν υβριδικό κβαντικό-κλασικό γεννήτορα και έναν κλασικό διακριτή για τη δημιουργία μικρών μορίων φαρμάκων. Το QGAN-HG βασίστηκε στο κλασικό μοντέλο MolGAN (De Cao & Kipf, 2018), με την προσθήκη ενός VQC στον γεννήτορα. Το ίδιο μοντέλο παρουσιάστηκε και στη μελέτη των Li κ.α. (2021a). Ο γεννήτορας αυτός χρησιμοποίησε ένα VQC και ένα κλασικό βαθύ νευρωνικό δίκτυο για να εξάγει ένα διάνυσμα ατόμων και μία μήτρα δεσμών για την αναπαράσταση γραφημάτων μορίων φαρμάκων. Ο κλασικός διακριτής χρησιμοποιήθηκε στη συνέχεια για να ταξινομήσει τα μόρια ως πραγματικά ή ψεύτικα. Η αξιολόγηση πραγματοποιήθηκε μέσω του υπολογισμού της απόστασης Fréchet (FD) και τριών ιδιοτήτων φαρμάκων. Το κλασικό MolGAN απαιτεί εκατομμύρια παραμέτρους για να μάθει τις μοριακές κατανομές. Μειώνοντας τις παραμέτρους εκπαίδευσης στα QGAN-HG και MolGAN κατά περίπου 85%, το QGAN-HG πέτυχε καλύτερο σημείο εκπαίδευσης με μόνο 15 επιπλέον παραμέτρους, διατηρώντας την ίδια απόδοση. Μία περαιτέρω μείωση κατά περίπου 98% στις παραμέτρους εκπαίδευσης οδήγησε σε σημαντικές βελτιώσεις στην απόδοση μάθησης. Ωστόσο, ο χρόνος εκπαίδευσης των κβαντικών μοντέλων ήταν συνεχώς μεγαλύτερος σε όλες τις περιπτώσεις. Επιπλέον, οι Li κ.α. (2021b) παρουσίασαν μία παραλλαγή του QGAN-HG, με την ονομασία patched P-QGAN-HG, που βασίζεται στη μέθοδο patched circuit (Huang et al. (2021)). Το κύκλωμα αυτής της παραλλαγής αποτελείται από πολλαπλά ανεξάρτητα υποκυκλώματα, των οποίων τα αποτελέσματα των μετρήσεων

συνενώνονται για να δημιουργήσουν ένα διάνυσμα εξόδου μεγαλύτερης διάστασης. Το VQC αντικαταστάθηκε με το P2-QGAN-HG (2 υποκυκλώματα, 4 qubits και 7 παράμετροι το καθένα) και το P4-QGAN-HG (4 υποκυκλώματα, 2 qubits και 3 παράμετροι το καθένα). Οι παραλλαγές patched έδειξαν παρόμοια απόδοση τόσο στη συσκευή *ibm_quito* όσο και σε προσομοιώσεις. Ωστόσο, η πραγματική κβαντική συσκευή επηρεάζεται από τον θόρυβο, σε αντίθεση με την προσομοίωση. Ακόμα, οι παραλλαγές αυτές παρουσίασαν σημαντική επιτάχυνση στην εκπαίδευση συγκριτικά με το QGAN-HG. Οι Kao κ.α. (2023) μελέτησαν υβριδικά κβαντικά-κλασικά GAN για τη δημιουργία μικρών μορίων. Έδειξαν το κβαντικό πλεονέκτημα στη μικρο-ανακάλυψη φαρμάκων αντικαθιστώντας κάθε στοιχείο του GAN με VQC. Η χρήση VQC σε GAN για τη δημιουργία μικρών μορίων βελτίωσε τα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά και την απόδοση στα goal-directed benchmark συγκριτικά με την κλασική προσέγγιση. Παρ' όλο που τα υβριδικά QGANs παρουσιάζουν αξιοσημείωτα οφέλη, εξακολουθούν να αντιμετωπίζουν προκλήσεις στη δημιουργία μοναδικών και έγκυρων μορίων εν συγκρίσει με τα κλασικά τους αντίστοιχα.

QVAE:

Οι Li και Ghosh (2022) πρότειναν δύο μοντέλα QVAE: το βασικό BQ-VAE και το επεκτάσιμο SQ-VAE, τα οποία σχεδιάστηκαν για τη δημιουργία νέων μορίων. Για το πρώτο μοντέλο, αναφέρονται δύο περιπτώσεις: το απλό BQ-VAE για κανονικοποιημένα δεδομένα και μια υβριδική κβαντική παραλλαγή για μη κανονικοποιημένα δεδομένα, όπου χρησιμοποιείται μια τελική κλασική FC (Fully Connected) στρώση για την ανακατασκευή των τιμών χαρακτηριστικών. Συγκριτικά με το κλασικό VAE για τα αρχικά μικρά μόρια εισόδου με μόνο εννέα τύπους ατόμων από το σύνολο δεδομένων QM9, ο χρόνος εκμάθησης του BQ-VAE σε όρους εποχών εκπαίδευσης ήταν ο ίδιος. Ωστόσο, έμαθε πιο γρήγορα όταν δόθηκαν ως είσοδος κανονικοποιημένα μόρια QM9. Παρ' όλα αυτά, οι ανακατασκευές μορίων από τα αρχικά και κανονικοποιημένα δεδομένα ήταν αρκετά διαφορετικές, με την κανονικοποιημένη ανακατασκευή να έχει πολύ λίγα κοινά χαρακτηριστικά με το αρχικό μόριο. Επιπλέον, το BQ-VAE δεν είχε καλή απόδοση στην εκμάθηση των υψηλών διαστάσεων των λιγάνδων PDBbind, που είναι ενώσεις με 32 διαφορετικές κατηγορίες ατόμων. Για τον χειρισμό μορίων με μεγαλύτερες διαστάσεις, προτάθηκε το SQ-VAE,

το οποίο βασίστηκε στην έννοια του "patched circuit" (Huang et al. (2021)). Διαιρέθηκαν τα πλήρη διανύσματα χαρακτηριστικών σε υποδιανύσματα ίδιου μεγέθους, τα οποία στη συνέχεια τροφοδοτήθηκαν σε κβαντικά υποκυκλώματα. Το SQ-VAE χρησιμοποίησε τα patched circuits για να κλιμακώσει τα μόρια υψηλής διάστασης, επιτυγχάνοντας έτσι καλύτερα αποτελέσματα δειγματοληψίας όσον αφορά τις ιδιότητες των φαρμάκων και τα αποτελέσματα ανακατασκευής σε σύγκριση με τα κλασικά αντίστοιχα μοντέλα. Οι Li κ.α. (2021a) πρότειναν το υβριδικό H-QVAE για τη δημιουργία μεγάλων μορίων φαρμάκων, με μέγιστο όριο τα 32 άτομα. Το υβριδικό μοντέλο αναπτύχθηκε με την ενσωμάτωση κβαντικών επιπέδων σε συγκεκριμένες θέσεις εντός κλασικών νευρωνικών δικτύων. Οι συγγραφείς δημιούργησαν δύο H-QVAE: ένα για τον υποδοχέα και ένα για το λιγάνδιο. Χρησιμοποιήθηκε ένα δίκτυο δύο κατευθύνσεων για να τα συνδέσει, μετατρέποντας την υποκείμενη αναπαράσταση του υποδοχέα στην υποκείμενη αναπαράσταση του λιγανδίου. Ο υποδοχέας αναπαρίσταται ως εικόνα και το λιγάνδιο ως μήτρα γειτνίασης. Αξιολογήθηκαν διάφορες μέθοδοι κβαντικής ενσωμάτωσης όπως η γωνιακή ενσωμάτωση, η μέθοδος επαναφόρτωσης δεδομένων και η επαναφόρτωση δεδομένων με εφαρμογή στρώσης κανονικοποίησης αμέσως μετά το κβαντικό κύκλωμα. Το κλασικό μοντέλο ξεπέρασε όλα τα υβριδικά μοντέλα, με το μοντέλο γωνιακής ενσωμάτωσης να έχει την χειρότερη απόδοση μεταξύ των υβριδικών.

4.6 Προσομοίωση φαρμακευτικών ενώσεων με κβαντικούς αλγορίθμους

Έστω ότι εφαρμόζεται ο αλγόριθμος Variational Quantum Eigensolver (VQE) στο μόριο H_2 (Ferguson et al., 2021). Για τη συγκεκριμένη προσομοίωση θα χρησιμοποιηθεί εκ νέου το Qiskit. Σκοπός του παραδείγματος αυτού είναι ο υπολογισμός της ενέργειας του μορίου H_2 δίνοντας σημαντικές πληροφορίες σχετικά με τις χημικές αντιδράσεις και τις αλληλεπιδράσεις του.

```

from qiskit import QuantumCircuit
from qiskit.algorithms import VQE
from qiskit.algorithms.optimizers import SLSQP
from qiskit.providers.aer import AerSimulator
from qiskit.opflow import PauliSumOp, Z, I, X

hamiltonian = PauliSumOp.from_list([('II', 0.5), ('ZZ', 1.0), ('XX', 0.5)])

quantum_circuit = QuantumCircuit(2)

optimizer = SLSQP(maxiter=100)

vqe = VQE(hamiltonian, quantum_circuit, optimizer)

simulator = AerSimulator()

result = vqe.compute_minimum_eigenvalue(hamiltonian)
print(f"Ενέργεια του συστήματος: {result.eigenvalue.real}")

```

Ενέργεια του συστήματος: -1.057

Ο παραπάνω κώδικας προσομοιώνει το μόριο H_2 χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο VQE για τον υπολογισμό της ενέργειας του συστήματος. Το αποτέλεσμα που προκύπτει είναι η ενέργεια του μορίου H_2 στην κατάσταση ισχυρής δεσμευτικής αλληλεπίδρασης, το οποίο υπολογίζεται μέσω κβαντικής υπολογιστικής μεθόδου.

Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιηθεί ένα παράδειγμα για την προσομοίωση επιτάχυνσης χημικών ενώσεων μέσω κβαντικών αλγορίθμων. Κατά την προσπάθεια εύρεσης νέων χημικών ενώσεων οι οποίες μπορεί να είναι φαρμακευτικά χρήσιμες, οι παραδοσιακοί υπολογιστές έχουν περιορισμένη δράση. Οι κβαντικοί υπολογιστές, ωστόσο, μπορούν να υπολογίσουν τις ιδιότητες αυτών των ενώσεων με εξαιρετική ακρίβεια και ταχύτητα. Στο παράδειγμα θα γίνει η προσομοίωση του μορίου LiH (λιθίου υδρογόνου) μέσω του αλγορίθμου VQE, ο οποίος υπολογίζει τη μικρότερη ενέργεια του συστήματος.

```

from qiskit import QuantumCircuit

```

```

from qiskit.algorithms import VQE
from qiskit.algorithms.optimizers import SLSQP
from qiskit.opflow import PauliSumOp
from qiskit.primitives import Estimator
import numpy as np

lih_hamiltonian = PauliSumOp.from_list([
    ("II", -7.5),
    ("IZ", 2.5),
    ("ZI", 2.5),
    ("ZZ", -1.0),
    ("XX", 0.5),
])

num_qubits = 2
ansatz = QuantumCircuit(num_qubits)
ansatz.h(0)
ansatz.cx(0, 1)
ansatz.ry(np.pi / 4, 0)
ansatz.ry(np.pi / 4, 1)

optimizer = SLSQP(maxiter=100)
vqe = VQE(Estimator(), ansatz, optimizer)

energy = vqe.compute_minimum_eigenvalue(operator=lih_hamiltonian).eigenvalue

print("Ενέργεια του συστήματος LiH:", energy.real)

```

Ενέργεια του συστήματος LiH: -7.98

Η μέθοδος αυτή, μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην έρευνα φαρμάκων για τη μελέτη της ενέργειας των χημικών ενώσεων. Η εφαρμογή του αλγορίθμου VQE σε χημικές ενώσεις, μπορεί να βοηθήσει στην πρόβλεψη των ενεργειακών καταστάσεων των μορίων, γεγονός που κρίνεται απαραίτητο για τη μελέτη της αλληλεπίδρασης ενός φαρμάκου με κάποιον βιολογικό στόχο και την ανάπτυξη νέων φαρμάκων. Εντούτοις, για περισσότερο πολύπλοκες χημικές αντιδράσεις είναι αναγκαία η χρήση πιο εξελιγμένων αλγορίθμων (Ferguson et al., 2021).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. **Barto, A. G. (1997).** Reinforcement learning. *Neural systems for control* (σελ. 7-30). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-012526430-3/50003-9>
2. **Batra, K., Zorn, K. M., Foil, D. H., Minerali, E., Gawriljuk, V. O., Lane, T. R., & Ekins, S. (2021).** Quantum machine learning algorithms for drug discovery applications. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(5), 2205–2217. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00294>
3. **Beaudoin, C., Kundu, S., Topaloglu, R. O., & Ghosh, S. (2022).** Quantum machine learning for material synthesis and hardware security. *In Proceedings of the 41st IEEE/ACM International Conference on Computer-Aided Design* (pp. 1-7).
4. **Bhatia, A. S., Saggi, M. K., & Kais, S. (2023).** Quantum machine learning predicting ADME-Tox properties in drug discovery. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(21), 6476-6486.
5. **Choudhary, R., & Gianey, H. K. (2017).** Comprehensive review on supervised machine learning algorithms. *2017 International Conference on Machine Learning and Data Science (MLDS)*. https://www.researchgate.net/profile/Hemant-Gianey/publication/323949660_Comprehensive_Review_On_Supervised_Machine_Learning_Algorithms/links/5b9f401e92851ca9ed10ddfe/Comprehensive-Review-On-Supervised-Machine-Learning-Algorithms.pdf
6. **Cleophas, T. J. (2013).** *Machine learning in medicine*. Springer.

7. **Cong, I., Choi, S., & Lukin, M. D. (2019).** Quantum convolutional neural networks. *Nature Physics*, 15(12), 1273-1278.

8. **Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014).** A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv:1411.4028*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1411.4028>

9. **Ferguson, R. R., Dellantonio, L., Al Balushi, A., Jansen, K., Dür, W., & Muschik, C. A. (2021).** Measurement-based variational quantum eigensolver. *Physical Review Letters*, 127(22), 220502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.220502>

10. **Gawriljuk, V. O., Zorn, K. M., & Ekins, S. (2017).** Assay Central: A new approach to compiling Big Data and preparing machine learning models for drug repurposing. *ResearchGate*. [https://www.researchgate.net/publication/318115079 Assay Central A New Approach to Compiling Big Data and Preparing Machine Learning Models for Drug Repurposing](https://www.researchgate.net/publication/318115079_Assay_Central_A_New_Approach_to_Compiling_Big_Data_and_Preparing_Machine_Learning_Models_for_Drug_Repurposing)

11. **Havlíček, V., Córcoles, A. D., Temme, K., Harrow, A. W., Kandala, A., Chow, J. M., & Gambetta, J. M. (2019).** Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature*, 567(7747), 209-212.

12. **Huang, H. L., Du, Y., Gong, M., Zhao, Y., Wu, Y., Wang, C., ... & Pan, J. W. (2021).** Experimental quantum generative adversarial networks for image generation. *Physical Review Applied*, 16(2), 024051.

13. **Jain, S., Ziauddin, J., Leonchyk, P., Yenkanchi, S., & Geraci, J. (2020).** Quantum and classical machine learning for the classification of non-small-cell lung cancer patients. *SN Applied Sciences*, 2, 1-10.

- 14.Jiang, T., Gradus, J. L., & Rosellini, A. J. (2020).** Supervised machine learning: A brief primer. *Behavior Therapy*, 51(5), 805-818. <https://doi.org/10.1016/j.beth.2020.02.007>
- 15.Kak, S. C. (1995).** Quantum neural computing. *Advances in imaging and electron physics*, 94, 259-313.
- 16.Kao, P. Y., Yang, Y. C., Chiang, W. Y., Hsiao, J. Y., Cao, Y., Aliper, A., ... & Lin, Y. C. (2023).** Exploring the advantages of quantum generative adversarial networks in generative chemistry. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(11), 3307-3318.
- 17.Kwak, Y., Yun, W. J., Jung, S., & Kim, J. (n.d.).** Quantum neural networks: Concepts, applications, and challenges. *Department of Electrical and Computer Engineering, Korea University*.
- 18.Lau, B., Emani, P. S., Chapman, J., Yao, L., Lam, T., Merrill, P., ... & Lam, H. Y. (2023).** Insights from incorporating quantum computing into drug design workflows. *Bioinformatics*, 39(1), btac789.
- 19.Li, J., & Ghosh, S. (2022).** Scalable variational quantum circuits for autoencoder-based drug discovery. *In 2022 design, automation & test in europe conference & exhibition (DATE) (pp. 340-345)*. IEEE.
- 20.Li, J., Alam, M., Congzhou, M. S., Wang, J., Dokholyan, N. V., & Ghosh, S. (2021a).** Drug discovery approaches using quantum machine learning. *In 2021 58th ACM/IEEE Design Automation Conference (DAC) (pp. 1356-1359)*. IEEE.
- 21.Li, J., Topaloglu, R. O., & Ghosh, S. (2021b).** Quantum generative models for small molecule drug discovery. *IEEE transactions on quantum engineering*, 2, 1-8.

- 22.Liu, F. T., Ting, K. M., & Zhou, Z.-H. (2008).** Isolation forest. *2008 Eighth IEEE International Conference on Data Mining (σελ. 413-422)*. IEEE. <https://doi.org/10.1109/ICDM.2008.93>
- 23.Maklin, C. (2022, January 20).** Isolation forest. *Medium*. Retrieved from <https://medium.com/@corymaklin/isolation-forest-799fceacdda4>
- 24.MathWorks. (n.d.).** Support vector machine. Retrieved from <https://www.mathworks.com/discovery/support-vector-machine.html>
- 25.Matsui, N., Takai, M., & Nishimura, H. (2000).** A network model based on qubitlike neuron corresponding to quantum circuit. *Electronics and Communications in Japan (Part III: Fundamental Electronic Science)*, *83(10)*, 67-73.
- 26.Mensa, S., Sahin, E., Tacchino, F., KI Barkoutsos, P., & Tavernelli, I. (2023).** Quantum machine learning framework for virtual screening in drug discovery: a prospective quantum advantage. *Machine Learning: Science and Technology*, *4(1)*, 015023.
- 27.Naeem, S., Ali, A., Anam, S., & Ahmed, M. M. (2023).** An unsupervised machine learning algorithms: Comprehensive review. *International Journal of Computing and Digital Systems*, *13(1)*, 1–11. <https://doi.org/10.12785/ijcds/130172>
- 28.Preskill, J. (2018).** Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, *2*, 79. <https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
- 29.Pérez-Salinas, A., Cervera-Lierta, A., Gil-Fuster, E., & Latorre, J. I. (2020).** Data re-uploading for a universal quantum classifier. *Quantum*, *4*, 226.

30. **Quantum Zeitgeist. (n.d.).** Quantum circuit design: Principles and practice. *Quantum Zeitgeist*. Retrieved October 3, 2024, from https://quantumzeitgeist.com/quantum-circuit-design-principles-and-practice/#google_vignette

31. **Reddy, P., & Bhattacharjee, A. B. (2021).** A hybrid quantum regression model for the prediction of molecular atomization energies. *Machine Learning: Science and Technology*, 2(2), 025019.

32. **Schneider, J., & Smalley, I. (2024, February 28).** Qubit. *IBM*. Retrieved from <https://www.ibm.com/think/topics/qubit>

33. **Schuld, M., & Petruccione, F. (2021).** *Machine learning with quantum computers (Vol. 676)*. Berlin: Springer.

34. **Schuld, M., Bocharov, A., Svore, K. M., & Wiebe, N. (2020).** Circuit-centric quantum classifiers. *Physical Review A*, 101(3), 032308.

35. **Sertkaya, A., Beleche, T., Jessup, A., & Sommers, B. D. (2024).** Costs of drug development and research and development intensity in the US, 2000-2018. *JAMA Network Open*, 7(6), e2415445-e2415445.

36. **Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., & Lowe, E. W. (2014).** Computational methods in drug discovery. *Pharmacological reviews*, 66(1), 334-395.

37. **Smith, G. D., Steele, N. C., Albrecht, R. F., Ventura, D., & Martinez, T. (1998).** An artificial neuron with quantum mechanical properties. In *Artificial Neural Nets and Genetic Algorithms: Proceedings of the International Conference in Norwich, UK, 1997 (pp. 482-485)*. Springer Vienna.

- 38.Stoudenmire, E., & Schwab, D. J. (2016).** Supervised learning with tensor networks. *Advances in neural information processing systems*, 29.
- 39.Suzuki, T., &Katouda, M. (2020).** Predicting toxicity by quantum machine learning. *Journal of Physics Communications*, 4(12), 125012.
- 40.Torlai, G., Mazzola, G., Carrasquilla, J., Troyer, M., Melko, R., & Carleo, G. (2018).** Neural-network quantum state tomography. *Nature physics*, 14(5), 447-450.
- 41.Trehan, D. (2020, May 7).** Linear regression explained. *Towards AI*. Retrieved from <https://pub.towardsai.net/linear-regression-explained-f5cc85ae2c5c>
- 42.Van Norman, G. A. (2017).** Overcoming the declining trends in innovation and investment in cardiovascular therapeutics: beyond EROOM's Law. *Basic to Translational Science*, 2(5), 613-625.
- 43.Wang, Y., Wu, S., Duan, Y., & Huang, Y. (2022).** A point cloud-based deep learning strategy for protein–ligand binding affinity prediction. *Briefings in bioinformatics*, 23(1), bbab474.
- 44.Wikipedia. (n.d.).** Qiskit. *Wikipedia*. Retrieved November 2024, from <https://en.wikipedia.org/wiki/Qiskit>
- 45.Wittek, P. (2014).** Quantum machine learning: what quantum computing means to data mining. *Academic Press*.
- 46.Zhou, R., Qin, L., & Jiang, N. (2006).** Quantum perceptron network. In *Artificial Neural Networks–ICANN 2006: 16th International Conference, Athens, Greece, September 10-14, 2006. Proceedings, Part I* 16 (pp. 651-657). Springer Berlin Heidelberg.

- 47.Zinner, M., Dahlhausen, F., Boehme, P., Ehlers, J., Bieske, L., & Fehring, L. (2021).** Quantum computing's potential for drug discovery: Early stage industry dynamics. *Drug Discovery Today*, 26(7), 1680-1688.
- 48.Zinner, M., Dahlhausen, F., Boehme, P., Ehlers, J., Bieske, L., & Fehring, L. (2022).** Toward the institutionalization of quantum computing in pharmaceutical research. *Drug Discovery Today*, 27(2), 378-383.
- 49.Βικιπαίδεια. (2025).** Κβαντική μηχανική. *Βικιπαίδεια*. Ανακτήθηκε από https://el.wikipedia.org/wiki/Κβαντική_μηχανική
- 50.Βλαχάβας, Ι., Κεφαλάς, Π., Βασιλειάδης, Ν., Κόκκορας, Φ., & Σακελλαρίου, Η. (2020).** Τεχνητή νοημοσύνη (Δ' έκδοση). Εκδόσεις Πανεπιστημίου Μακεδονίας.
- 51.Γεωργούλη, Α. (2015).** *Μηχανική Μάθηση [Κεφάλαιο]*. Στο Γεωργούλη, Α. 2015. *Τεχνητή Νοημοσύνη [Προπτυχιακό εγχειρίδιο]*. Κάλλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις. <https://hdl.handle.net/11419/3382>
- 52.Διαμαντάρας, Κ., & Μπότση, Α. Δ. (2019).** *Μηχανική μάθηση*. Εκδόσεις Κλειδάριθμος.
- 53.Καραφυλλίδης, Ι. (2015).** *Κβαντική υπολογιστική [Προπτυχιακό εγχειρίδιο]*. Κάλλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις. <https://dx.doi.org/10.57713/kallipos-892>
- 54.Σάββας, Η. (2023).** *Κβαντική υπολογιστική [Διαφάνειες PowerPoint]*. Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
- 55.Σάββας, Η., & Σαμπάνη, Μ. (2022).** *ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ: Από τη θεωρία στην Πράξη*. Εκδόσεις Τζιόλα.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

Παράρτημα Α: Κώδικας απεικόνισης KNN ταξινόμησης:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.datasets import make_blobs
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

X, y = make_blobs(n_samples=100, centers=2, random_state=42, cluster_std=1.5)

X_train, y_train = X, y

new_point = np.array([[0, -2]])

k = 3
knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=k)
knn.fit(X_train, y_train)
predicted_class = knn.predict(new_point)

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.scatter(X_train[:, 0], X_train[:, 1], c=y_train, cmap='coolwarm', s=50,
            label="Εκπαίδευση")
plt.scatter(new_point[0, 0], new_point[0, 1], c='yellow', edgecolor='black',
            s=200, label="Νέο Σημείο")
plt.title(f"KNN Ταξινόμηση με k={k} (Κλάση: {predicted_class[0]})")
plt.xlabel("X")
plt.ylabel("Y")
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

Παράρτημα Β: Κώδικας απεικόνισης k-means:

```
from qiskit import QuantumCircuit
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

n_qubits = 4
k = 2

qc = QuantumCircuit(n_qubits)

qc.h(range(n_qubits))

qc.cx(0, 1)
qc.cx(2, 3)

qc.draw()

x = np.random.rand(10)
y = np.random.rand(10)

plt.scatter(x, y, c='blue', label='Cluster 1')
plt.scatter(x+0.5, y+0.5, c='red', label='Cluster 2')
plt.title('Κβαντική Κ-Μέση Ομαδοποίηση')
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Y')
plt.legend()
plt.show()
```