

КАЗИОНОВ МАКСИМ

Хмельницький національний університет

ORCID ID: [0009-0004-0177-3336](https://orcid.org/0009-0004-0177-3336)e-mail: mr.kazonov@gmail.com**СКРИПНИК ТЕТЯНА**

Хмельницький національний університет

ORCID ID: [0000-0002-8531-5348](https://orcid.org/0000-0002-8531-5348)e-mail: tkskripnik1970@gmail.com**БАРМАК ОЛЕКСАНДР**

Хмельницький національний університет

ORCID ID: [0000-0003-0739-9678](https://orcid.org/0000-0003-0739-9678)e-mail: alexander.barmak@gmail.com

КВАНТОВИЙ МЕТОД ОПОРНИХ ВЕКТОРІВ: РОЗРОБКА ВАРІАЦІЙНИХ АЛГОРИТМІВ ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ КЛАСИФІКАЦІЇ ДАНИХ У ТЕХНІЧНИХ, ПРИРОДНИЧИХ І СОЦІАЛЬНО-ЕКОНОМІЧНИХ СИСТЕМАХ

У роботі наведені результати дослідження застосування квантового методу опорних векторів у різних сферах, зокрема в технічних, природничих і соціально-економічних системах. Для висвітлення способів застосування квантового підходу у технічних інформаційних системах було використано проблему класифікації зловмисного трафіку, для природничих систем – проблему класифікації якості води, для економічних систем – проблему класифікації відтоку клієнтів. У випадку класифікації зловмисного трафіку, квантова модель продемонструвала кращу ефективність порівняно з класичними методами, хоча час навчання був трохи більшим через обмежену доступність квантових комп'ютерів. Враховуючи потенціал квантового обчислення для обробки великого обсягу даних та складних аналітичних завдань, його застосування в кібербезпеці може сприяти виявленню та прогнозуванню кібератак, захисту мереж та систем від загроз, а також виявленню вразливостей і встановленню механізмів їх усунення.

У випадку екологічних досліджень, класичні методи та квантовий класифікатор продемонстрували приблизно однакову якість класифікації, але результати не досягали еталонного рівня. Для поліпшення моделей можна використовувати кращі методи класифікації або комбінувати класичні методи з квантовими для отримання більш точних результатів.

У випадку прогнозування відтоку клієнтів у фінансових задачах, квантовий метод опорних векторів перевершив класичні методи, що свідчить про його великий потенціал, який може бути реалізований у якісні результати у майбутньому. Для подальшого розвитку таких застосувань необхідно вдосконалювати алгоритми, збільшувати кількість квантових ресурсів та активно використовувати нові підходи до навчання та оптимізації моделей.

Ключові слова: штучний інтелект, машинне навчання, квантові обчислення, квантовий метод опорних векторів, технічні інформаційні системи.

KAZIONOV MAKSYM, SKRYPNYK TETYANA, BARMAK OLEXSANDER

Khmelnitskyi National University

QUANTUM SUPPORT VECTOR MACHINES: DEVELOPING VARIATIONAL ALGORITHMS FOR DATA CLASSIFICATION IN TECHNICAL, NATURAL, AND SOCIO-ECONOMIC SYSTEMS

The paper presents research results on the application of the quantum support vector machine method in various domains, including technical, natural, and socio-economic systems. To explore the utilization of the quantum approach in technical information systems, the problem of malicious traffic classification was investigated. For natural systems, the classification of water quality was addressed, while customer churn classification was tackled in economic systems.

In the case of malicious traffic classification, the quantum model demonstrated superior effectiveness compared to classical methods, albeit with slightly longer training times due to limited availability of quantum computers. Considering the potential of quantum computing in processing large volumes of data and complex analytical tasks, its application in cybersecurity can contribute to the detection and prediction of cyber-attacks, network and system protection against threats, as well as the identification of vulnerabilities and the establishment of mitigation mechanisms.

Regarding ecological research, classical methods and the quantum classifier showcased similar classification quality, but the results did not reach the benchmark level. To enhance the models, one can leverage improved classification methods or combine classical and quantum approaches to achieve more precise results. In the context of customer churn prediction in financial tasks, the quantum support vector machine method outperformed classical methods, highlighting its significant potential for yielding high-quality results in the future. To further develop such applications, algorithm refinement, increased availability of quantum resources, and the active utilization of new approaches for training and model optimization are necessary.

Keywords: artificial intelligence, machine learning, quantum computing, quantum support vector machines, technical information systems.

Вступ та постановка проблеми

Машинне навчання є потужним інструментом для використання у різних галузях. Застосування методів машинного навчання кардинально змінюють галузі та поглиблюють розуміння складних структур даних. Стрімке зростання машинного навчання можна пояснити кількома ключовими факторами. По-перше, бурхливе зростання об'єму цифрових даних надало величезні обсяги інформації для аналізу, що призвело до

революційних відкриттів та ідей. По-друге, розвиток обчислювальних потужностей і апаратних можливостей уможливив розробку складних моделей і алгоритмів, які можуть обробляти і витягувати значущі закономірності з величезних масивів даних. Класичні машини опорних векторів (SVM) відіграли одну з вирішальних ролей у цій революції машинного навчання, надаючи ефективні алгоритми для задач класифікації та регресії. У дослідженні [1] було встановлено, що класичні SVM, хоч і проявляють високу ефективність у багатьох застосуваннях, мають свої обмеження. Зі зростанням об'єму та складності наборів даних, класичні SVM зазнають викликів у питанні обчислювальної ефективності. Час навчання значно зростає, а вимоги до пам'яті стають все більш вагомими. Крім того, використання класичних методів опорних векторів може ускладнити їх ефективність у завданнях, які виявляють квантові властивості. Ці обмеження спонукали до дослідження альтернативних підходів, таких як квантові обчислення, з метою подолання цих проблем і відкриття нових можливостей для машинного навчання. Отже, головною метою цієї статті є дослідження квантового методу опорних векторів у контексті задач класифікації для різних галузей.

Аналіз останніх джерел

Квантові обчислення відкривають нові можливості для вирішення складних завдань у багатьох сферах науки, технологій та соціально-економічного розвитку. Квантові комп'ютери забезпечують значно швидші та потужніші обчислювальні можливості, які можна використовувати для обробки та аналізу великих обсягів даних у різних галузях, включаючи науку про дані, медицину, фінанси, квантову хімію, чисту енергетику, безпечні комунікації тощо. У інформаційних технічних системах існує потреба аналізувати великі обсяги даних щодо роботи машин та обладнання, з метою виявлення проблем та зниження витрат на обслуговування. У дослідженні [2] було розглянуто використання квантового алгоритму для класифікації пошкоджень деталей за фотозображеннями. Висновок авторів статті підкреслює, що квантове машинне навчання має перспективи при розв'язанні реальних проблем, зокрема в галузі комп'ютерного зору.

У природничих науках, таких як біологія та екологія, виникає потреба у класифікації значних обсягів даних для проведення наукових досліджень та вивчення природних процесів. Використання квантового методу опорних векторів в природничих науках може бути цінним для класифікації даних та аналізу природних процесів. У дослідженні [3] буде досліджено застосування квантового методу опорних векторів для класифікації молекулярних властивостей.

Квантові алгоритми також знаходять своє застосування у соціально-економічних системах для аналізу обширних обсягів даних про споживачів, їх поведінку та інші фактори, які впливають на бізнес-рішення. Один із прикладів використання квантових алгоритмів у цій галузі наведений у дослідженні [4], де застосовувався квантовий метод опорних векторів для класифікації шахрайських платежів. Це дозволяє організаціям попереджати можливі проблеми та приймати своєчасні рішення. Крім того, квантовий метод опорних векторів може допомогти керувати кредитним ризиком, знаходячи оптимальний баланс між ризиком та доходом. Усі ці застосування дозволяють фінансовим установам знизити ризики та максимізувати прибуток, забезпечуючи стійке та ефективне функціонування на ринку.

Мета даної роботи полягає у дослідженні застосування ще відносно нового і невідомого квантового підходу (на прикладі методу опорних векторів) для технічних, природничих та соціально-економічних інформаційних систем, які потребують класифікації та мають великі обсяги даних..

Теоретичний матеріал

Метод опорних векторів (SVM) – це алгоритм навчання з учителем, що використовується для класифікації, регресії та виявлення викидів [5]. Основна ідея SVM базується на концепції гіперплощини максимальної ширини (ГМПШ), яка є лінійною границею рішень і відокремлює дані на різні класи з максимальною шириною між границею рішень і найближчими точками даних. Завдяки трюку ядра, який дозволяє відображати вхідні дані в більш багато-вимірний простір, SVM може вирішувати як лінійні, так і нелінійні задачі класифікації. Розглянемо задачу бінарної класифікації, в якій $X = \mathbb{R}^d$ – простір об'єктів, $Y = \{-1, +1\}$ – множина допустимих відповідей (цільова ознака), X – навчальна вибірка.

$$X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^l. \quad (1)$$

Будемо клас $+1$ називати позитивним, а клас -1 – негативним. Тут d – розмірність ознакового простору, l – кількість прикладів у навчальній вибірці.

Лінійна модель класифікації визначається таким чином:

$$a(x) = \text{sign}(w, x + b) = \text{sign}\left(\sum_{j=1}^d w_j x_j + b\right), \quad (2)$$

де $w \in \mathbb{R}^d$ – вектор вагів, $b \in \mathbb{R}$ – зсув, sign^* – функція "сигнум", що повертає знак свого аргументу, $a(x)$ – відповідь класифікатора на прикладі x . Часто вважають, що серед ознак є константа, $x_{d+1} = 1$. У цьому випадку немає необхідності вводити зсув b , і лінійний класифікатор можна задавати так:

$$a(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle \quad (3)$$

Геометрично лінійний класифікатор відповідає гіперплощині з вектором нормалі w , яка задається рівнянням $w, x = 0$. Величина скалярного добутку w, x пропорційна відстані від гіперплощини до точки x , а його знак показує, з якого боку від гіперплощини розташована ця точка. Якщо бути точним, відстань від точки з радіус-вектором x_A до площини $w, x = 0$:

$$p(x_A, w, x = 0) = \frac{w, x}{|w|} \quad (4)$$

Таким чином, лінійний класифікатор розділяє простір на дві частини за допомогою гіперплощини, і при цьому один напівпростір відносить до позитивного класу, а інший – до негативного. Задачу методу опорних векторів можна звести до задачі безумовної оптимізації функціоналу, який має вигляд верхньої оцінки на частку неправильних відповідей. Якщо подати цю задачу за допомогою такої умови:

$$\begin{aligned} \square \xi_i &\geq 1 - y_i(w, x_i + b) \\ \square \xi_i &\geq 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Оскільки при цьому у функціоналі потрібно, щоб штрафи ξ_i були якомога меншими, то можна отримати таку явну формулу для них:

$$\xi_i = \max(0, 1 - y_i(w, x_i + b)). \quad (6)$$

Цей вираз для ξ уже враховує в собі всі обмеження задачі, описаної вище. Отже, виходячи з цього ми отримаємо безумовну задачу оптимізації:

$$\frac{1}{2} ||w||^2 + p \sum_{i=1}^l \max(0, 1 - y_i(w, x_i + b)) \rightarrow \min_{w, b} \quad (7)$$

У методі опорних векторів для розв'язання нелінійних задач класифікації необхідне використання ядер [6]. Ядро представляє собою функцію, яка визначається наступним способом:

$$K(x, y) = (\phi(x), \phi(y)), \quad (8)$$

де $\phi(x)$ – вектор вагів, перетворення, яке здійснює перехід з простору R^d в простір H , x, y – вектори.

Квантовий метод опорних векторів (Quantum Support Vector Machine) є розширенням класичного методу опорних векторів (SVM) на основі принципів квантових обчислень. Він використовує квантові алгоритми та квантові властивості для розв'язання задач класифікації і регресії.

Основними компонентами QSVM є квантові біти та квантові гейти, які використовуються для здійснення певних операцій з даними. Подібно до класичної бітової інформації, квантова бітова інформація позначається як кубіт і зазвичай представляється за допомогою нотації Дірака:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

та

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Розглядаючи квантову критерію суперпозиції:

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (11)$$

де α, β тp і $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$; з цього рівняння слідує що $|\varphi$ може перебувати як у стані $|0\rangle$, так і у стані $|1\rangle$ з ймовірністю $|\alpha|^2$ і $|\beta|^2$, відповідно.

Квантові гейти є основними будівельними блоками для будь-яких квантових схем, зокрема й тих, що застосовуються для машинного навчання. Можна сказати, що це своєрідний алфавіт квантових обчислень.

До елементарних однокубітних квантових гейтів належать Полі-Х (Pauli-X), Полі-У (Pauli-Y), Полі-З (Pauli-Z), Гадамар (Hadamard) та Зсув фази (Phase Shift). Нижче приведені формули для цих квантових гейтів:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} : \text{він перемикає } |0 \text{ на } |1 \text{ і } |1 \text{ на } |0;$$

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} : \text{він перемикає } |0 \text{ на } i|1 \text{ і } |1 \text{ на } -i|0;$$

$$z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} : \text{він залишає } |0 \text{ незмінним і перемикає } |1 \text{ на } -|1;$$

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} : \text{він створює суперпозицію двох станів, та перемикає } |0 \text{ на } \frac{|0+|1}{\sqrt{2}} \text{ та}$$

перемикає $|1$ на $\frac{|0-|1}{\sqrt{2}}$;

$$\hat{U}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\sigma} \end{pmatrix} : \text{він залишає } |0 \text{ незмінним і перемикає } |1 \text{ на } e^{-i\sigma} |1;$$

Для двокубітної конфігурації гейтів використовуються Controlled NOT (CNOT) та SWAP.

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} : \text{він використовується для 2 кубітів і виконує операцію NOT, коли}$$

керуючий кубіт дорівнює $|1$. Це призводить до перемикання між двома останніми рядками матриці

тотожності. $SWAP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} : \text{призводить до переходу з рядка 2 до рядка 3 у матриці тотожності.}$

Квантова варіаційна схема – це квантова схема, яка може налаштовуватись за допомогою параметричних вентилів, щоб досягти оптимальних результатів. Для здійснення класифікації спочатку потрібно розробити варіаційний алгоритм, який може використовувати Гільбертів простір квантового процесора, щоб знайти оптимальну роздільну гіперплощину, як це робить метод опорних векторів.

Квантова оцінка ядра – це метод, який використовується для розв'язання задачі класифікації шляхом використання квантових обчислень. Задача по-лягає в знаходженні границі прийняття рішень на основі відомих даних. Ядро в цьому випадку відображає взаємодію між даними, які використовуються для розв'язання задачі класифікації.

Квантова оцінка ядра використовує квантові вимірювання, щоб знайти відстань між векторами даних в квантовому просторі, яка може бути використана для розрахунку ядра. Цей метод дозволяє знаходити коефіцієнти ядра, які можуть бути використані для класифікації нових даних. Ядро обраховується наступним чином:

$$K(x, y) = |\langle \Phi(x) | \Phi(y) \rangle|^2, \tag{12}$$

де $\Phi(x)$ – функція, яка переводить з одного простору в інший; x, y – вектори.

Після створення ядра, ми можемо використовувати звичайний класичний метод опорних векторів. Щоб визначити мітку для іншої точки, потрібно обчислити ядро на квантовому комп'ютері і використати результат обчислення для присвоєння нової мітки.

Результати та дискусія

Для порівняння та демонстрації ефективності класичного методу опорних векторів і його квантової реалізації, було використано три різні задачі: класифікацію зловмисного трафіку, оцінку якості води та прогнозування відтоку клієнтів. Джерелами даних були використані публічні набори даних: SDN для класифікації зловмисного трафіку [6], Water Quality для оцінки якості води[7] та Churn Modelling для прогнозування відтоку клієнтів[8]. Схему реалізації класичного методу опорних векторів та його квантової версії можна побачити на рис. 1.

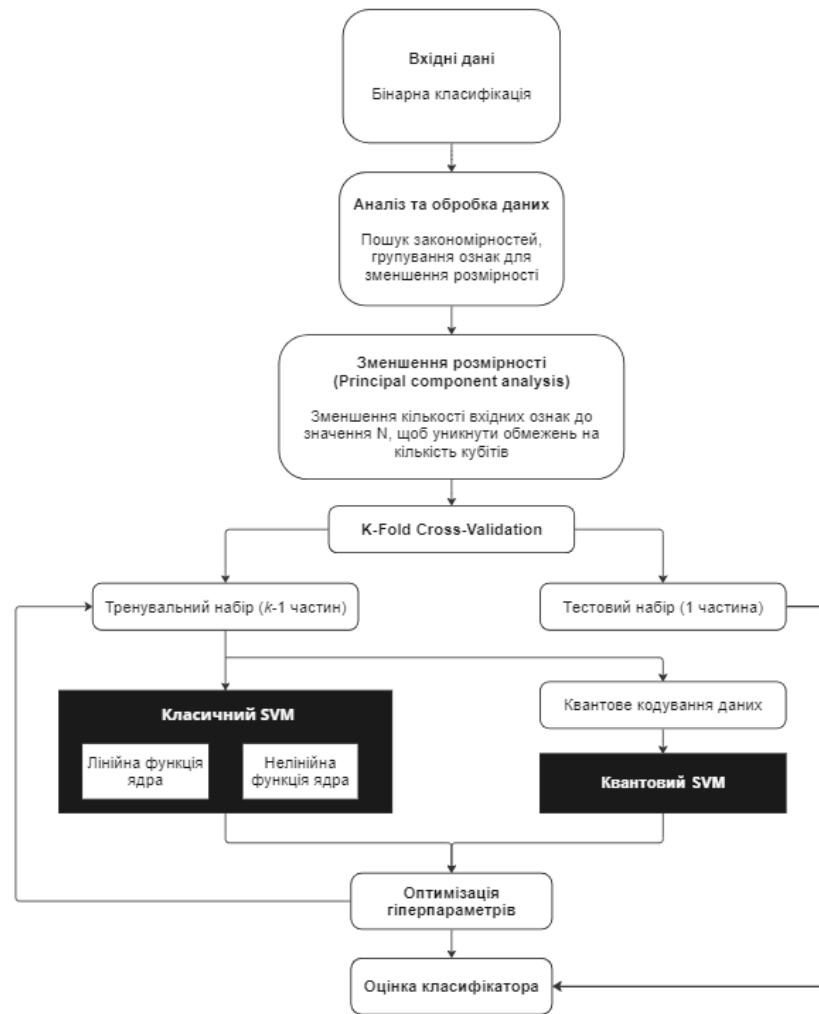


Рис. 1. Схема алгоритму класифікації класичний методом опорних векторів та квантовим

В задачі класифікації зловмисного трафіку квантова модель продемонструвала кращу ефективність порівняно з класичними методами, хоча час навчання був трохи більшим через обмежену доступність квантових комп'ютерів.

Таблиця 1

Результати класифікації зловмисного трафіку

Модель	Точність	Влучність	Повнота
Лінійний класифікатор	0.7162	0.6409	0.5458
Поліноміальний класифікатор	0.8974	0.8796	0.8410
Квантовий класифікатор	0.9255	0.8972	0.9043

В задачі класифікації якості води класичні методи та квантовий класифікатор продемонстрували приблизно однакову якість класифікації, але результати не досягали еталонного рівня.

Таблиця 2

Результати класифікації якості води

Модель	Точність	Влучність	Повнота
Лінійний класифікатор	0.6098	0.0000	0.0000
Поліноміальний класифікатор	0.5952	0.4844	0.1280
Квантовий класифікатор	0.5863	0.4452	0.2029

В задачі класифікації відтоку квантовий метод опорних векторів перевершив класичні методи, що свідчить про його великий потенціал, який може бути реалізований у якісні результати у майбутньому.

Результати класифікації відтоку клієнтів

Модель	Точність	Влучність	Повнота
Лінійний класифікатор	0.7984	1.000	0.01
Поліноміальний класифікатор	0.840	0.692	0.41
Квантовий класифікатор	0.843	0.695	0.41

Висновки

Квантовий метод опорних векторів є перспективним напрямком у сфері машинного навчання, що поєднує класичну модель опорних векторів з квантовими обчисленнями. Він пропонує новий підхід до розв'язання задач класифікації, який базується на використанні квантових алгоритмів та квантових бітів.

Одним з головних переваг квантового методу опорних векторів є його потенціал для обробки великих обсягів даних швидше, ніж класичні методи. Квантові системи дозволяють виконувати обчислення паралельно та ефективно, що відкриває можливості для прискорення обробки і аналізу даних. Крім того, квантовий метод опорних векторів зберігає властивості класичного методу опорних векторів, зокрема, здатність до розрізнення складних класів та роботи з багатовимірними наборами даних.

Проте, існують певні виклики та недоліки, пов'язані з квантовим методом опорних векторів. Перш за все, для успішного застосування необхідно мати належну кількість квантових бітів, а це може бути вимогливо для реалізації в реальних системах. Також оптимізація та налаштування квантових моделей є складним завданням, оскільки вимагає розробки ефективних алгоритмів оптимізації та управління ресурсами.

У майбутньому квантовий метод опорних векторів може стати потужним інструментом для розв'язання складних задач класифікації та аналізу даних. Подальші дослідження в галузі квантового машинного навчання та розвиток квантових обчислювальних платформ допоможуть розкрити повний потенціал цього методу і покращити його.

Література

1. Auria Laura, Moro Rouslan (2008). Support Vector Machines (SVM) as a Technique for Solvency Analysis. SSRN Electronic Journal. 1. 10.2139/ssrn.1424949.
2. Guijo D., Onofre V., Bimbo G.D., Mugel S., Estepa D., ... Orús R. (2022). Quantum artificial vision for defect detection in manufacturing. ArXiv, 2208.04988.
3. Flöther Frederik (2023). The state of quantum computing applications in health and medicine. 10.48550/arXiv.2301.09106.
4. Pistoia M., Ahmad S.F., Ajagekar A., Buts A., Chakrabarti S., ... Yalovetzky R. (2021). Quantum Machine Learning for Finance. 10.48550/arXiv.2109.04298.
5. SVM Wikipedia. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Support_vector_machine
6. SDN Dataset. URL: <https://data.mendeley.com/datasets/jxpfjc64kr/1>
7. Water Quality dataset. URL: <https://www.kaggle.com/datasets/adityakadiwal/water-potability>
8. Churn modeling dataset. URL: <https://www.kaggle.com/datasets/shrutimechlearn/churn-modelling>