



**INSTITUTO LATINO AMERICANO DE CIÊNCIAS
DA VIDA E DA NATUREZA (ILACVN)
ENGENHARIA FÍSICA**

Algoritmos Quânticos Híbridos e Aplicações em Problemas de Otimização

Anton Simen Albino

**Foz do Iguaçu
2021**



**INSTITUTO LATINO AMERICANO DE CIÊNCIAS
DA VIDA E DA NATUREZA (ILACVN)
ENGENHARIA FÍSICA**

Algoritmos Quânticos Híbridos e Aplicações em Problemas de Otimização

Anton Simen Albino

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto Latino Americano da Vida e Na-
tureza como requisito parcial à obtenção ao
título de Bacharel em Engenharia Física

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Bloot

Foz do Iguaçu
2021

ANTON SIMEN ALBINO

ALGORITMOS QUÂNTICOS HÍBRIDOS E APLICAÇÕES EM PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino Americano da Vida e Natureza como requisito parcial à obtenção ao título de Bacharel em Engenharia Física

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Bloot

Aprovado pela banca examinadora em: ____ / ____ / ____

Prof. Dr. Rodrigo Bloot - UNILA
Prof.^o Orientador

Prof. Dr. Tiago Antonio Alves Coimbra - CEPETRO-UNICAMP
Membro titular

Prof. Dr. Raphael Fortes Infate Gomes - UNILA
Membro titular

AGRADECIMENTOS

Ao professor Rodrigo Bloot pela diligência na orientação desse trabalho, bem como na co-orientação da iniciação científica, mostrando-me a beleza da intersecção entre matemática, computação e natureza. Todas as discussões realizadas ao longo do trabalho serviram para evidenciar a importância da multidisciplinaridade.

Ao professor Raphael Fortes pela notável condução do grupo de pesquisa de Informação Quântica da UNILA e pela imensa dedicação aos alunos e ao curso de Engenharia Física durante seu período como coordenador. Seu trabalho impecável fez enorme diferença na minha formação.

À minha família pelo apoio incondicional e por se fazer presente, mesmo que distante.

Um agradecimento especial para a plataforma *IBMQ* por disponibilizar os dispositivos quânticos reais para uso acadêmico livre.

"With four parameters I can fit an elephant, and with five I can make him wiggle his trunk."

John von Neumann

Albino, Anton Simen. **Algoritmos Quânticos Híbridos e aplicações em problemas de Otimização** .50 páginas. 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2021.

Resumo

Problemas de otimização possuem aplicações de grande interesse na indústria e na academia. Devido a sua alta complexidade computacional, os problemas de otimização combinatória são de especial interesse. Uma boa estratégia para resolver problemas de otimização combinatória é através da utilização de meta-heurísticas. Neste trabalho, estudamos a maneira como uma meta-heurística oriunda do ferromagnetismo e da mecânica estatística pode ser utilizada, por meio de uma arquitetura híbrida entre processadores NISQ (do inglês, *Noisy Intermediate Scale Quantum*) e otimizadores clássicos, para encontrar boas aproximações para problemas de otimização combinatória. Dois Algoritmos Quânticos Variacionais, o *Variational Quantum Eigensolver* e o *Quantum Approximate Optimization Algorithm*, foram implementados para resolver os problemas do CLIQUE e também do particionamento de conjuntos, obtendo resultados encorajadores.

Palavras chave: Algoritmos Quânticos Variacionais, Otimização Combinatória.

Albino, Anton Simen. **Algoritmos Quânticos Híbridos e aplicações em problemas de Otimização** .50 páginas. 2021. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2021.

Abstract

Optimization problems are of great interest for the industry and academy. Combinatorial optimization problems, in particular, have in their majority a high computational complexity. A good strategy to solve combinatorial optimization problems is through the use of metaheuristics. In this work, we studied how a metaheuristic derived from ferromagnetism and statistical mechanics can be used, through a hybrid architecture between NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum) processors and classical optimizers, to find good approximations for combinatorial optimization problems. Two Variational Quantum Algorithms, namely, Variational Quantum Eigensolver and Quantum Approximate Optimization Algorithm, were implemented to solve the CLIQUE and set partitioning problems, obtaining encouraging results.

Keywords Variational Quantum Algorithms, Combinatorial Optimization.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | | |
|-----------|--|----|
| Figura 1 | À esquerda, a imagem de um chip de um processador quântico da IBM com cinco <i>qubits</i> . À direita, seu mapa de acoplamento que exhibe a interconectividade entre estes <i>qubits</i> | 12 |
| Figura 2 | Esfera de Bloch. | 17 |
| Figura 3 | Diagrama de circuito quântico composto pelas operações unitárias $f \otimes g$ e $I \otimes h \otimes I$ | 19 |
| Figura 4 | Circuito que representa a medida do estado $ 0\rangle$ na base computacional padrão. | 22 |
| Figura 5 | Circuito que representa a medida do estado $ 1\rangle$ na base computacional padrão. | 22 |
| Figura 6 | Q-Sphere com informações referentes aos estados representados pelas bases $ 0\rangle$ (esquerda) e $ 1\rangle$ (centro) e a situação em que temos um estado em superposição (direita) com os valores da fase representados no diagrama de cores ilustrada na parte inferior das esferas. | 23 |
| Figura 7 | Representação em forma de diagrama e distribuição dos estados da base na ausência de medidas sobre o sistema. | 23 |
| Figura 8 | Arquitetura de um VQA. | 25 |
| Figura 9 | Ansatz completamente emaranhado. | 28 |
| Figura 10 | Esquema do VQE. | 29 |
| Figura 11 | Representação esquemática de uma molécula de H_2 | 30 |
| Figura 12 | número de camadas=2; parâmetros=2 | 31 |
| Figura 13 | Para um número de camadas=2, foi encontrado $E_{min} = -1.243100834242$ Ha | 31 |
| Figura 14 | Esquema do QAOA. | 34 |
| Figura 15 | Grafo simples com um clique de tamanho $K = 3$ | 39 |
| Figura 16 | Layer individual criada usando o Qiskit, um SDK da IBM criado para simular e executar programas em processadores quânticos. A técnica usada para criar a forma variacional foi o emaranhamento linear, onde cada <i>qubit</i> é conectado com seu adjacente por uma CNOT. Todos os parâmetros das layers foram inicializados como $\vec{\theta} = \vec{0}$ | 39 |
| Figura 17 | Convergência do algoritmo para diferentes números de camadas. | 40 |

| | | |
|-----------|---|----|
| Figura 18 | Distribuição de probabilidades gerada à partir de um conjunto de medidas. O eixo horizontal representa as <i>strings</i> binárias colocadas na base decimal. É possível observar a maior ocorrência da <i>string</i> $14_{10} = '1110'$ | 41 |
| Figura 19 | Um dos fatores do Operador Gamma, representado como circuito quântico. Para o conjunto $V = \{2, 4, 2\}$, o ângulo de rotação da porta RZ é dado por $-2\gamma v_1 v_2 = -2\gamma 8$. A Figura mostra um ângulo 0 devido à inicialização do parâmetro variacional $\gamma = 0$ | 43 |
| Figura 20 | Operador Gamma com o parâmetro variacional γ inicializado em 0. | 44 |
| Figura 21 | Operador Beta. | 44 |
| Figura 22 | Layer individual do QAOA, com ambos os parâmetros γ e β inicializados em 0. | 44 |
| Figura 23 | Resultados da convergência do algoritmo (esquerda) para diferentes números de <i>layers</i> e a distribuição de probabilidade após as medidas sobre a configuração ótima dos parâmetros variacionais com 4 <i>layers</i> . Os autoestados mais medidos correspondem à solução que minimiza o problema para o conjunto $V = \{2, 4, 2\}$, que pode ser particionado em $v_1 = \{2, 2\}/v_1 = \{4\}$ e $v_2 = \{2, 2\}/v_2 = \{4\}$, apresentando dois mínimos globais. | 45 |
| Figura 24 | Resultados da convergência do algoritmo para os respectivos conjuntos de tamanhos 5, 7 e 10 e diferentes números de <i>layers</i> | 46 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|--------|--|
| COBYLA | Constrained Optimization by Linear Approximation |
| QAOA | Quantum Approximate Optimization Algorithm |
| QUBO | Quadratic Unconstrained Binary Optimization |
| NISQ | Noisy Intermediate Scale Quantum |
| VQE | Variational Quantum Eigensolver |
| VQA | Variational Quantum Algorithm |
| CNOT | Controlled NOT |
| Qubit | Quantum bit |

SUMÁRIO

| | |
|--|----|
| 1 INTRODUÇÃO | 11 |
| 1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO DO PROBLEMA | 11 |
| 1.2 OBJETIVOS | 13 |
| 1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO | 14 |
| 2 FUNDAMENTOS | 15 |
| 2.1 BITS CLÁSSICOS E QUANTUM BITS | 15 |
| 2.2 OPERAÇÕES LÓGICAS QUÂNTICAS | 17 |
| 2.2.1 Operações Reversíveis em <i>Qubits</i> | 18 |
| 2.2.2 Diagramas de Circuitos Quânticos | 18 |
| 2.3 EMARANHAMENTO | 20 |
| 2.4 MEDIDAS | 21 |
| 3 ALGORITMOS QUÂNTICOS VARIACIONAIS (VQAS) | 25 |
| 3.1 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER (VQE) | 25 |
| 3.1.1 O Método Variacional da Mecânica Quântica | 26 |
| 3.1.2 Matrizes Hermitianas como Operadores de Pauli | 26 |
| 3.1.3 Ansatz | 27 |
| 3.1.4 Efetuando Medidas em Bases Distintas | 28 |
| 3.1.5 Função objetivo do VQE: Medindo Valores Esperados | 28 |
| 3.1.6 Estado Fundamental de Energia de Moléculas | 30 |
| 3.2 QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM (QAOA) | 31 |
| 3.2.1 Modelo de Ising | 32 |
| 3.2.2 Operador Gamma | 32 |
| 3.2.3 Operador de Mistura | 33 |
| 3.2.4 Função objetivo do QAOA: Medindo Valores Esperados | 33 |
| 4 APLICAÇÕES EM PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO | 36 |
| 4.1 APLICAÇÃO VQE: PROBLEMA DO CLIQUE | 36 |
| 4.1.1 Desenvolvimento do Problema | 37 |
| 4.1.2 Implementação e Simulações dos Resultados | 38 |
| 4.2 APLICAÇÃO QAOA: PROBLEMA DA PARTIÇÃO DE CONJUNTOS | 40 |
| 4.2.1 Desenvolvimento do Problema | 41 |
| 4.2.2 Implementação e Simulações dos Resultados | 42 |
| 5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS | 47 |
| REFERÊNCIAS | 49 |

1 INTRODUÇÃO

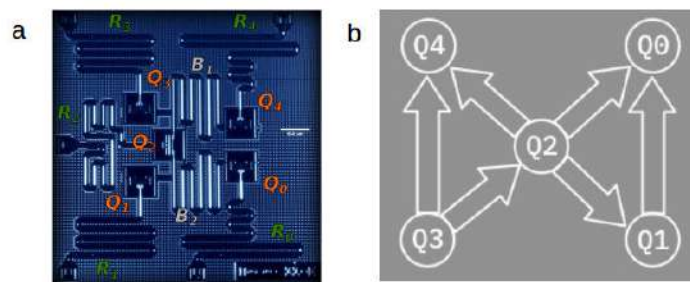
A fim de tornar acessível a leitura serão comentadas, no presente capítulo, as razões e a contextualização bem como o patamar em que a tecnologia de computadores quânticos encontra-se atualmente. Também serão detalhados os objetivos da proposta e a estrutura do presente trabalho de conclusão de curso.

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO DO PROBLEMA

Dispositivos computacionais desempenham papel fundamental em problemas de natureza científica e tecnológica. Devido à alta complexidade computacional na simulação de determinados sistemas físicos, (FEYNMAN, 1982) propôs que partículas elementares poderiam ser utilizadas para realizar tarefas computacionais. Desde então, segundo (ALBINO; GOMES; BLOOT, 2020), houve um avanço considerável no desenvolvimento de experimentos capazes de testar as previsões teóricas da Teoria Quântica. Essas iniciativas, aliadas a investimentos expressivos em pesquisa e desenvolvimento na última década por parte de universidades, centros de pesquisa, bancos, governos e empresas, culminaram no lançamento de protótipos para os primeiros dispositivos quânticos, atualmente conhecidos como dispositivos NISQ (do inglês, *Noisy Intermediate Scale Quantum*). Como a própria denominação diz, estes protótipos são dispositivos ruidosos de escala intermediária, que demandam técnicas de mitigação de erros e de economia de recursos computacionais para serem utilizados. Em contrapartida, devido aos grandes investimentos e esforços científicos, a computação quântica é um campo que tem mostrado avanços crescentes, tanto no desenvolvimento de dispositivos mais eficientes e menos ruidosos, quanto no estudo de novos algoritmos e suas aplicações. Dispositivos quânticos podem ser implementados fisicamente por meio de diversos sistemas, tais como *Superconducting Qubits*, *Ion Traps*, *Quantum Annealing*, *Spin Qubits*, *Photonic Qubits*, dentre outros. Os três primeiros são exemplos de sistemas físicos usados na fabricação de dispositivos desenvolvidos por empresas como *IBM*, *Google*, *IonQ*, *Honeywell* e a canadense *D-Wave* (sendo esta a primeira a fabricar um computador quântico comercial). Um imagem real de um

processador quântico de *qubits* supercondutores fabricado pela *IBM* pode ser visto na Figura 1, que também mostra um mapa da conectividade entre estes *qubits*. É importante destacar que um dos desafios atuais é conseguir fabricar processadores com conectividade completa entre os *qubits*.

Figura 1: À esquerda, a imagem de um chip de um processador quântico da *IBM* com cinco *qubits*. À direita, seu mapa de acoplamento que exibe a interconectividade entre estes *qubits*.



Fonte: (BEHERA et al., 2019)

Ao programar esses dispositivos (como o exemplo da Figura 1), uma das maneiras de predizermos o quão ruidosos serão os resultados das medidas, é analisando o número de operações realizadas no sistema. Um resultado ruidoso, nesse contexto, é aquele que apresenta diferenças significativas se comparados à um cálculo determinístico. Essas operações possuem uma taxa de erros intrínseca, e o conjunto de uma ou mais operações determinado pelo respectivo tempo de execução. Um *qubit*, por sua vez, possui um tempo T pelo qual seu estado pode ser mantido, conhecido por tempo de coerência. Um conjunto elevado de operações sobre esses *qubits* resultam na propagação desses erros, seja pela decoerência dos estados, por erros associados às operações realizadas ou por ruídos de outra natureza. Diversas operações envolvendo mais de um *qubit* são necessárias ao longo da implementação de um algoritmo, e para que essas operações sejam realizadas no processador, é necessária uma interconexão entre os *qubits* envolvidos. Quando não há uma interconexão física, são necessárias operações equivalentes à troca (SWAP) de posições dos *qubits*. Na mapa de acoplamento da Figura 1 observamos que os *qubits* $Q4$ e $Q1$ não possuem uma interconexão física entre eles. Portanto, uma operação que dependa da interação entre esses dois *qubits*, não pode ser feita diretamente. Uma possível solução seria aplicar a operação SWAP entre os *qubits* $Q1$ e $Q2$: dessa forma, $Q4$ e $Q1$ passam a ser adjacentes e, dessa forma, uma operação envolvendo-os, pode ser feita. Uma operação equivalente à SWAP (dizemos equivalente pois não é possível trocar a posição de *qubits* fisicamente) é implementada usando uma sequência de três operações

de base de um dispositivo quântico, chamadas CNOTs. Diante disso, vemos que uma baixa conectividade entre *qubits*, resulta na necessidade de implementação de um grande número de CNOTs, aumentando a propagação de erros. Em contrapartida, foram desenvolvidos (e estão em desenvolvimento) os VQAs (do inglês, *Variational Quantum Algorithms*), cuja estrutura de operações pode ser adaptada de acordo com a arquitetura do processador quântico, visto que a solução dos problemas são pouco dependentes das operações envolvendo múltiplos *qubits*. Essa fraca dependência permite que a programação das operações seja feita à partir de uma análise prévia da arquitetura do dispositivo. Além disso, as operações de *qubits* individuais podem ser feitas com operadores de base dos dispositivos. Diante dessa análise, podemos considerar os VQAs como bons candidatos a resolver problemas na era dos dispositivos NISQ.

Os VQAs podem ser usados para resolver problemas de otimização combinatória, que serão explorados ao longo deste trabalho. Portanto, utilizando a abordagem dos VQAs, podemos explorar problemas de grande interesse da indústria e da academia e propor soluções que poderão ser utilizadas em curto prazo, com o amadurecimento dos dispositivos quânticos. Os problemas de otimização explorados ao longo do trabalho possuem um grau de complexidade computacional elevado, motivando a busca por modelos mais eficientes na solução dos problemas apresentados. Nos VQAs, a modelagem da função objetivo deve ser feita através de um *Quadratic Unconstrained Binary Optimization* (QUBO), que pode ser facilmente convertido para um *Hamiltoniano de Ising*, um modelo muito usado na mecânica estatística, oriundo do ferromagnetismo (LUCAS, 2014). Trata-se de um modelo do qual as variáveis representam a orientação do dipolo magnético de elétrons em cadeia, sujeitos à um campo magnético de magnitude definida. É possível demonstrar que qualquer problema de otimização combinatória pode ser modelado como um *Hamiltoniano de Ising*. Neste trabalho, nos concentraremos em resolver os problemas de encontrar *cliques* em grafos e o problema do particionamento de conjuntos, ambos bastante conhecidos.

1.2 OBJETIVOS

Nossa abordagem está focada ao uso de ferramentas bem estabelecidas para aplicá-las em problemas que já foram explorados por sistemas clássicos. O presente trabalho não pretende ser um referencial aos interessados em aprender os fundamentos da computação quântica. Para os não iniciados, recomendamos (MERMIN, 2007) e (ALBINO; GOMES; BLOOT, 2020). Na sequência, seguem os objetivos gerais e específicos que nortearam o desenvolvimento do trabalho:

- Objetivo principal - O presente trabalho teve como objetivo principal estudar algoritmos quânticos do tipo variacional definidos como VQE (do Inglês - *Variational*

Quantum Eigensolver) e QAOA (do Inglês - *Quantum Approximate Optimization Algorithm*), bem como suas repercussões em problemas de otimização. Estamos avaliando a viabilidade conceitual dos métodos sem comparar sua performance com os algoritmos clássicos já estabelecidos.

- Objetivo específico – Dois problemas de otimização combinatória serão resolvidos usando os algoritmos VQE e QAOA, a fim de validar a viabilidade de tais algoritmos em problemas cujas soluções podem ser realizadas também por algoritmos clássicos.

1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O trabalho foi organizado em cinco capítulos sendo o capítulo 1 destinado a introdução. No capítulo 2, fazemos uma breve introdução a alguns fundamentos de computação quântica. No capítulo 3, são discutidos dois métodos variacionais e, no capítulo 4, utilizaremos estas ferramentas para resolver dois problemas de otimização combinatória, a saber, conhecidos como problema do clique e partição de um conjunto numérico. Por fim, no capítulo 5, apresentaremos a análise dos resultados obtidos e a conclusão, bem como perspectivas futuras sobre o tema de investigação.

2 FUNDAMENTOS

No presente capítulo, serão estabelecidos conceitos fundamentais de computação quântica. Os tópicos que serão mostrados ao longo do capítulo serão de grande importância para o estudo dos Algoritmos Quânticos Variacionais.

2.1 BITS CLÁSSICOS E QUANTUM BITS

O *bit* é a unidade mais elementar de informação, usada na computação e na teoria da informação. Ao longo desta seção, serão apresentadas características fundamentais dos bits, assim como as diferenças entre um *bit* clássico e um *quantum bit*, sendo o último popularmente conhecido como *qubit*. Na computação clássica, o *bit* é a posição, em uma *string* binária, que pode assumir um valor x , tal que $x \in \{0, 1\}$. Um *bit* pode ser representado por diversos sistemas físicos, como valores de tensão elétrica em um transistor, onde valores de tensão mais baixos são codificados como 0 e, para valores mais altos de tensão (geralmente próximos de 5V), codifica-se como 1. Na lógica binária, há várias operações que podem ser executadas entre os *bits*, como *NOT*, *AND*, *OR*, *XOR*, *NAND*, *Shift*, entre outras. Uma *string* contendo n *bits* pode assumir 2^n configurações diferentes. Como consequência, existe a possibilidade de construção de uma série de circuitos usando portas lógicas e que obedecem a Álgebra de Boole e que podem ser usadas na eletrônica digital. Considerando o exemplo onde $n = 3$, temos o conjunto C de $2^3 = 8$ possíveis configurações

$$C = \{000, 001, 010, 011, 100, 101, 110, 111\}$$

que também podem ser representadas na base decimal como valores inteiros de 0 a 7.

Na computação quântica, a unidade básica de informação é o *qubit*, e sua implementação física é feita usando um sistema quântico de dois níveis. Um *qubit* também pode assumir dois estados, 0 e 1. Em contraste com a computação clássica, um *qubit* pode assumir qualquer configuração possível entre dois estados ortogonais representados por *bits* clássicos como 0 e 1, em superposição. Formalmente, o estado $|\psi\rangle$ de

um *qubit* pode ser representado como uma combinação linear de dois vetores ortogonais da base ortonormal $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, onde, utilizando a notação de *Dirac*, $|0\rangle = (1 \ 0)^T$ e $|1\rangle = (0 \ 1)^T$. A representação geral de um *qubit* é dada por

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

onde α e β são números complexos que satisfazem a condição de normalização $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, onde $|\alpha|^2$ e $|\beta|^2$ são as probabilidades que o sistema possui de colapsar respectivamente para os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ após a realização de uma medida sobre o mesmo. Uma explicação mais clara sobre o processo de medida em mecânica quântica será dada na próxima seção. Utilizando a notação de *Dirac*, representamos o vetor complexo conjugado da Equação 1, que representa a definição do estado de um *qubit*, como

$$\langle\psi| = \alpha\langle 0| + \beta\langle 1| = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix}. \quad (2)$$

A representação geométrica de um *qubit* em um espaço tridimensional pode ser visualizada através da *Esfera de Bloch* (Figura 2). Qualquer vetor representado na *Esfera de Bloch* tem origem no centro e, para estados puros, toca a superfície da esfera de raio unitário. Um estado é representado pelas projeções, em coordenadas esféricas, na base computacional (eixo z). Outra base bastante utilizada para representar estados quânticos projetados no eixo x é a base composta pelos estados $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, onde $|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Estas bases são autoestados relacionados aos operadores de Pauli os quais possuem representação matricial dadas por (MERMIN, 2007)

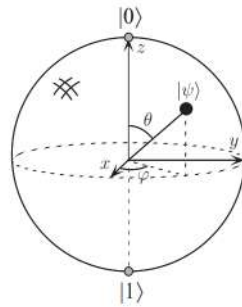
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Os vetores $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ são autoestados de σ_x , $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ são autoestados de σ_z e $\{i|0\rangle, -i|1\rangle\}$ são autoestados de σ_y . Um vetor na *Esfera de Bloch* é unitário e pode ser expresso, em termos de dois ângulos $\varphi \in [0, 2\pi)$ e $\theta = [0, \pi]$, como

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (4)$$

Estados de sistemas com mais *qubits* são representados como um produto tensorial entre os estados de cada *qubit*. Essa condição permite que sejam realizadas 2^n operações simultâneas em um sistema composto por n *qubits*. Como exemplo, podemos imaginar o estado de um outro *qubit* representado por $|\phi\rangle = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$. Um

Figura 2: Esfera de Bloch.



Fonte: (NIELSEN; CHUANG, 2011)

sistema composto pelos *qubits* $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ tem o estado descrito por

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = \alpha\gamma|00\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \beta\delta|11\rangle = \begin{pmatrix} \alpha\gamma \\ \alpha\delta \\ \beta\gamma \\ \beta\delta \end{pmatrix} \quad (5)$$

A notação para o produto tensorial entre vetores de estado pode ser usada de diferentes maneiras. Para o caso de dois vetores, como no exemplo anterior, podemos representar o produto tensorial entre os vetores de estado de cada *qubit* através da notação $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \equiv |\psi\rangle|\phi\rangle \equiv |\psi\phi\rangle$. Como pode ser observado na Eq. 6, os vetores da base $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ podem ser representados na forma decimal $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$. Portanto, podemos escrever um estado geral de n – *qubits* como uma superposição de 2^n estados

$$|\psi\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} \alpha_x |x\rangle \quad (6)$$

Munidos de tais conceitos, mostraremos que operações reversíveis podem ser descritas por matrizes unitárias e analisaremos o modo pelo qual essas informações podem ser obtidas através de medidas. A compreensão dessas propriedades é essencial para o desenvolvimento de algoritmos específicos para computadores quânticos.

2.2 OPERAÇÕES LÓGICAS QUÂNTICAS

Operações lógicas sobre *qubits* são feitas com o objetivo de levar o estado inicial $|\psi_i\rangle$ do sistema para um estado final $|\psi_f\rangle$. Essas operações podem ser realizadas sobre um ou mais *qubits* e são individualmente expressas como matrizes unitárias de ordem $2^n \times 2^n$, onde n é o número de *qubits* envolvidos na operação. As operações lógicas realizadas sobre um sistema quântico são, em geral, feitas sequencialmente. Operações realizadas em diferentes *qubits*, no mesmo instante de tempo, podem ser expressas como uma única matriz, representada como um produto tensorial entre

as matrizes que operam sobre cada *qubit* (ou um conjunto deles). Como exemplo, podemos imaginar um sistema de três *qubits*, sujeito à atuação de dois operadores: o operador $U_{i,j}$, o qual envolve o conjunto de *qubits* $\{q_i, q_j\}$, e o operador W_k , que atua apenas sobre o *qubit* q_k . Se essas duas operações são aplicadas simultaneamente, pode-se expressá-las como um único operador $V = U_{i,j} \otimes W_k$, atuando sobre os três *qubits* em questão.

2.2.1 Operações Reversíveis em *Qubits*

De acordo com (MERMING, 2007), as operações reversíveis que um computador quântico pode executar em um ou mais *qubits* são representadas pela atuação de qualquer transformação que leva um vetor unitário à outro vetor unitário. Tais transformações são chamadas de operações unitárias e satisfazem a condição

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I \quad (7)$$

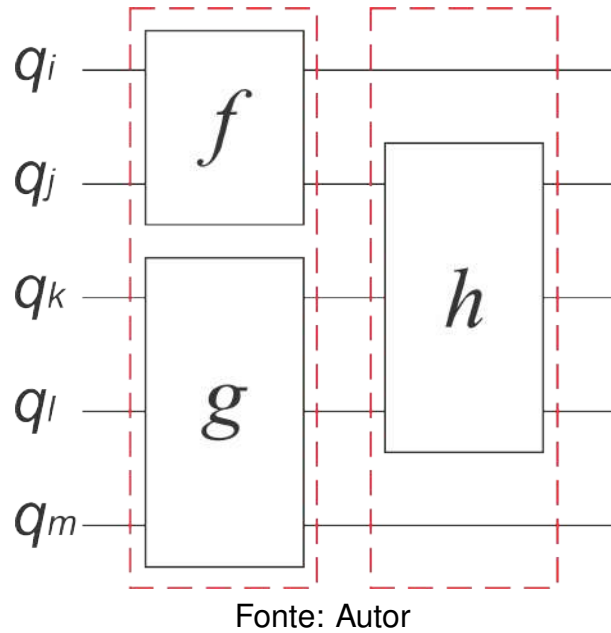
Da Equação 7, pode-se inferir que, a operação U aplicada subsequentemente à ela mesma é equivalente a operação identidade I , ou seja, o estado do sistema após a operação retorna ao estado anterior.

2.2.2 Diagramas de Circuitos Quânticos

O diagrama de um circuito quântico representa as operações realizadas sobre os *qubits*. O diagrama é composto por linhas horizontais (que representam os *qubits*) e por blocos de operações sequenciados. Os blocos de operações são colocados, em ordem cronológica da esquerda para a direita. Operações alinhadas verticalmente em um circuito quântico podem ser realizadas, na prática, simultaneamente; e, portanto, podem ser consideradas como um único operador, escrito como um produto tensorial de todos os constituintes. A Figura 3 mostra um exemplo genérico de operações em um sistema composto por cinco *qubits*. O primeiro bloco de operações composto pelos operadores f e g , como dito anteriormente, podem ser descritos por meio do produto tensorial $f_{i,j,k} \otimes g_{l,m}$, como um único operador que age sobre todos os *qubits*. O segundo bloco, por sua vez, é composto por um operador que atua sobre os *qubits* j , k e l . Portanto, é equivalente dizer que o operador identidade atua nos *qubits* i e m . Analogamente ao primeiro bloco, podemos representar o segundo bloco como o um único operador $I_i \otimes h_{j,k,l} \otimes I_m$.

Algumas operações de *qubits* individuais relevantes para este trabalho são as portas **NOT**, **RX(θ)**, **RY(θ)**, **RZ(φ)** e **H (Hadamard)**. Todas estas operações rotacionam o vetor de estado na *Esfera de Bloch*. As três últimas, em particular, são parametrizadas por um ângulo (θ), previamente escolhido, cuja importância será evidenciada nos próximos capítulos. Vejamos a representação matricial desses operadores:

Figura 3: Diagrama de circuito quântico composto pelas operações unitárias $f \otimes g$ e $I \otimes h \otimes I$.



- Operador NOT

Assim como na computação clássica, é possível criar uma porta na computação quântica que atua no estado de um *qubit* e inverte a orientação dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Esta porta lógica é representada por

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

e trata-se de um operador unitário e, portanto reversível (que coincide com o operador de Pauli σ_x).

- Operador **RX**(θ)

Trata-se de um operador que realiza uma rotação na *Esfera de Bloch* em torno do eixo x . A representação matricial deste operador é dada por

$$RX(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

- Operador **RY**(θ)

Trata-se de um operador que realiza rotação na esfera de bloch em torno do eixo y . A representação matricial deste operador é dada por

$$RY(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

- Operador $RZ(\theta)$

Trata-se de um operador que realiza rotação na esfera de Bloch em torno do eixo z . A representação matricial deste operador é dada por

$$RZ(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

- Operador Hadamard

Uma das principais propriedades da mecânica quântica é o fenômeno de superposição. A operação Hadamard atua sobre um *qubit* criando uma superposição uniforme (probabilidades iguais) entre os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Observe que ao ser aplicado na base computacional, obtemos estados em superposição, isto é, temos que $H|0\rangle = |+\rangle$ e $H|1\rangle = |-\rangle$.

Existem também operações que envolvem mais de um *qubit*. Operações desse tipo, muito utilizadas em computação quântica, são as operações controladas, as quais são compostas por um *qubit* de controle e um *qubit* alvo. Em tais operações, um operador R atua sobre o *alvo* se o *qubit* de controle estiver no estado $|1\rangle$. A representação matricial desses operadores é dada pela matriz 4×4

$$cR = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

com \mathbf{I} sendo a identidade e a matriz \mathbf{R} dada por

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

2.3 EMARANHAMENTO

Uma propriedade de partículas elementares muito importante no estudo da teoria da informação quântica é o emaranhamento quântico. Um estado quântico é definido como um estado emaranhado se este não pode ser fatorado como um produto tensorial. Portanto, estados que não podem ser fatorados como um produto tensorial, são compostos por estados fisicamente correlacionados. Um dos exemplos mais conhecidos é o estado da *Base de Bell* denominado par EPR, o qual é comumente encontrado

em protocolos de comunicação quântica.

$$|\psi^+\rangle = \frac{|0\rangle_0|0\rangle_1 + |1\rangle_0|1\rangle_1}{\sqrt{2}}. \quad (15)$$

O estado descrito na Equação 15 é um estado emaranhado, uma vez que o mesmo não pode ser descrito como um produto tensorial. Um exemplo de estado de *qubits* não emaranhados é o estado em superposição

$$|\phi\rangle = \frac{|0\rangle_0|0\rangle_1 + |0\rangle_0|1\rangle_1}{\sqrt{2}}, \quad (16)$$

$$|\phi\rangle = |0\rangle_0 \otimes \frac{|0\rangle_1 + |1\rangle_1}{\sqrt{2}}. \quad (17)$$

Vemos que esse estado pode ser facilmente decomposto como um produto tensorial entre os estados individuais de cada *qubit*, evidenciando uma não correlação entre eles. (CHRIST ANDREAS, 2013) apresenta um experimento de criação de pares de fótons emaranhados denominado de *Spontaneous Parametric Down-Conversion (EPDC)*. Neste experimento um fóton incide em um cristal não linear e gera um par de fótons fortemente correlacionados que possuem valores de energia inferiores ao fóton original, em acórdância com as leis de conservação de energia. Operações que alteram o estado de um dos fótons do par provocam, instantaneamente, uma mudança no estado do outro fóton.

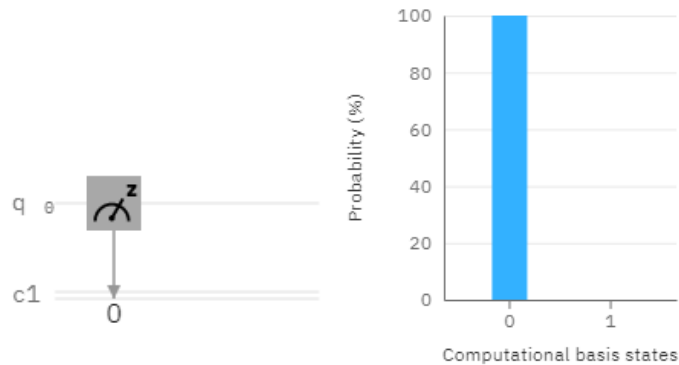
2.4 MEDIDAS

Medidas realizadas na computação clássica são determinísticas, uma vez que um *bit* pode assumir apenas os estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Em outras palavras, o procedimento de medida em um computador clássico não é um processo disruptivo e pode ser feita a qualquer momento durante os cálculos. Quando estamos considerando um processo computacional em um dispositivo quântico, o cenário é diferente. Vejamos um exemplo: considere o estado dado por $|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$. O processo de medida pela regra de Born indica que podemos obter $|0\rangle$ com uma probabilidade $|\alpha_0|^2$ ou $|1\rangle$ com uma probabilidade $|\alpha_1|^2$ como ilustrado em (MERMING, 2007).

De maneira a tornar simples o entendimento vamos analisar alguns exemplos usando a plataforma *IBM Q Experience* com respeito a algumas operações. Começamos observando medidas para estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ representados nas figuras (4) e (5), respectivamente. Uma vez que não existe superposição para este dois casos, quando analisados individualmente, a configuração de medida resulta na descrição fiel do estado em questão. Como discutido na seção de diagramas de circuitos, ao desenharmos um circuito quântico, configuramos a entrada no estado $|0\rangle$ e para obter

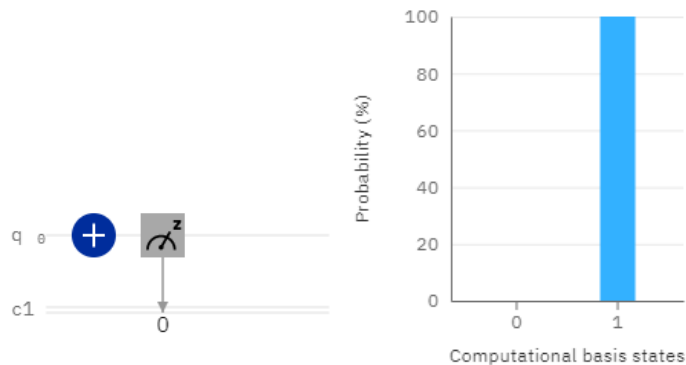
o estado $|1\rangle$ aplicamos uma porta X. Isso é feito afim de modificar o estado do *qubit* e, neste caso, alterar sua respectiva configuração, como ilustrado na figura (6).

Figura 4: Circuito que representa a medida do estado $|0\rangle$ na base computacional padrão.



Fonte: IBM Q Experience.

Figura 5: Circuito que representa a medida do estado $|1\rangle$ na base computacional padrão.



Fonte: IBM Q Experience.

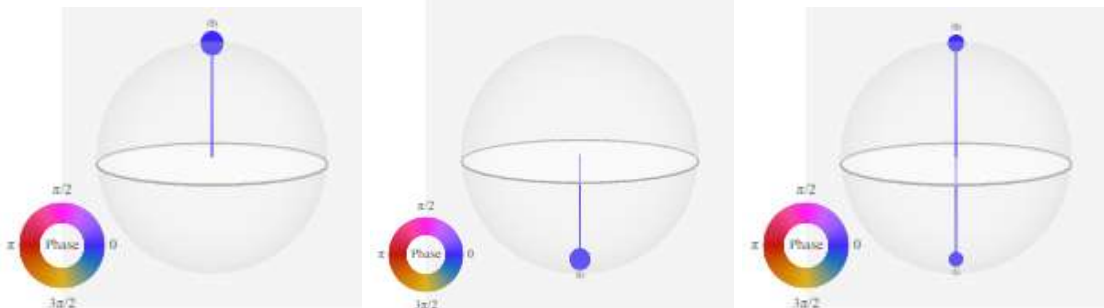
Uma forma simples de ilustrar um estado em superposição para apenas um qubit é usar a porta de Hadamard aplicada ao estado $|0\rangle$. Da definição desta porta temos que

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \quad (18)$$

Repare que esta expressão pode ser escrita na forma de diagrama (como ilustrado na figura (7)). Observe que a distribuição de probabilidades dos estados da base é representada de forma que nenhuma medida ainda foi realizada. Como discutido anteriormente, ao realizarmos a medida, apenas um estado será coletado fazendo com que o estado de superposição ilustrado na figura (6) colapse para um dos estados da base computacional ($|0\rangle$ ou $|1\rangle$).

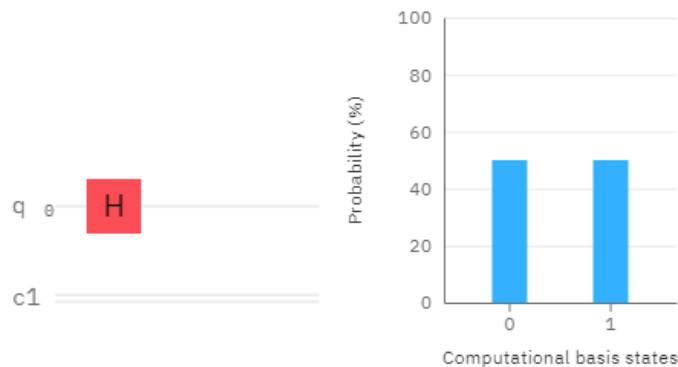
Desta forma, ao contrário de computadores clássicos, a única maneira de conhecer as características de um estado quântico qualquer $|\psi\rangle$ é preparando um conjunto

Figura 6: Q-Sphere com informações referentes aos estados representados pelas bases $|0\rangle$ (esquerda) e $|1\rangle$ (centro) e a situação em que temos um estado em superposição (direita) com os valores da fase representados no diagrama de cores ilustrada na parte inferior das esferas.



Fonte: IBM Q Experience.

Figura 7: Representação em forma de diagrama e distribuição dos estados da base na ausência de medidas sobre o sistema.



Fonte: IBM Q Experience.

N de estados idênticos e realizando uma medida em cada um deles. Se a quantidade N é suficientemente grande, a distribuição dos resultados das medidas revelam a probabilidade de medir-se cada um dos autoestados de $|\psi\rangle$. Na computação quântica, uma medida sobre um estado é a projeção desse vetor na base computacional. Portanto, se uma medida é efetuada em um estado $|\psi\rangle$ a probabilidade de medir-se um autoestado da base computacional $|x\rangle$ é dada pela expressão

$$p(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2. \quad (19)$$

No entanto, em muitos casos, a probabilidade $p(x)$ só é conhecida após realizadas as medidas sobre os N estados preparados. Estatisticamente, a probabilidade de ocorrência do estado $|x\rangle$ é a razão entre o número de vezes o qual foi medido pelo número total de preparações N . Dessa forma, $p(x) = n_x/N$. Usando as equações 19 e 6 é possível generalizar a probabilidade de ocorrência de qualquer um dos autoestados

de $|\psi\rangle$, por meio da Regra de Born, e representando pela fórmula dada por

$$p(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = |\alpha_x|^2. \quad (20)$$

No contexto dos algoritmos que serão analisados nos seguintes capítulos, utilizaremos o conceito de valor esperado ou valor médio de uma grandeza quantizada Q , que representa a soma dos valores medidos de Q ponderados por suas respectivas probabilidades. Para realizar este cálculo é necessário que sejam preparados N sistemas idênticos e que uma medida seja realizada em cada um deles. Por se tratar de um sistema de uma grandeza quantizada, apenas valores discretos podem ser medidos, resultando em uma distribuição de probabilidade dos valores medidos. Portanto, o valor esperado de uma medida sobre a grandeza Q pode ser definido como

$$\langle Q \rangle = \sum_{n=0}^N q_n p_n, \quad (21)$$

onde q_n é um dos possíveis valores observados após a realização de uma medida sobre grandeza Q , ponderado pela sua probabilidade de ocorrência p_n . Neste caso, a probabilidade p_n é a razão entre o número de vezes o resultado q_n foi obtido e o número total de medidas N sobre a grandeza Q . O valor esperado $\langle Q \rangle$ também pode ser expresso na *notação de Dirac*, em termos do vetor de estado $|\psi\rangle$ e seu complexo conjugado $\langle\psi|$, como

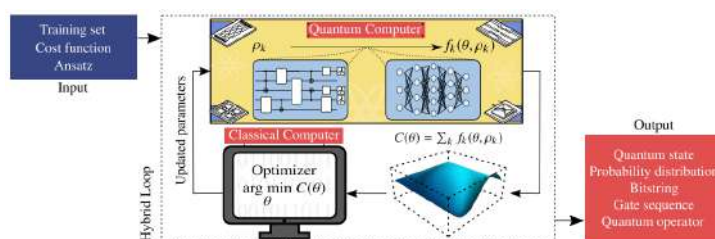
$$\langle Q \rangle \equiv \langle\psi|Q|\psi\rangle. \quad (22)$$

A Equação 22 pode ser interpretada como o valor médio das medidas executadas no observável Q . O operador Q age sobre o estado $|\psi\rangle$, há uma modificação nas probabilidades de colapso desse sistema. Em relação aos algoritmos estudados $\langle Q \rangle$ representará o valor objetivo de uma função a ser otimizada.

3 ALGORITMOS QUÂNTICOS VARIACIONAIS (VQAS)

Neste capítulo, serão apresentados os Algoritmos Quânticos Variacionais, do inglês *Variational Quantum Algorithms* (VQA), que são bastante adequados na solução de problemas de otimização. Discutiremos, ao longo do capítulo, dois VQAs: Eles são o *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA) e o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE). Aplicações em problemas de otimização combinatória serão apresentadas no próximo capítulo. Um algoritmo variacional, segundo (CEREZO et al., 2021), tem como entrada: uma função custo $C(\theta)$ e um *ansatz*, cujos parâmetros são treinados para minimizar o custo. Em cada iteração, emprega-se um computador quântico para eficientemente estimar o custo. Essas informações são alimentadas em um computador clássico que aproveita o poder dos otimizadores para navegar no espaço de busca e resolver o problema de otimização. Assim que um critério de parada for atendido, o VQA produz uma estimativa da solução para o problema.

Figura 8: Arquitetura de um VQA.



Fonte: (CEREZO et al., 2021)

3.1 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER (VQE)

Encontrar o menor autovalor de uma matriz possui aplicações importantes em diversas áreas. Na química quântica, encontrar o menor autovalor do hamiltoniano \mathcal{H} (que descreve a energia total de uma molécula), é equivalente à encontrar seu nível fundamental de energia. Essa tarefa é de extrema importância no desenvolvimento de novos materiais, avanços na busca por baterias mais eficientes, entre outras aplica-

ções. O algoritmo quântico de Estimativa de Fase, do inglês *Quantum Phase Estimation* (QPE), foi proposto por (KITAEV, 1995) para encontrar autovalores de operadores unitários. Entretanto, utilizar o QPE demanda hardwares quânticos mais robustos e livres de erros do que os existentes na era dos dispositivos NISQ (*Noisy Intermediate Scale Quantum*). Contudo, diante da necessidade de desenvolver algoritmos adequados para a era dos dispositivos NISQ, (PERUZZO et al., 2014) propôs o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), que pode ser implementado em circuitos quânticos com um número menor de operações em sequência (diminui taxas de erros por decoerência) e com menor número de *qubits*. Trata-se de um VQA baseado no Princípio Variacional da Mecânica Quântica, onde uma função de onda parametrizada é criada e, via método de otimização clássica, o objetivo principal do algoritmo consiste em encontrar o conjunto de parâmetros que otimiza o autovalor da matriz.

3.1.1 O Método Variacional da Mecânica Quântica

Como discutido no Capítulo 2, informações sobre um estado quântico podem ser obtidas por meio de um conjunto de medidas sobre o sistema. Embora nosso objetivo seja encontrar o menor autovalor de uma matriz, a função objetivo do problema é calculada através valor esperado da matriz em questão, visto que se uma função de onda parametrizada por um conjunto de parâmetros θ é criada, o princípio variacional nos garante que

$$\langle \mathcal{H}_\theta \rangle \equiv \langle \psi_\theta | \mathcal{H} | \psi_\theta \rangle \geq \lambda_{min}. \quad (23)$$

Portanto, se o espaço de busca é suficientemente grande e o objetivo do problema é minimizar o valor esperado da matriz \mathcal{H} , existe um conjunto de parâmetros θ' que minimiza a função objetivo. Diante disso, podemos afirmar que uma boa e confiável aproximação para o menor autovalor λ_{min} da matriz \mathcal{H} pode ser dada por

$$\langle \mathcal{H}_{\theta'} \rangle_{min} \approx \lambda_{min}. \quad (24)$$

Uma explicação intuitiva do método variacional pode ser apresentada da seguinte maneira: O valor esperado (ou valor médio) de uma grandeza, pode assumir infinitos valores entre os respectivos máximo e mínimo. Logo, o valor médio de um observável físico nunca será menor que seu autovalor mínimo e nunca será maior que seu autovalor máximo.

3.1.2 Matrizes Hermitianas como Operadores de Pauli

Para que o problema de encontrar o menor autovalor de uma matriz seja resolvido usando o VQE, a mesma deve ser hermitiana. Essa propriedade permite que a matriz seja escrita como uma combinação linear de operadores unitários. Esses operadores unitários podem ser classificados como bases, das quais medem-se os valores espe-

rados individualmente. Portanto, é possível escrever uma matriz hermitiana \mathcal{H} como uma combinação linear de matrizes unitárias da base $B = \{H_0, H_1, \dots, H_n\}$ ponderadas por seus respectivos coeficientes α_i , como

$$\mathcal{H} = \alpha_0 H_0 + \alpha_1 H_1 + \dots + \alpha_n H_n. \quad (25)$$

Em geral, as matrizes unitárias da base B podem ser expressas como produtos tensoriais das matrizes de Pauli. Qualquer matriz hermitiana pode ser escrita como uma combinação linear desses operadores, que possuem como uma das características principais, autovalores de módulo unitário. Portanto, cada matriz unitária U_i de ordem $2^N \times 2^N$, pertencente à base B , pode ser expressa como o produto

$$H_i = \sigma_{x,y,z,I}^0 \otimes \sigma_{x,y,z,I}^1 \otimes \dots \otimes \sigma_{x,y,z,I}^N. \quad (26)$$

Cada um dos coeficientes α_i , da Equação 25, pode ser encontrado através da expressão

$$\alpha_i = \frac{1}{2^N} \text{Tr}(H_i \cdot \mathcal{H}). \quad (27)$$

Vejam os exemplos que possibilitam visualizar bem o que foi descrito. Considere a seguinte matriz simétrica

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Note que esta matriz pode ser escrita em termos da base de Pauli como

$$A = 3\sigma_x - 2.5\sigma_z + 3.5I. \quad (29)$$

onde σ_x e σ_z são as matrizes de Pauli (Equação 3) definidas no capítulo anterior.

3.1.3 Ansatz

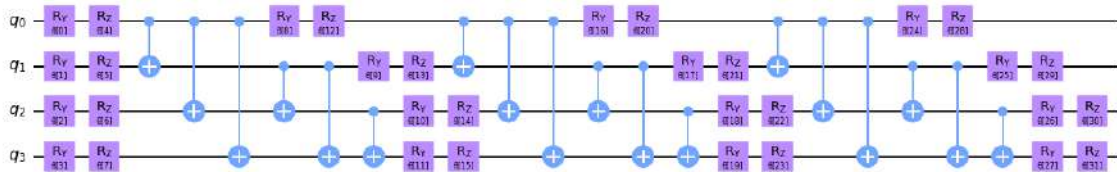
Um *ansatz* pode ser dito como um circuito quântico gerador de funções de onda parametrizadas. Por se tratar de um algoritmo híbrido, pode-se dizer que o *ansatz* compõe a parte quântica do algoritmo, gerando a função de onda do sistema. Portanto, um *ansatz* pode ser representado por um operador O_Θ , que atua na função de onda inicial $|\psi_i\rangle$, realizando a seguinte transformação:

$$O_\Theta |\psi_i\rangle = |\psi_\Theta\rangle. \quad (30)$$

Um *ansatz* é eficiente se o espaço de busca é suficientemente grande. Nesse contexto, um espaço de busca suficientemente grande significa dizer que o vetor de onda $|\psi_\Theta\rangle$ pode assumir um conjunto elevado de valores, melhorando o grau de precisão da aproximação. Um exemplo de *ansatz* eficiente está ilustrado na Figura 9, onde todos

os quatro *qubits* estão emaranhados entre si e há um número suficiente grande de rotações.

Figura 9: Ansatz completamente emaranhado.



Fonte: Qiskit Textbook: Simulating Molecules using VQE

3.1.4 Efetuando Medidas em Bases Distintas

Como vimos na seção anterior, para medir valores esperados de um operador hermitiano não unitário, é necessário que o mesmo seja decomposto como uma combinação linear de operadores de Pauli, os quais podem ter seus valores esperados calculados individualmente. Contudo, em computação quântica as medidas são comumente realizadas na base computacional (projeções do vetor de estado no eixo z da Esfera de Bloch), visto que os autovetores do operador σ_z formam a base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Para que seja possível medir valores esperados em diferentes bases de Pauli, mudanças no ansatz são feitas para as medidas possam continuar sendo realizadas na base computacional. Entretanto, os valores esperados correspondem às medidas de outras bases. As seguintes transformações podem ser feitas nos *qubits*:

$$\sigma_x \equiv H\sigma_zH, \quad (31)$$

$$\sigma_y \equiv SH\sigma_zHS^\dagger. \quad (32)$$

Dessa forma, podemos manter a escolha da base computacional para calcular os valores esperados de σ_x e σ_y . Se um *qubit* está no estado $|\psi\rangle$, é possível escrever as mudanças no seu estado como $H|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ e $(HS^\dagger)|\psi\rangle = |\psi''\rangle$. Logo, as mudanças de base que precedem as medidas fornecem os seguintes valores esperados:

$$\langle\psi|\sigma_x|\psi\rangle \equiv \langle\psi|H\sigma_zH|\psi\rangle = \langle\psi'|\sigma_z|\psi'\rangle, \quad (33)$$

$$\langle\psi|\sigma_y|\psi\rangle \equiv \langle\psi|SH\sigma_zHS^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi''|\sigma_z|\psi''\rangle. \quad (34)$$

3.1.5 Função objetivo do VQE: Medindo Valores Esperados

Como visto anteriormente, com base no Princípio Variacional da mecânica quântica, podemos concluir que minimizar o valor esperado de um operador é equivalente

a minimizar seu autovalor. Portanto, a função objetivo do problema de encontrar o menor autovalor de uma matriz \mathcal{H} é dada por

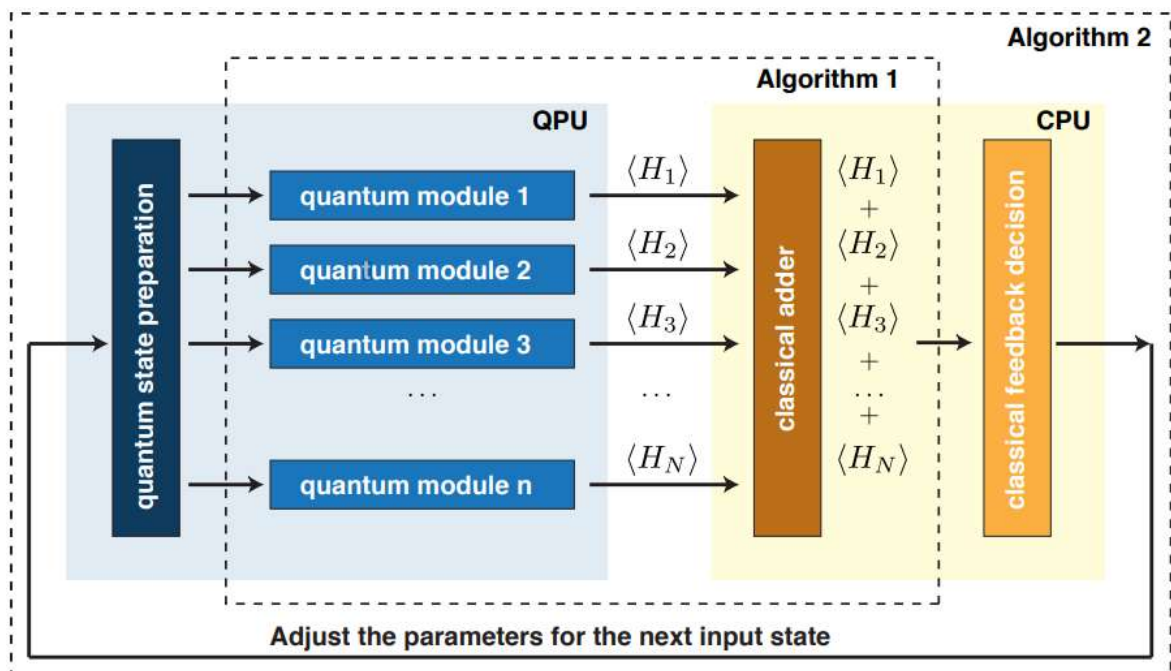
$$F_{\Theta} = \langle \psi_{\Theta} | \mathcal{H} | \psi_{\Theta} \rangle. \quad (35)$$

A Equação 25 mostra que a matriz hermitiana \mathcal{H} pode ser escrita como uma combinação linear de operadores de Pauli. Como consequência, a função objetivo se torna uma soma dos valores esperados de cada um dos operadores de Pauli. Logo, podemos usar a Equação 25 para reescrever a função objetivo (Equação 35) como

$$F_{\Theta} = \alpha_0 \langle \psi_{\Theta} | H_0 | \psi_{\Theta} \rangle + \alpha_1 \langle \psi_{\Theta} | H_1 | \psi_{\Theta} \rangle + \dots + \alpha_n \langle \psi_{\Theta} | H_n | \psi_{\Theta} \rangle. \quad (36)$$

De acordo com (PERUZZO et al., 2014), cada termo da soma (valores esperados individuais dos operadores de Pauli) que compõe a função objetivo é denominado módulo. Para cada conjunto Θ de parâmetros, os módulos assumem seus respectivos valores e a função objetivo F_{Θ} é calculada por meio de um somador clássico. Vale lembrar que os parâmetros são atualizados iterativamente via método de otimização clássico. A Figura 10 ilustra o fluxograma do algoritmo.

Figura 10: Esquema do VQE.



Fonte: (PERUZZO et al., 2014)

3.1.6 Estado Fundamental de Energia de Moléculas

Uma das aplicações do VQE é na determinação do estado fundamental de energia de moléculas. A molécula H_2 conhecida como Hidrogênio molecular possui a propriedade de ser um gás muito leve. Nesta molécula, existe uma equidade de eletronegatividade entre cada átomo de Hidrogênio (por se tratar de uma molécula apolar). Considerando a molécula em seu estado de equilíbrio, ou seja, $R_{eq} = 0.735 \text{ \AA}$, a mesma pode ser representada na forma do Hamiltoniano, como mostrado em (Qiskit, 2020), pela matriz hermitiana H dada por

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} -1.06365328 & 0 & 0 & 0.18093119 \\ 0 & -1.06365328 & 0.18093119 & 0 \\ 0 & 0.18093119 & -1.06365328 & 0 \\ 0.18093119 & 0 & 0 & -1.06365328 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

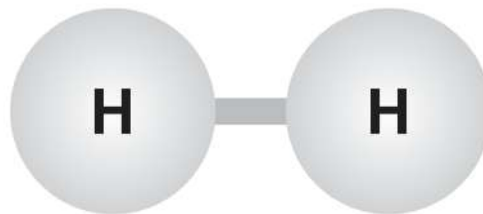
Do ponto de vista de nossa aplicação a formulação matricial do Hamiltoniano é dado por uma matriz constante relacionada ao estado de equilíbrio. Neste exemplo estamos avaliando a energia mínima para um valor de R (que foi mantido fixo para simplificar a análise do problema). Além disso, tratando-se de uma matriz Hermitiana, é possível representá-la em termos da base de Pauli. Usando as equações (26) e (27) é possível representar H usando a base de Pauli $X = \sigma_x$ combinada com a identidade I da forma

$$H = (0.18093119)XX - (1.06365328)II, \quad (38)$$

onde XX e II são matrizes em bloco 4×4 obtidas por meio do produto de Kronecker (MERMING, 2007). Portanto, o valor esperado do Hamiltoniano é dado por

$$\langle H \rangle = 0.18093119 \langle XX \rangle - 1.06365328. \quad (39)$$

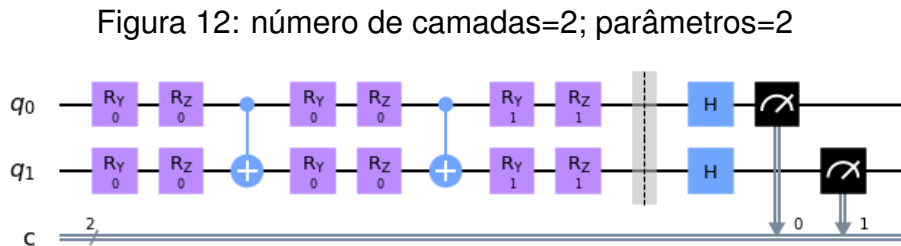
Figura 11: Representação esquemática de uma molécula de H_2 .



Fonte: Autor

A função objetivo dada pela equação (39) será minimizada usando a técnica VQE por meio de uma busca multi-paramétrica no espaço de Hilbert. Na Figura (12) temos

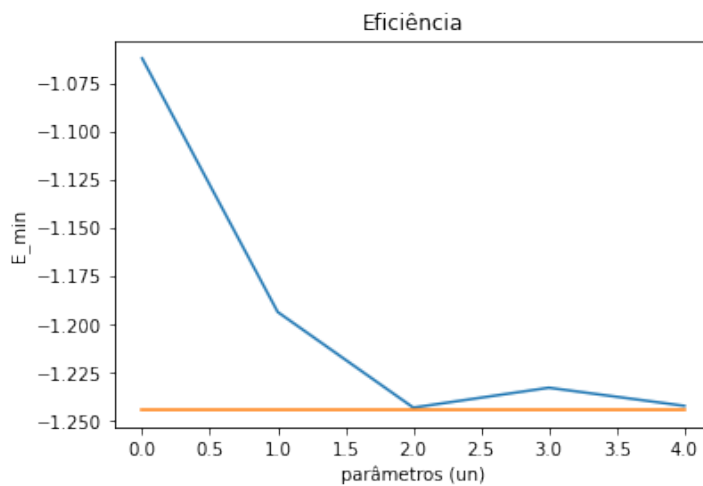
a representação de um ansatz com uma profundidade (do inglês, *depth*) igual a 2 e vetor de busca dado por $\theta = (\theta_1, \theta_2)^T$. Observe que a medida é realizada na base ZZ necessitando uma introdução de duas portas Hadamard antes da realização da medida.



Fonte: Autor

No gráfico abaixo, vemos a eficiência do ansatz em relação à sua profundidade (depth). Em laranja, o valor real para a energia fundamental do átomo de hidrogênio dada por: -1.24458447 Ha. Note que usando VQE com uma busca bi-paramétrica obtemos boas aproximações para a energia mínima.

Figura 13: Para um número de camadas=2, foi encontrado $E_{min} = -1.243100834242$ Ha



Fonte: Autor

3.2 QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM (QAOA)

O QAOA é um algoritmo variacional da computação quântica adequado para resolver problemas de otimização combinatória. Diferente do VQE, o QAOA não utiliza um ansatz genérico para criar a função de onda, e sim um operador unitário que corresponde à função objetivo. Nesta seção, apresentaremos um problema de otimização

combinatória que pode ser modelado como um modelo ferromagnético popular na mecânica estatística: o *Modelo de Ising* (ou *Hamiltoniano de Ising*). O algoritmo consiste em modelar a função objetivo (F.O.) como um *Hamiltoniano de Ising* e transformá-la em operadores unitários, aplicar tais operadores em um estado de entrada, medir os valores esperados, atualizar os parâmetros e repetir o processo até que a função custo seja minimizada. Quando a energia da F.O. é minimizada, a distribuição de probabilidades (obtida após a medição da função de onda $|\psi\rangle$ com os parâmetros ótimos) apresenta uma ocorrência maior do autoestado de $|\psi\rangle$ que fornece a melhor configuração para o problema.

3.2.1 Modelo de Ising

O modelo do comportamento de materiais ferromagnéticos pode ser descrito pelo *Hamiltoniano de Ising*. O modelo representa uma cadeia de partículas de spin 1/2, que interagem em pares, sendo que cada constituinte está sujeito à um campo magnético de magnitude h_i . Como partículas de spin 1/2 podem assumir apenas duas direções de momento de dipolo ("up" e "down") a interação entre cada par de partículas fornece uma energia (positiva ou negativa) de acordo com as orientações dos spins. Para encontrar a configuração dos momentos de dipolo que fornece o menor valor de energia possível do sistema, a seguinte função objetivo deve ser minimizada:

$$C(z) = - \sum_{\langle ij \rangle} z_i z_j - \sum_i h_i z_i. \quad (40)$$

As variáveis z_i da função objetivo podem assumir apenas valores unitários, sejam eles positivos ou negativos, ou seja, $z_i \in \{-1, +1\}$. As variáveis podem ser escritas como operadores de Pauli-Z (σ_z), já que ± 1 são autovalores de σ_z , associados às autofunções de spin das partículas.

3.2.2 Operador Gamma

O Operador Gamma (ou Operador de Fase) representa as interações entre as partículas adjacentes, bem como a resposta das partículas ao campo magnético aplicado. Trata-se de escrever a função objetivo do problema (Equação 40) como um operador unitário para que possa ser aplicada diretamente no circuito. Como visto, o operador descrito na Equação 40 é não-unitário, visto que não satisfaz o critério da Equação 7. Contudo, cada termo da soma (negligenciando os coeficientes) é um operador unitário. Para descrever este Hamiltoniano define-se o Operador Gamma através da relação

$$U(C, \gamma) = e^{-i\gamma C(z)} = e^{i\gamma \sum_{\langle ij \rangle} z_i z_j + i\gamma \sum_i h_i z_i}. \quad (41)$$

Como $C(z)$ é expressa em termos dos operadores Pauli-Z e o produto tensorial entre eles geram matrizes diagonais, $U(C, \gamma)$ também é uma matriz diagonal (porém unitária), onde o parâmetro γ é um dos parâmetros variacionais usados no QAOA. Desse modo, o operador $U(C, \gamma)$ pode ser escrito como a operação unitária

$$U(C, \gamma) = \prod_{\langle ij \rangle} e^{i\gamma Z_i Z_j} \prod_{i=0}^N e^{i\gamma h_i Z_i}. \quad (42)$$

Esse operador (assim como produtos tensoriais entre matrizes de Pauli-Z) apresenta a forma de uma matriz diagonal, onde os elementos da diagonal são exponenciais complexas que adicionam fases no estado quântico no qual é aplicado.

3.2.3 Operador de Mistura

O operador $U(B, \beta)$ é aplicado com o objetivo de misturar as amplitudes (gerando interferências destrutivas e construtivas) possibilitando explorar melhor o espaço de busca e aumentando as chances de encontrar, com maior precisão, o ponto ótimo global da função objetivo. O Operador de Mistura pode ser descrito, matematicamente, como

$$U(B, \beta) = e^{-i\beta \sum_{j=0}^N X_j} \equiv \prod_{j=0}^N e^{-i\beta X_j}. \quad (43)$$

Tal operador pode ser construído utilizando apenas operações de rotação em *qubits* individuais do tipo RX. Contudo, a eficiência desse operador está diretamente ligada ao tempo de convergência e à acurácia do algoritmo. A Equação 44 descreve o operador em sua forma mais simples, representado apenas como rotações em torno do eixo x da *Esfera de Bloch*.

3.2.4 Função objetivo do QAOA: Medindo Valores Esperados

As operações unitárias apresentadas nas subseções anteriores podem ser representadas como diagramas de circuitos quânticos. No QAOA, cada conjunto das operações em questão são conhecidas como *layers*. A i -ésima *layer* do circuito pode ser escrita como

$$U(\gamma_i, \beta_i) = U(B, \beta_i)U(C, \gamma_i), \quad (44)$$

e, portanto, a sequência desses operadores representa o operador geral do QAOA. Quanto maior o número de *layers*, maior o número de parâmetros do circuito e, consequentemente, maior a acurácia do resultado. Assim como no VQE, a função objetivo do QAOA também é um valor esperado. A diferença entre eles é que, no VQE, utiliza-se um ansatz genérico e no QAOA, por sua vez, o ansatz é construído à partir da função objetivo. A atuação do operador geral do QAOA sobre o estado de entrada $|s\rangle$

pode ser considerada da seguinte maneira:

$$|\vec{\gamma}, \vec{\beta}\rangle = (U(B, \beta_n)U(C, \gamma_n)) \dots (U(B, \beta_1)U(C, \gamma_1))(U(B, \beta_0)U(C, \gamma_0))|s\rangle. \quad (45)$$

Como é de interesse encontrar a configuração de menor energia para o hamiltoniano, a função objetivo do problema é, novamente, a função dos valores esperados de energia, que se minimizada, retorna o menor autovalor de energia do sistema. A função objetivo do problema pode ser expressa como

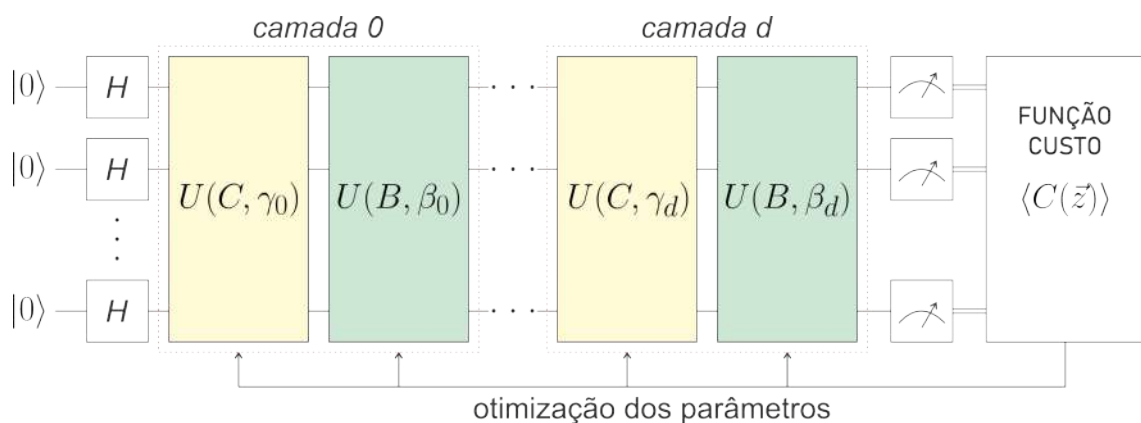
$$\langle C(Z) \rangle \equiv \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | C(Z) | \vec{\gamma}, \vec{\beta} \rangle. \quad (46)$$

Como visto nos capítulos anteriores, o valor esperado de energia também pode ser escrito como um valor médio. Quando o estado quântico é preparado e medido uma quantidade suficiente de vezes, a distribuição de probabilidades obtida nos possibilita calcular o valor esperado como a soma da quantidade de vezes que cada autoestado da função de onda foi medido, multiplicada por suas respectivas energias associadas. Portanto, a função objetivo também pode ser escrita como

$$\langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | C(Z) | \vec{\gamma}, \vec{\beta} \rangle = E_0 \alpha_0 \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | 0 \rangle + E_1 \alpha_1 \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | 1 \rangle + E_2 \alpha_2 \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | 2 \rangle + \dots + E_n \alpha_n \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | n \rangle = \sum_{i=0}^n E_i p_i. \quad (47)$$

Os parâmetros variacionais, γ e β , são atualizados iterativamente através de métodos clássicos de otimização até que o menor autovalor de energia seja encontrado. Por se tratar de problemas de otimização combinatória, o interesse do problema é no autoestado da base computacional associado ao menor autovalor, que é composto pela *bitstring* formada pela configuração ótima do problema. Uma representação esquemática do QAOA pode ser visto na Figura 14.

Figura 14: Esquema do QAOA.



Fonte: Autor

Como visto, o QAOA pode ser usado para encontrar a configuração que minimiza a energia do *Hamiltoniano de Ising*. Por se tratar de um problema de otimização combinatória, percebe-se que o algoritmo é um bom candidato a resolver problemas dessa natureza. Podemos inferir que problemas que podem ser modelados como um *Hamiltoniano de Ising*, também podem ser resolvidos usando o QAOA. O VQE, por sua vez, tem abordagem muito semelhante. Contudo, o resultado desejado é um escalar, que representa o menor autovalor de uma matriz.

No próximo capítulo, apresentamos aplicações de ambos os algoritmos, bem como os resultados obtidos usando os dispositivos da *IBM Quantum*, programados através do kit de desenvolvimento de software (SDK) *open-source Qiskit*. Serão apresentadas as soluções do problema do particionamento numérico utilizando o QAOA e uma proposta de como utilizar o VQE para resolver o problema do clique.

4 APLICAÇÕES EM PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

Neste capítulo, são apresentadas soluções para problemas de otimização usando VQAs. Como visto nos capítulos anteriores, o VQE pode ser usado em qualquer problema que envolva minimização de autovalores, o que implica em diversas áreas de aplicação, como em teoria espectral de grafos, simulação de moléculas, minimização de funções quadráticas de várias variáveis, otimização de portfólio, entre outras. O QAOA, por sua vez, é ideal para solução de problemas de otimização combinatória. Muitos problemas de otimização combinatória que pode ter sua função objetivo modelada como um Hamiltoniano de Ising ou QUBO (do inglês Quadratic Unconstrained Binary Optimization), pode ser resolvida usando o QAOA. Detalhes sobre o QUBO podem ser vistos em (GLOVER; KOCHENBERGER; YU, 2018). Ao longo desse capítulo, apresentamos exemplos de problemas de otimização resolvidos com o VQE e o QAOA, que serão aplicados para resolver respectivamente os problemas do clique e do particionamento de conjuntos.

4.1 APLICAÇÃO VQE: PROBLEMA DO CLIQUE

Em um grafo $G(V, E)$, onde V e E representam os respectivos conjuntos de vértices e arestas, um clique de tamanho K é um subgrafo completo $C(v, e)$ de $G(V, E)$. Para ser mais específico, um clique em um determinado grafo não direcionado corresponde a um subgrafo em que todo par de vértices está conectado por uma aresta. No caso, denominamos um K -clique ao clique que contém K vértices. Como $C(\bar{V}, \bar{E})$ é um grafo completo, todos os vértices do conjunto v são interconectados, o que nos permite definir o número de arestas do clique como $|\bar{E}| = K(K-1)/2$. Uma formulação da função objetivo do problema como um QUBO (do inglês *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*) feita por (LUCAS, 2014), mostra o Hamiltoniano para o problema do clique dado por

$$H = \left(K - \sum_v x_v \right)^2 + \left[|\bar{E}| - \sum_{uv \in E} x_u x_v \right]. \quad (48)$$

As variáveis da Equação 48 ($x_i \in \{0, 1\}$) podem ser transformadas para variáveis de spin ($z_i \in \{-1, +1\}$) por meio da relação $x_i = (z_i + 1)/2$. Podemos considerar o problema do clique como um problema de encontrar a configuração de um grafo bipartido, onde cada vértice pode assumir um estado lógico como 0 ou 1. A minimização do Hamiltoniano ($H = 0$) é dada quando um clique de tamanho K é encontrado no grafo, de forma que os vértices que fazem parte do clique assumem o estado 1 e os demais vértices do grafo assumem o estado 0. O termo quadrático é fortemente penalizado e aumenta quadraticamente o valor da função objetivo caso o número de vértices em estado 1 seja maior do que o número K de cliques. O segundo termo, por sua vez, é dependente do termo quadrático e é penalizado caso o número de arestas entre os vértices em estado 1 sejam menores que o número total de arestas pertencentes ao clique.

4.1.1 Desenvolvimento do Problema

Como discutido no Capítulo 3, o VQE pode ser utilizado para encontrar o menor autovalor de uma matriz simétrica. A Equação 48 pode ser escrita em termos de variáveis z_i , como mencionado anteriormente. Escrevendo a função objetivo em termos de variáveis de *spin* e expandindo os respectivos termos, obtemos

$$H = K^2 - K|V| + \frac{|V|}{2} + \left(\frac{|V| + 1}{2} - K \right) \sum_v z_v + \frac{1}{2} \sum_{i < j} z_i z_j + \left[|\bar{E}| - \frac{1}{4} \sum_{(uv) \in E} z_u z_v - \frac{1}{4} \sum_v \mathcal{O}_v z_v \right]. \quad (49)$$

Por simplicidade, se denotarmos a soma de termos constantes como c , os coeficientes dos termos lineares como d , a representação da função objetivo passa a ser dada por

$$H = c + d \sum_v z_v + \frac{1}{2} \sum_{i < j} z_i z_j + \left[-\frac{1}{4} \sum_{(uv) \in E} z_u z_v - \frac{1}{4} \sum_v \mathcal{O}_v z_v \right]. \quad (50)$$

A Equação 50 pode ser ainda mais simplificada com a união dos termos lineares das duas partes, onde \mathcal{O}_v representa a ordem (número de arestas ligadas) do vértice v . Através da relação $d_v = d - (1/4)\mathcal{O}_v$, a Equação 50 pode ser reescrita como

$$H = c + d_v \sum_v z_v + \frac{1}{2} \sum_{i < j} z_i z_j - \frac{1}{4} \sum_{(uv) \in E} z_u z_v. \quad (51)$$

Portanto, podemos transformar a função objetivo binária do problema para um pro-

blema de otimização de valor esperado, onde cada operador da combinação linear tem autovalores $\lambda_i \in \{-1, +1\}$. Como visto no capítulo anterior, o valor esperado do Hamiltoniano (ou valor médio de energia) pode ser escrito em termos dos operadores de Pauli Z como

$$\langle H \rangle = c + \langle d_v \sum_v Z_v \rangle + \frac{1}{2} \langle \sum_{i<j} Z_i Z_j \rangle - \frac{1}{4} \langle \sum_{(uv) \in E} Z_u Z_v \rangle. \quad (52)$$

Cabe ressaltar que todos os operadores da soma tem a mesma ordem matricial, ou seja, em um sistema com n *qubits* (ou vértices), os índices referem-se à quais *qubits* a operação está direcionada. Como exemplo, representamos o operador $Z_1 Z_3$ em um sistema com 4 *qubits* como $Z_1 Z_3 \equiv Z I Z I \equiv Z \otimes I \otimes Z \otimes I$. Neste caso, como a função objetivo do problema pôde ser escrita em termos apenas de operadores de Pauli Z e operadores identidade, não há a necessidade de usar as relações de mudança de base das Equações 33 e 34, o que nos permite usar um circuito quântico variacional fixo para medir todos os valores esperados da combinação.

4.1.2 Implementação e Simulações dos Resultados

Nessa subseção, será apresentada a implementação do VQE para encontrar um clique de tamanho $K = 3$ em um simples grafo $g(V, E)$, tal que $|V| = |E| = 4$. O problema pode ser facilmente estendido para qualquer grafo. O grafo escolhido pode ser representado à partir de sua matriz de adjacência (ver (TRUDEAU, 1994)) como

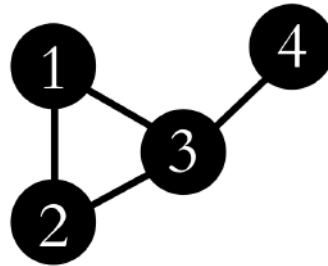
$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (53)$$

a qual pode ser representada geométricamente através da Figura 15. É fácil observar, por simples visualização, que a solução para o problema de encontrar um clique de tamanho $K = 3$ em $g(V, E)$ é dada por $\bar{x} = (1110)$.

Escrevendo a função objetivo para o valor esperado de energia do Hamiltoniano da Equação 52 (em relação ao grafo da Figura 15) e desprezando as constantes, temos que o valor esperado pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \langle H \rangle = & d_1 \langle ZIII \rangle + d_2 \langle IZII \rangle + d_3 \langle IIZI \rangle + d_4 \langle IIIZ \rangle + \\ & + \frac{1}{4} (\langle ZZII \rangle + \langle ZIZI \rangle + \langle IZZI \rangle + \langle IIZZ \rangle) + \\ & + \frac{1}{2} (\langle ZIIZ \rangle + \langle IZIZ \rangle). \end{aligned} \quad (54)$$

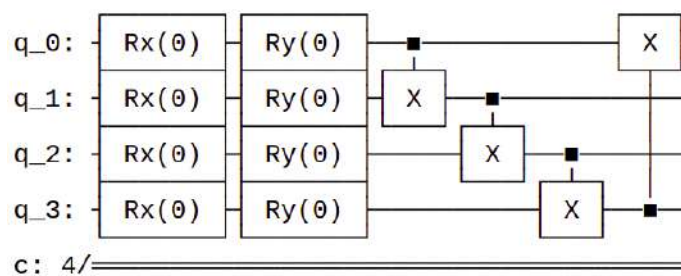
Figura 15: Grafo simples com um clique de tamanho $K = 3$.



Fonte: Autor

A forma variacional escolhida para gerar o vetor de estado $|\psi(\vec{\theta})\rangle$ foi utilizando portas lógicas de rotação em RX e RY, com os *qubits* em emaranhamento linear. Um circuito de emaranhamento linear é bastante adequado para a maioria das arquiteturas de chips dos dispositivos NISQ, visto que não exige alta conectividade entre os *qubits*, diminuindo a complexidade do circuito quando compilado para as portas lógicas base. Para o problema em questão, a Figura 16 (gerada através do *kit* de desenvolvimento de software, Qiskit, da IBM) mostra o desenho de uma layer em emaranhamento linear, com 4 parâmetros.

Figura 16: Layer individual criada usando o Qiskit, um SDK da IBM criado para simular e executar programas em processadores quânticos. A técnica usada para criar a forma variacional foi o emaranhamento linear, onde cada *qubit* é conectado com seu adjacente por uma CNOT. Todos os parâmetros das layers foram inicializados como $\vec{\theta} = \vec{0}$.



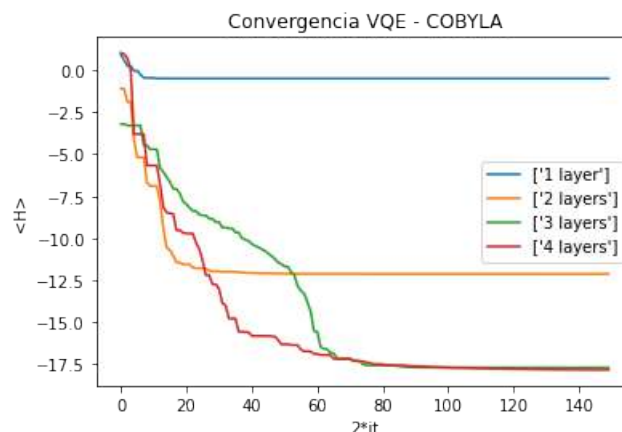
Fonte: Autor

O aumento do número de layers incrementa a precisão do algoritmo. Contudo, um número elevado de layers resulta em um maior tempo de execução da otimização dos parâmetros. Portanto, para fazer uma análise do número mínimo de layers necessário para resolver o problema, uma análise da convergência do algoritmo foi feita variando o número de layers. Cada layer é composta por oito portas lógicas de rotação. A sequência $RY(\theta_i)RX(\theta_i)$ possui o mesmo ângulo de rotação, ou seja, cada layer é

composta por quatro parâmetros. Logo, o número total de parâmetros do circuito é dado pelo produto entre o número de layers e o número de *qubits*. A convergência do valor esperado do Hamiltoniano para o valor mínimo (dado por $\langle H \rangle_{min}$) pode ser vista na Figura 17, onde são exibidas as curvas de convergência para um número de layers situado entre 1 e 4.

As curvas de convergência comprovam a importância de se utilizar uma forma variacional eficiente, e como o aumento no número de parâmetros melhor o espaço de busca (neste caso, o espaço de Hilbert). Para este problema, a análise nos mostra que a utilização de 3 layers foi suficiente para encontrar uma boa aproximação para o mínimo global da função objetivo. O valor mínimo encontrado ($\langle H \rangle_{min} \approx -17.6$) é negativo devido ao descarte das constantes positivas da função objetivo, visto que não alteram a solução ótima do vetor de estado, $|\psi(\vec{\theta}_{opt})\rangle$.

Figura 17: Convergência do algoritmo para diferentes números de camadas.



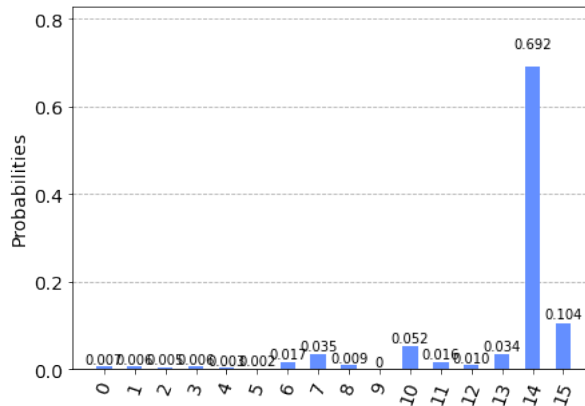
Fonte: Autor

A solução do problema é obtida à partir de um conjunto de medidas sobre $|\psi(\vec{\theta}_{opt})\rangle$. O autoestado de $|\psi(\vec{\theta}_{opt})\rangle$ com a maior ocorrência nas medições, é o autoestado da base computacional associado ao menor autovalor do Hamiltoniano. A Figura 18 mostra que $|\psi(\vec{\theta}_{opt})\rangle \approx \sqrt{0.70}|1110\rangle + \delta|e\rangle$, sendo $|\delta| \ll 1$ um coeficiente associado à ocorrência de medidas de outros autoestados que não representam a solução ótima.

4.2 APLICAÇÃO QAOA: PROBLEMA DA PARTIÇÃO DE CONJUNTOS

O problema da partição de conjuntos consiste em minimizar a diferença entre as somas dos elementos de dois subconjuntos (s_1, s_2) disjuntos de um dado conjunto S . Várias aplicações podem ser encontradas para este cenário, como problemas de agendamento, problemas de roteirização (*Vehicle Routing Problem*), entre outros. O

Figura 18: Distribuição de probabilidades gerada à partir de um conjunto de medidas. O eixo horizontal representa as *strings* binárias colocadas na base decimal. É possível observar a maior ocorrência da *string* $14_{10} = '1110'$.



Fonte: Autor

problema da partição apresenta complexidade computacional elevada e, na teoria da complexidade, é classificado como um problema NP-difícil (SIPSER, 2007). A função objetivo para o problema pode ser escrita em termos dos elementos de s_1 e s_2 , como

$$f(s_1, s_2) = \left(\sum_{i=1}^{|s_1|} s_{1,i} - \sum_{i=1}^{|s_2|} s_{2,i} \right)^2 \quad (55)$$

4.2.1 Desenvolvimento do Problema

Como mostrado no capítulo anterior, é adequado escrever a função objetivo de problemas de otimização combinatória, a serem resolvidos usando o QAOA, como um *Modelo de Ising*. Portanto, podemos reescrever a equação 55 como uma função objetivo binária (cujas variáveis são tais que $z_i \in \{-1, +1\}$), dada por

$$C(\vec{z}) = \left(\sum_{i=0}^n v_i z_i \right)^2 \quad (56)$$

Como visto no capítulo anterior, podemos transformar o problema de encontrar a melhor configuração para o vetor \vec{z} (de variáveis binárias) para o problema de encontrar o menor autovalor de uma matriz hermitiana. Expandido a equação 56 e transformando variáveis z_i em operadores de Pauli-Z (cujos autovalores pertencem ao conjunto $\{-1, +1\}$) a função objetivo se torna um problema de minimizar autovalores. Seguindo os passos 41 e 42, à partir da equação 56, obtém-se o Operador Gamma, que pode ser escrito como

$$U(C, \gamma) = \prod_{\langle ij \rangle} e^{-i\gamma(2v_i v_j Z_i Z_j)} \quad (57)$$

Ao desenvolver a equação 56, nota-se o surgimento do termo $\sum_i v_i^2$, que pode ser descartado da equação 57, por se tratar de um termo constante, que representa uma fase global no Operador Gamma, e não altera o resultado final. O Operador de Mistura, por sua vez, pode ser desenhado como uma forma variacional arbitrária, de modo a auxiliar o algoritmo a varrer o espaço de busca de forma eficiente. Como há diversas possibilidades de escolha para um Operador de Mistura, o mesmo seria denotado simplesmente por $U(B, \beta)$, que mostra a dependência deste operador em relação ao parâmetro variacional β . O estado inicial $|s\rangle$, mencionado no passo 45, pode ser criado à partir da seguinte operação: $H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} = |s\rangle$. Na próxima subseção, serão mostrados os passos na implementação do QAOA para o problema da partição de conjuntos.

4.2.2 Implementação e Simulações dos Resultados

Nesta subseção, serão mostrados os passos na implementação das operações unitárias que compõem uma *layer* do QAOA (expressa como $U(B, \beta_i)U(C, \gamma_i)$) para o problema da partição de conjuntos, bem como uma descrição formal desses operadores. Em seguida, serão apresentados alguns resultados obtidos para diferentes conjuntos, assim como o comportamento da curva de convergência para diferentes números de *layers*.

Com o objetivo de mostrar um passo a passo do algoritmo, começaremos aplicando o QAOA para o conjunto simples $V = \{2, 4, 2\}$. Como visto anteriormente, para um conjunto de tamanho três, serão necessários três *qubits* no circuito. Começaremos com a representação matricial do Operador Gamma (descrito na Equação 57). Como a matriz do expoente é dada pelo produto $-i2\gamma v_1 v_2 Z_i Z_j$, podemos usar como exemplo a exponenciação do operador $-i2\gamma v_1 v_2 Z_1 Z_2 \equiv -i2\gamma v_1 v_2 Z \otimes Z \otimes I$. A forma matricial desse operador é

$$Z_1 Z_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (58)$$

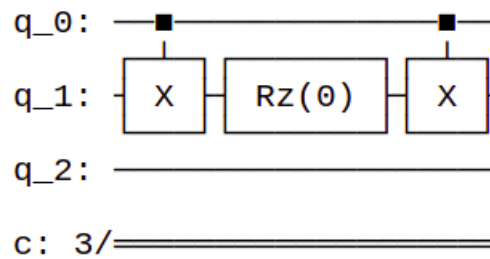
onde \mathbf{I} e 0 são matrizes 2×2 . Portanto, podemos aplicar a exponenciação da matriz (dada na Equação 59) para obter o primeiro termo do produto do Operador Gamma. Em (KOCH DANIEL, 2020) vemos que a exponenciação de matrizes pode ser feita através da expansão em série $e^A = \sum_n A^n/n!$. O resultado da exponenciação da matriz diagonal (Equação 58), com a multiplicação dos termos $-i\gamma v_1 v_2$ é descrito pelo

operador unitário dado por

$$e^{-i2\gamma v_1 v_2 Z_1 Z_2} = \begin{pmatrix} e^{-i2\gamma v_1 v_2} \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i2\gamma v_1 v_2} \mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i2\gamma v_1 v_2} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i2\gamma v_1 v_2} \mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Contudo, esse aparato matemático não é necessário para implementar a operação em dispositivos quânticos baseados em *gates*. A operação lógica representada como um circuito quântico é mostrada na Figura 19. Vale destacar que todos os demais fatores do Operador Gamma podem ser implementados de modo semelhante.

Figura 19: Um dos fatores do Operador Gamma, representado como circuito quântico. Para o conjunto $V = \{2, 4, 2\}$, o ângulo de rotação da porta RZ é dado por $-2\gamma v_1 v_2 = -2\gamma 8$. A Figura mostra um ângulo 0 devido à inicialização do parâmetro variacional $\gamma = 0$.



Fonte: Autor

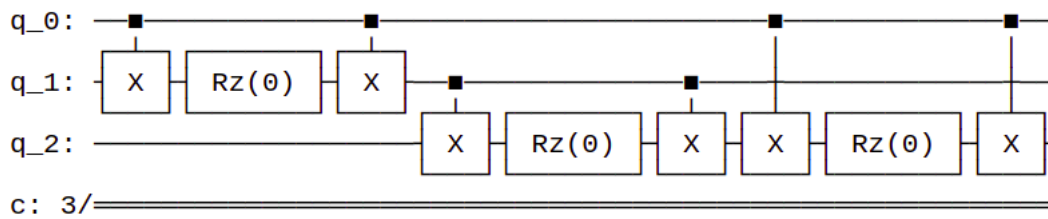
A Equação 57 pode ser expandida de modo a facilitar o entendimento da implementação do Operador Gamma, com todos os seus fatores. Para o problema do conjunto a ser particionado, podemos escrever o Operador Gamma como

$$U(C, \gamma) = \prod_{\langle ij \rangle} e^{-i\gamma(2v_i v_j Z_i Z_j)} = e^{-i\gamma(2v_1 v_3 Z_1 Z_3)} e^{-i\gamma(2v_2 v_3 Z_2 Z_3)} e^{-i\gamma(2v_1 v_2 Z_1 Z_2)}, \quad (60)$$

onde os valores de v_1 , v_2 e v_3 são, respectivamente, 2, 4 e 2 (de acordo com o conjunto V). Diante disso, o operador unitário Gamma pode ser implementado por completo (conforme mostrado na Figura 20).

O Operador Beta (ou Operador de Mistura) por sua vez, pode ser implementado como uma forma variacional genérica eficiente independente do problema. Neste caso, como no exemplo do VQE, a forma variacional utilizada foi a de emaranhamento linear. Contudo, para o QAOA, este operador conta com apenas um único parâmetro variacional β para cada layer. A Figura 21 mostra a forma operacional do operador

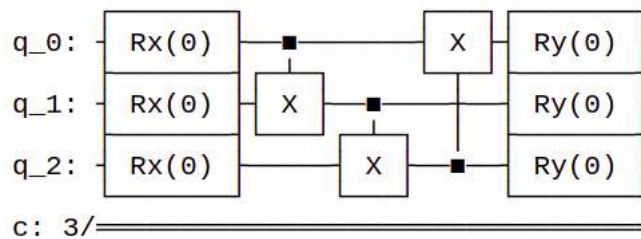
Figura 20: Operador Gamma com o parâmetro variacional γ inicializado em 0.



Fonte: Autor

com o parâmetro variacional β inicializado em 0. Neste caso, o ângulo de rotação dos operadores RX e RY é dado apenas por β .

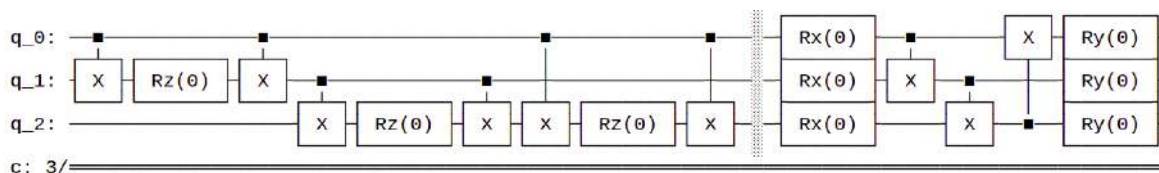
Figura 21: Operador Beta.



Fonte: Autor

Definidos os operadores $U(C, \gamma)$ e $U(B, \beta)$, é possível definir a *layer* do QAOA como a forma variacional $U(\gamma, \beta) = U(B, \beta)U(C, \gamma)$, que pode ser implementada simplesmente aplicando as duas operações em sequência, como mostra a Figura 22. Cada *layer* é composta por dois parâmetros variacionais e o aumento do número d de *layers* aumenta a precisão do cálculo do valor mínimo de energia do Hamiltoniano, assim como no VQE. Vale destacar que o número total de parâmetros é dado por $2d$.

Figura 22: Layer individual do QAOA, com ambos os parâmetros γ e β inicializados em 0.



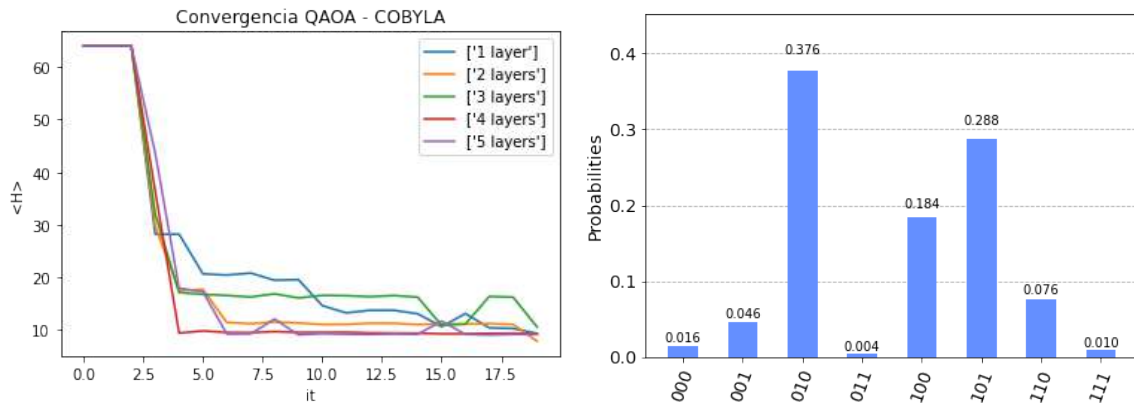
Fonte: Autor

Como visto anteriormente, o estado inicial do circuito, antes da aplicação das *layers* é dado por $|s\rangle = H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} = |+\rangle^{\otimes n}$. Portanto, a função objetivo do problema (que depende do conjunto de parâmetros $\vec{\gamma}$ e $\vec{\beta}$) é dada por

$$F(\vec{\gamma}, \vec{\beta}) = \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | C(z_1 z_2 z_3) | \vec{\gamma}, \vec{\beta} \rangle. \quad (61)$$

A função objetivo (que representa valor médio de energia do Hamiltoniano) deve ser calculada através da distribuição de probabilidades obtida após efetuado um conjunto de medidas sobre a função de onda. Este processo deve ser feito iterativamente utilizando-se algoritmos clássicos de otimização, visando atualizar os parâmetros em busca do mínimo global da função objetivo. Para o problema em questão foi utilizado, assim como no VQE, a técnica de otimização restrita por aproximação linear, chamada COBYLA, disponível em *frameworks open-source* como *Scipy* e o próprio *Qiskit*. Os resultados do algoritmo podem ser vistos na figura 23 onde são ilustrados os resultados de convergência e diagrama de probabilidades.

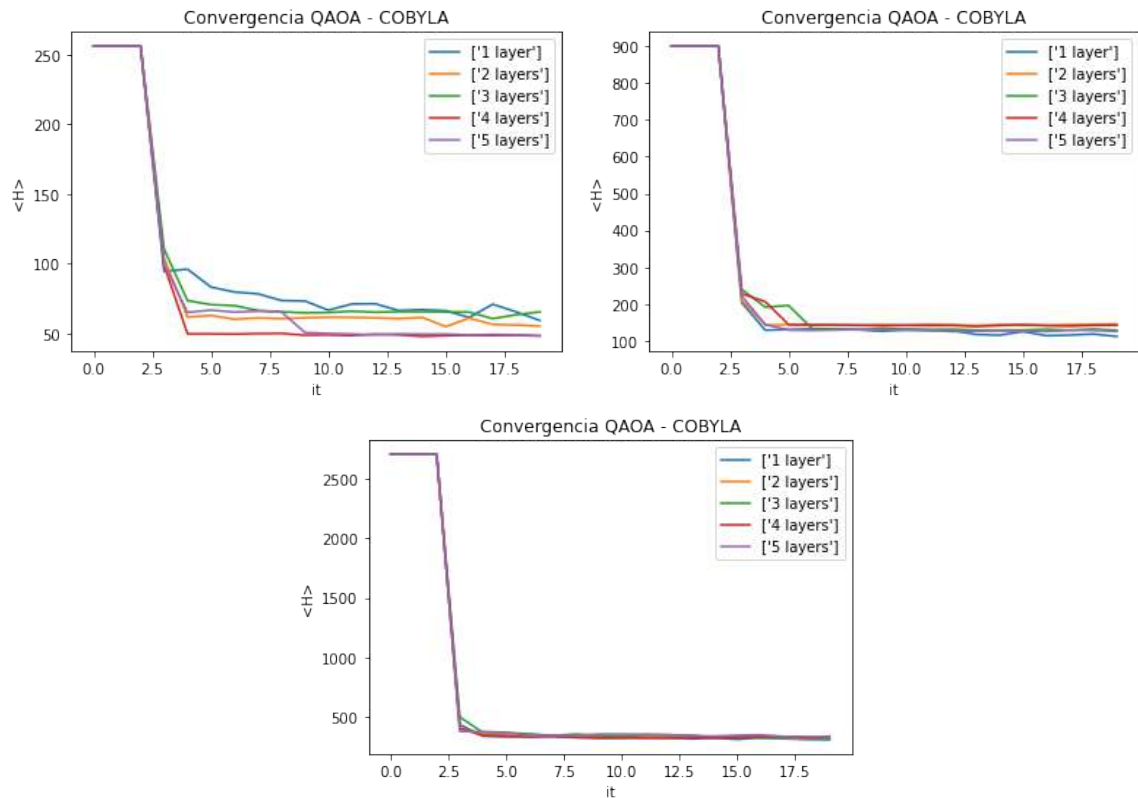
Figura 23: Resultados da convergência do algoritmo (esquerda) para diferentes números de *layers* e a distribuição de probabilidade após as medidas sobre a configuração ótima dos parâmetros variacionais com 4 *layers*. Os autoestados mais medidos correspondem à solução que minimiza o problema para o conjunto $V = \{2, 4, 2\}$, que pode ser particionado em $v_1 = \{2, 2\}/v_1 = \{4\}$ e $v_2 = \{2, 2\}/v_2 = \{4\}$, apresentando dois mínimos globais.



Fonte: Autor

Outros testes para diferentes conjuntos com tamanhos 5, 7 e 10 também foram realizados utilizando-se o mesmo código. Os conjuntos em questão possuem múltiplas soluções, ou mínimos globais, e em todos os testes os resultados mostraram maiores ocorrências dos resultados estão atreladas aos autoestados correspondentes aos autovalores mínimos do Hamiltoniano. A Figura 24 mostra que a convergência do algoritmo foi semelhante para todos os testes, revelando uma baixa dependência do tamanho do conjunto à ser particionado com o número de layers. Em todos os casos, o algoritmo convergiu na quinta iteração para o valor próximo ao mínimo valor médio. Os diagramas de probabilidades não são mostrados devido à dificuldade na visualização de um histograma para um número elevado de autoestados.

Figura 24: Resultados da convergência do algoritmo para os respectivos conjuntos de tamanhos 5, 7 e 10 e diferentes números de *layers*.



Fonte: Autor

5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Os métodos apresentados podem ser aplicados a uma variedade de problemas de otimização que podem ser resolvidos com a arquitetura híbrida dos algoritmos quânticos variacionais. Em todas as simulações realizadas foi usado o método de otimização global COBYLA para o ajuste de parâmetros. Funções da framework *SciPy* foram usadas para testar outros métodos de otimização global, como o *Differential Evolution*. Contudo, para os problemas estudados, tais métodos mostraram um desempenho inferior ao COBYLA. Os problemas de otimização combinatória utilizados para exemplificar os métodos foram os problemas do clique e do particionamento de conjuntos. Contudo, como discutido, outros problemas de otimização combinatória modelado como um QUBO podem ser adaptados para o mesmo modelo.

Vale ressaltar que a flexibilidade na escolha da melhor forma variacional impacta positivamente na mitigação de erros uma vez que as operações de controle utilizadas (CNOTs) podem ser aplicadas entre *qubits* que tenham conexão física real entre si, descartando a necessidade de realizar um número grande de operações de troca (SWAP). Como os dispositivos da era NISQ precisam de técnicas de mitigação de erros, os algoritmos variacionais mostram-se como bons candidatos a resolverem problemas de otimização em curto prazo. Além disso, os resultados das simulações mostram que as técnicas empregadas geram resultados corretos para os problemas. Entretanto, com o aumento do número de parâmetros variacionais, torna-se necessário o uso de algoritmos de otimização clássicos de desempenho superior. Isso ocorre devido ao aumento da complexidade do espaço de busca com a elevação do número de parâmetros.

Por fim, os resultados do trabalho mostraram que algoritmos quânticos variacionais são bons candidatos para solucionar problemas de otimização, uma vez que os problemas resolvidos possuem uma alta complexidade computacional. Contudo, o trabalho abordou exemplos desses problemas em escala reduzida como provas de conceito e servindo de motivação para o desenvolvimento de novos algoritmos, utilizando os blocos de construção dos algoritmos apresentados. Pesquisas recentes provaram matematicamente que métodos de *kernel* para aprendizagem supervisionada (imple-

mentados utilizando algoritmos variacionais) apresentam vantagem exponencial em relação aos métodos clássicos (como, por exemplo, o *Support Vector Machine*) para conjuntos de dados onde o mapeamento das *features* possui alta complexidade (LIU; ARUNACHALAM; TEMME, 2021). A proposta de implementação desses modelos pode ser vista em (HAVLÍČEK et al., 2019).

Em continuidade deste trabalho, estão sendo desenvolvidas implementações dos modelos de *Quantum Kernel*, citados no parágrafo anterior, com o objetivo de treinar circuitos quânticos de baixa profundidade (do inglês *low depth*) em dispositivos NISQ, que possuem um potencial consideravelmente elevado para aplicações em curto prazo.

REFERÊNCIAS

ALBINO, Anton S.; GOMES, Raphael F. I.; BLOOT, Rodrigo. Programação na Plataforma IBM Q e Análise Comparativa da Performance de Computadores Quânticos. **Anais Cobicet**, São Paulo, 2020.

BEHERA, Bikash; SETH, Swarnadeep; DAS, Antariksha; PANIGRAHI, Prasanta. Demonstration of Entanglement Purification and Swapping Protocol to Design Quantum Repeater in IBM Quantum Computer. **Quantum Information Processing**, New York, v.18, 2019.

CEREZO, M. et al. Variational Quantum Algorithm. **Nature Communications**, London, v.3, n.1, p.625–644, 2021.

CHRIST ANDREAS, et. al. **Experimental Methods in the Physical Sciences**. Amsterdam: Elsevier, 2013.

FEYNMAN, R. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, New York, 1982.

GLOVER, F.; KOCHENBERGER, G.; YU, Du. Quantum Bridge Analytics I: A Tutorial on Formulating and Using QUBO Models. **Arxiv**: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1811/1811.11538.pdf>, Arxiv, 2018.

HAVLÍČEK, V. et al. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. **Nature Communications**, London, v.567, n.1, p.209–212, 2019.

KITAEV, A. Yu. Quantum measurements and the Abelian Stabilizer Problem. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/9511026>, Arxiv, v.20, n.1, p.101–106, 1995.

KOCH DANIEL, et. al. Fundamentals In Quantum Algorithms: A Tutorial Series Using Qiskit Continued. <https://arxiv.org/abs/2008.10647>, Arxiv, 2020.

LIU, Y.; ARUNACHALAM, S.; TEMME, K. A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning. **Nature Communications**, London, 2021.

LUCAS, Andrew. Ising formulations of many NP problems. **Frontiers in Physics**, Frontiers Media, v.2, p.1–5, 2014.

MERMIN, N. D. **Quantum Computer Science: An Introduction**. 1.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

NIELSEN, M.; CHUANG, I. **Quantum Computation and Quantum Information**. 10.ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

PERUZZO, Alberto et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. **Nature Communications**, London, 2014.

Qiskit. **27. Quantum Chemistry II: Finding the Ground States of H₂ and LiH - Part 3**. Disponível em: <<https://www.youtube.com/watch?v=o4BAOKbcd3o>>. Acesso em: 2020-09-01.

SIPSER, M. **Introdução à teoria da computação**. Boston: Cengage Learning, 2007.

TRUDEAU, Richard. **Introduction to Graph Theory**. New York: Dover, 1994.