

QML4Med

Erforschung des Potenzials von Quantum Machine Learning für personalisierte, medizinische Anwendungsfälle

Programm / Ausschreibung	Expedition Zukunft, Expedition Zukunft 2022, Expedition Zukunft Start 2022	Status	abgeschlossen
Projektstart	01.05.2024	Projektende	30.04.2025
Zeitraum	2024 - 2025	Projektlaufzeit	12 Monate
Keywords	Quantum Computing, Machine Learning, Medizin, Prognosemodellierung, Modellinterpretation		

Projektbeschreibung

Quantum Machine Learning (QML) hat sich in den letzten Jahren als aussichtsreiche Fusion von Quantum Computing und Machine Learning entwickelt, die das Potenzial hat, die bahnbrechenden Errungenschaften des maschinellen Lernens mit den beschleunigten Rechenoperationen und hochdimensionalen Darstellungen von Quanten-Algorithmen zusammenzuführen.

In vielen Bereichen der Wirtschaft und Gesellschaft nehmen große Datenmengen stetig zu, deren Potenzial für Prognosemodelle, Modellierungen und Wissensextraktion durch QML effizienter und effektiver als mit konventionellen Algorithmen gehoben werden könnte. Besonders im medizinischen Kontext haben sich Prädiktionsmodelle basierend auf sensiblen Patient*innendaten als wertvolles diagnostisches Hilfswerkzeug etabliert und könnten besonders von disruptiven Möglichkeiten durch QML profitieren.

Das angestrebte Projekt QML4Med hat sich daher zum Ziel gesetzt, das klinische Innovationspotenzial von QML zu evaluieren und voranzutreiben. Da im klinischen Alltag ärztliche Entscheidungen situationsbedingt auf unterschiedlichen Datenformaten beruhen, wird QML4Med das Potenzial von State-of-the-Art QML-basierten Prädiktionsmethoden für drei beispielhafte, klinisch hochrelevante Fragestellungen ausloten: (a) Tabellarischen Blutlaborwerte dienen als Basis für die Vorhersage von akutem Nierenversagen nach Bluttransfusionen, (b) aus EKG-Zeitsignalen werden Blut-Hämoglobinwerte sowie Diagnosen ermittelt und (c) Tumore sollen auf MRT-Bildern erkannt werden.

Auf simulierter und echter Quanten-Rechenhardware werden detaillierte Analysen zu Modellgüte und Trainingszeit diverser QML-Ansätze (Variational-, Kernel-, und Convolutional-Methoden) durchgeführt. QML4Med kann dabei aus Vorprojekten sowohl auf eine breite Datenbasis als auch Benchmark-Ergebnisse von Prognosemodellen basierend auf klassischem Machine Learning zurückgreifen.

Ein weiterer Schwerpunkt des Projekts liegt auf der Interpretierbarkeit der QML-Modelle. Besonders im sensiblen medizinischen Umfeld ist es essenziell, die Modellentscheidungen für Menschen transparent und nachvollziehbar zu halten, was QML4Med über die Evaluierung diverser Modellerklärungsansätze adressieren wird.

Neben dem Aufbau von Expertise sollen die Sondierungen in QML4Med dazu beitragen, vielversprechende Kategorien von medizinischen Problemstellungen für QML aufzuzeigen, um langfristig einen Beitrag zu disruptiven Lösungsansätzen für große gesellschaftliche Herausforderungen im Gesundheitswesen anzustreben. So sollen in Zukunft die Erkenntnisse aus

QML4Med dazu beitragen, das medizinische Personal in der objektiven und systematischen Entscheidungsfindung in der Diagnose und Behandlung zu unterstützen, um die Patient*innenversorgung zu optimieren. Zwei langjährige universitäre Forschungspartner haben daran auch besonderes Interesse bekundet und unterstützen das angestrebte Projekt mit angehängten LOIs.

QML4Med wird die Richtung von anschließenden F&E&I-Aktivitäten maßgeblich steuern, (über)regionale Kooperationen mit Industrie und Forschung stärken und einen signifikanten Beitrag zur Technologiesouveränität Österreichs in dem vielversprechenden Innovationsfeld Quantum Computing leisten.

Abstract

Quantum Machine Learning (QML) has emerged in recent years as a promising fusion of quantum computing and machine learning, which has the potential to combine the groundbreaking achievements of machine learning with the accelerated computational operations and high-dimensional representations of quantum algorithms.

In many areas of the economy and society, the amounts of data are constantly increasing, whose potential for predictive models, modeling and knowledge extraction could be leveraged more efficiently and effectively with QML than with conventional algorithms. Especially in the medical context, prediction models based on sensitive patient data have established themselves as a valuable diagnostic tool and could particularly benefit from the disruptive possibilities offered by QML.

The project QML4Med has therefore set itself the goal of evaluating and advancing the clinical innovation potential of QML. Since medical decisions in everyday clinical practice are based on different data formats depending on the situation, QML4Med will explore the potential of state-of-the-art QML-based prediction methods for three exemplary, clinically highly relevant questions: (a) tabular blood laboratory values serve as a basis for the prediction of acute kidney failure after blood transfusions, (b) blood hemoglobin values and diagnoses are determined from ECG time signals and (c) tumors are to be detected on MRI images.

Detailed analyses of model quality and training time of various QML approaches (variational, kernel and convolutional methods) are carried out on simulated and real quantum computing hardware. QML4Med can draw on a broad database from previous projects as well as benchmark results from prediction models based on classic machine learning.

Another focus of the project is on the interpretability of the QML models. Especially in the sensitive medical environment, it is essential to keep model decisions transparent and comprehensible for people, which QML4Med will address by evaluating various model explanation approaches.

In addition to building up expertise, the explorations in QML4Med are intended to help identify promising categories of medical problems for QML to contribute to disruptive solutions for major social challenges in the healthcare system in the long term. In the future, the findings from QML4Med should help to support medical staff in objective and systematic decision-making in diagnosis and treatment in order to optimize patient care. Two long-standing university research partners have also expressed particular interest in this project and are supporting the project proposal with the attached LOIs. QML4Med will significantly steer the direction of subsequent R&D&I activities, strengthen (inter)national cooperation with industry and research and make a significant contribution to Austria's technological sovereignty in the promising innovation field of quantum computing.

Endberichtkurzfassung

Quantum Machine Learning ist ein vielversprechendes Forschungsfeld, das die bahnbrechenden Errungenschaften von datengetriebenem Machine Learning mit den neuartigen Rechenoperationen von Quantencomputern zusammenführt. Das

Projekt QML4Med hatte sich daher zum Ziel gesetzt, das klinische Innovationspotenzial dieser neuen Technologie anhand diverser medizinischer Problemstellungen zu evaluieren, bei denen Quantum Machine Learning perspektivisch zur Unterstützung ärztlicher Entscheidungsfindung eingesetzt werden könnte.

Im Rahmen von QML4Med wurden daher aktuelle QML-Ansätze systematisch anhand multimodaler Daten (z.B. tabellarische Blutlaborwerte, EKG-Zeitsignale, 2D-Thorax-Ultraschallbilder, oder 3D-Abdominal-CT-Bilder) untersucht. Ein besonderer Fokus lag dabei auf der Robustheit der Modelle gegenüber hardwarebedingten Rauschstörungen; einem der zentralen Hindernisse für den praktischen Einsatz heutiger Quantencomputer. Analysen auf realen und simulierten Quantenprozessoren ermöglichten eine fundierte Bewertung des Modellverhaltens und der klinischen Anwendbarkeit. Als zentrales anwendungsorientiertes Ergebnis konnten wir zeigen, dass QML-Modelle mit moderater Architekturkomplexität besonders geeignet sind. Während komplexere Modellarchitekturen in idealisierten, rauschfreien Simulationen hohe Modell-Genauigkeiten erzielen, erweisen sie sich unter realistischen Rauschbedingungen als deutlich anfälliger und somit weniger robust im praktischen Einsatz.

Ein inhaltliches Highlight des Projekts war die Entwicklung einer neuartigen, besonders rauschresistenten QML-Architektur, die in umfangreichen empirischen Studien ihre Robustheit und Performanz auf multimodalen medizinischen Daten unter Beweis stellte. Im Rahmen von QML4Med konnte dieser Ansatz sogar erfolgreich auf hochaufgelöste Bilddaten ausgeweitet werden; ein bedeutender Fortschritt, da solch komplexen Daten bislang als besondere Herausforderung für den praktischen Einsatz von QML galten. Als alternativer Ansatz zur Verarbeitung hochdimensionaler medizinischer Daten (z.B. etwa 3D-CT-Daten) wurden in QML4Med auch hybride Modelle statistisch untersucht, die klassische und quantenbasierte Elemente kombinieren. Unsere Ergebnisse zeigten, dass hybride Modelle eine vielversprechende Brückentechnologie darstellen, um aktuelle Quantenhardware bereits heute sinnvoll in medizinischen Anwendungen nutzbar zu machen.

Ein weiteres zentrales Element von QML4Med war die Interpretierbarkeit von QML-Modellen, um deren Entscheidungsprozesse für medizinische Anwender:innen transparenter und nachvollziehbarer zu machen. Aufgrund ihrer komplexen Funktionsweise führen Quanten-Modelle eine zusätzliche Abstraktionsebene ein, weshalb die gezielte Erklärbarkeit ihrer Entscheidungen besonders wichtig ist, um Vertrauen in sicherheitskritischen Bereichen wie der Medizin zu stärken. Mehrere modellagnostische Methoden wurden dazu implementiert und konnten erfolgreich für verschiedene Fragestellungen eingesetzt werden, z.B. um die für die Modellentscheidung relevantesten Blutlaborparameter zu bestimmen oder Bildbereich zu markieren, die für die Pathologie-Erkennung ausschlaggebend waren. Besonders hervorzuheben ist die erstmalige Anwendung solcher Methoden auf hochaufgelöste MR-Bilddaten zur binären Klassifikation von Gehirntumoren.

Abschließend konnte QML4Med auch im Bereich Dissemination, Vernetzung und Kompetenzaufbau wichtige Fortschritte erzielen. Die zentralen Projektergebnisse wurden auf internationalen Fachkonferenzen in mehreren wissenschaftlichen, anwendungsorientierten Beiträgen präsentiert. Durch gezielten Wissenstransfer und die Rekrutierung neuer Fachkräfte wurde zudem die institutionelle Expertise gestärkt. Kontakte zu relevanten Akteuren aus Wissenschaft und Industrie wurden intensiviert und Folgeprojekte bereits initiiert. Damit hat das Projekt nicht nur seine wissenschaftlichen, sondern auch seine strukturellen Ziele erfolgreich umgesetzt und leistet damit einen Beitrag, langfristig die Sicherheit und Qualität der medizinischen Versorgung durch fortschrittliche Quantentechnologien zu verbessern.

Projektpartner

- RISC Software GmbH