Relatório de atividade projeto Quantum Oracles - Como transformar problemas clássicos em quânticos

Por: Alexandre Silva
Orientador: Mauricio Duarte

1. Tarefas realizadas

Todo material usado pode ser encontrado no meu perfil do github.

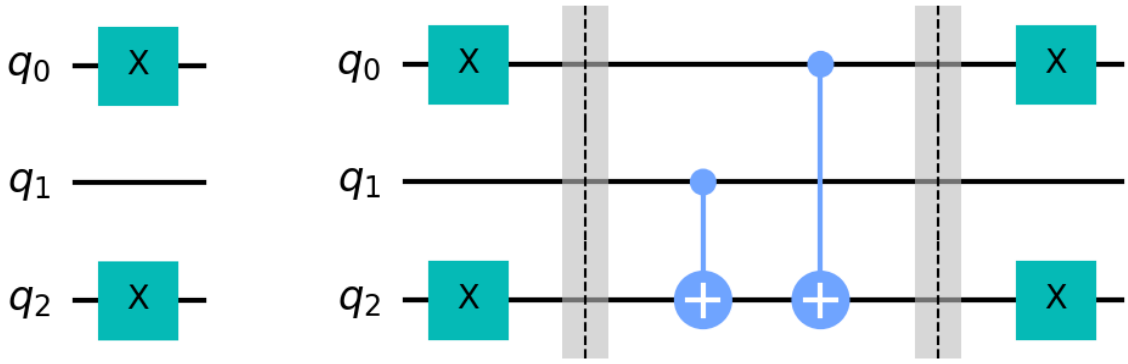
1.1. desenvolvimento

A partir da leitura, foram iniciados os testes, para validar tudo que estava sendo visto.
De início, foram testados algoritmos/circuitos genéricos, ou seja, que podem ser utilizados em diversas situações, dos quais são:

1.1.1. Boolean Oracle

O *Boolean Oracle* é um oracle que, internamente, implementa uma função booleana, mapeando os valores da entrada para saída, sem a necessidade de um *qubit* auxiliar.
Esses oracles são utilizados, normalmente, em algoritmos como os de *Deutsch–Jozsa* e de *Bernstein–Vazirani*.

Exemplo - oracles para o algoritmo de Deutsch–Jozsa

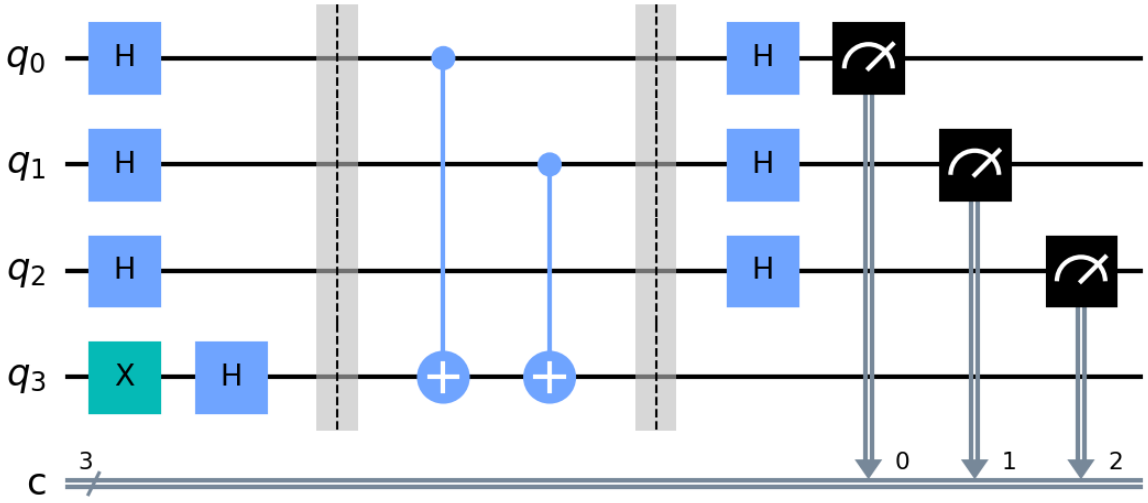


1.1.2. Phase Oracle

O *Phase Oracle* é um dispositivo que utiliza de fases para codificar valores dentro do *oracle*, através do efeito de *phase kickback* de *Controlled Gates*, ou ainda pelo uso de *gates* como *Z, CZ e CCZ*.

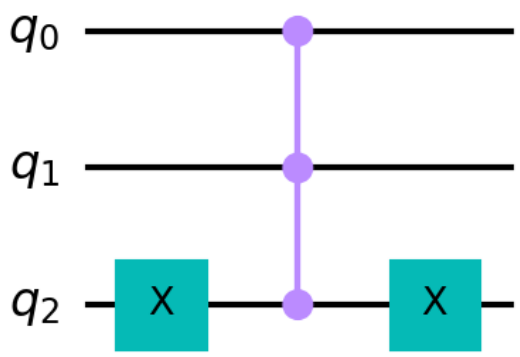
Sua utilidade é evidente quando usado em algoritmos de busca, como o de *Grover*, marcando os valores que são interessantes para a pesquisa, ou ainda quando precisamos de sobrepor valores.
Quando utilizado o método de *phase kickback*, seu circuito acaba precisando de um *qubit auxiliar*, responsável por realizar o efeito. Mapeando então os valores da entrada, para os mesmo valores da entrada mais o resultado da função (*phase*).
Com isso, após utilizar o phase oracle e removermos a superposição dos valores (*gate H*), temos então o valor do qual foi inserido dentro do oracle.

Exemplo - phase oracle com phase kickback



Outra maneira mais simples de implementar é utilizando os gates que aplicam fases, como o Z, CZ, CCZ, etc. Para isso, basta definir quais os valores booleanos que queremos, inverter as posições que estão com o valor 0, utilizando o *gate X*.

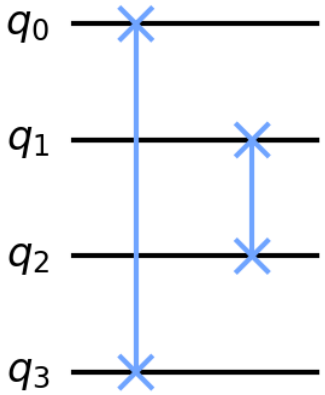
Exemplo - phase oracle com o CCZ gate, encodando o valor 011



1.1.3. Minimal Oracle

O *Minimal Oracle* tem uma função similar ao *Boolean Oracle*, implementar uma função dentro de si. Inclusive esse também pode ser considerado um *Boolean Oracle*. Contudo, ele é utilizado quando a função em questão é unitária e reversível, o que significa que, se fizermos uma matriz representando os mapeamentos de valores dela, e a raiz da soma do quadrado das amplitudes de cada estado (valores das colunas) é igual a 1 e é possível distinguir os mapeamentos para cada valor.

Exemplo - minimal oracle com SWAP

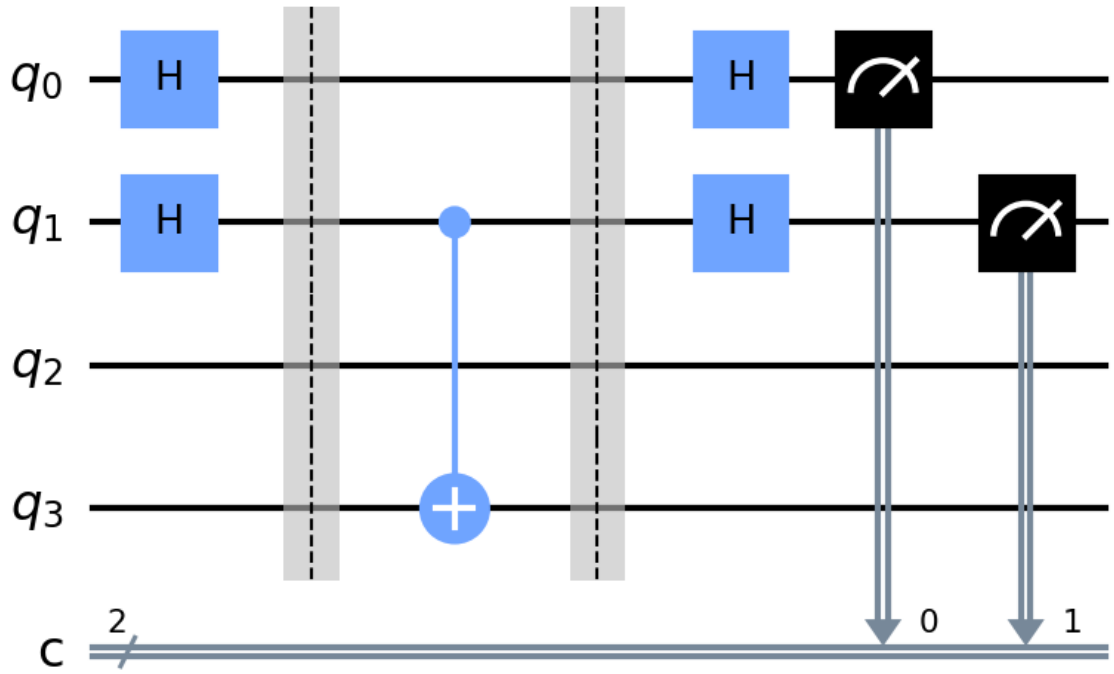


1.1.4. Simon's Oracle and Algorithm

Daniel R. Simon quando apresentou seu algoritmo quântico nos mostrou também um *oracle* interessante. Seu algoritmo é utilizado para encontrar o período de funções, ou seja, dado uma

função *booleana*, tentamos encontrar quando $f(x) = f(y)$, onde *x* é a entrada e *y* é a saída de *f(x)*.
Para montar esse oracle é necessário *n qubits* de entrada mais *n qubits* auxiliares, esses auxiliares serão usados para criar *entanglement* com as entradas.

Exemplo - algoritmo de Simon

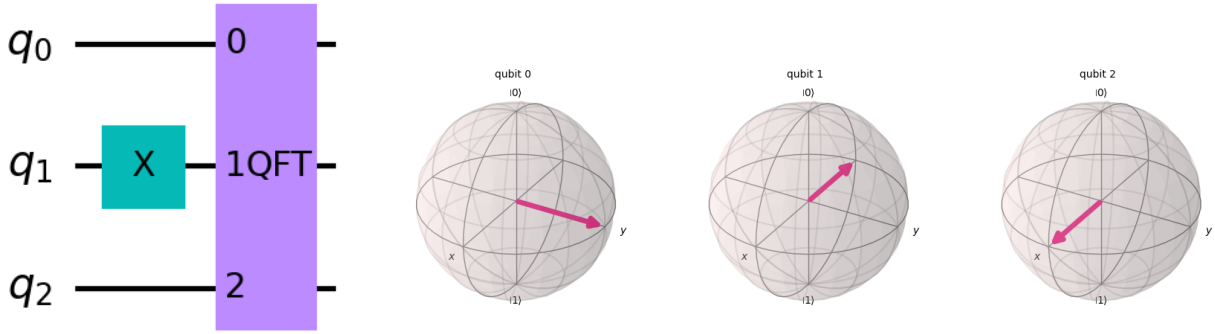


Repare que o *oracle* em si é apenas a parte do meio (*CX gate*), do qual age como um segredo escondido, assim como na criação de chaves criptográficas.
Sendo assim, ao adicionarmos o *Oracle*, estamos fazendo operações entre a matriz de entrada com o segredo, sendo esse segredo do exemplo a *string* 10.

1.1.5. Quantum Fourier Transformation (QFT)

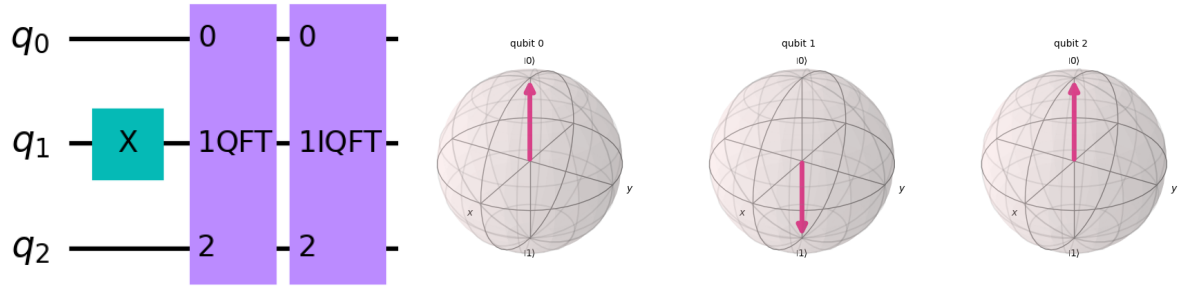
A transformada quântica de Fourier é uma dos algoritmos mais utilizados em circuitos, junto com sua função inversa. Podendo também ser visto como um Oracle.
Seu uso se dá através da marginalização do eixo Z, mapeando os valores então para os eixos X e Y, sendo interessante para algoritmos que manipulam fases.

Exemplo - QFT com 3 qubits



Assim, quando queremos voltar para a base computacional (0 e 1), podemos utilizar o inverso para tirar do eixo de *Fourier* para o eixo Z.

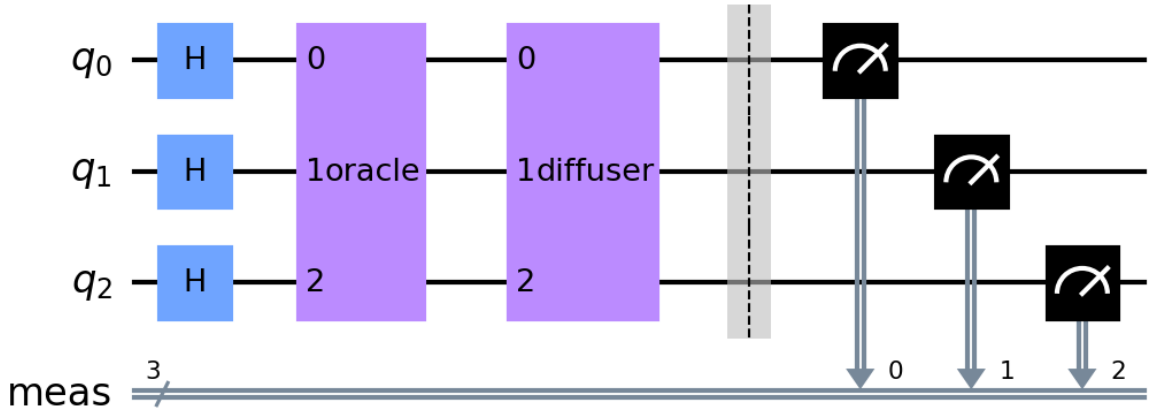
Exemplo - uso da função inversa da QFT



1.1.6. Grover's Algorithm

A partir do uso do *phase oracle*, podemos marcar os valores que queremos encontrar em um banco de dados desorganizado, e ao usá-lo em conjunto com o algoritmo de *Grover*, podemos encontrar os valores que desejamos em $O(\sqrt{n})$.

Exemplo - Grover algorithm

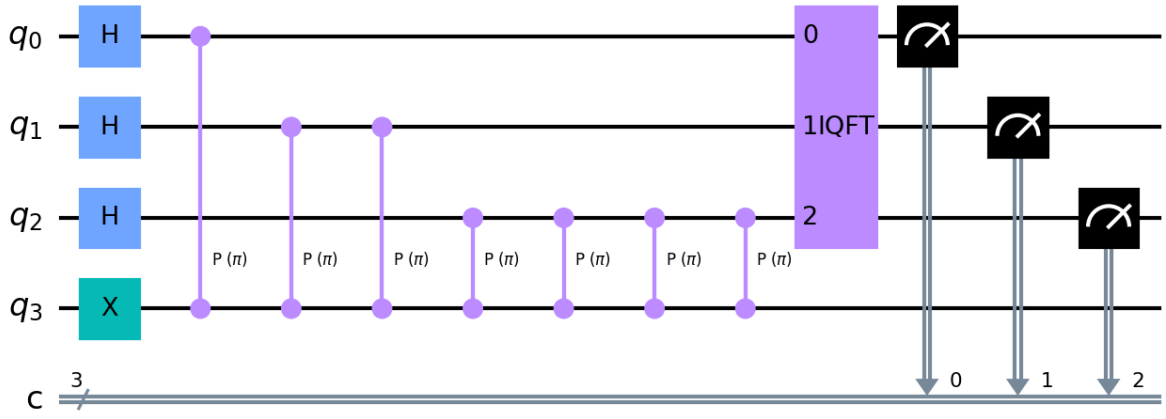


Para isso, setamos um estado de superposição igualitária para todos os possíveis valores (os tres *H* no começo), passamos esses valores pelo *Oracle* que marcará com um sinal negativo (*phase*=-1) nos valores que queremos encontrar e então aplicamos um *diffuser*, do qual é responsável por aumentar a probabilidade de encontrar os valores que queremos.

1.1.7. Quantum Phase Estimation(QPE)

Usando o inverso do *QFT*, podemos incluir dentro de um circuito uma certa fase, e através do *QPE*, podemos aproximar o ângulo na *bloch sphere* que causa essa fase.

Exemplo - QPE

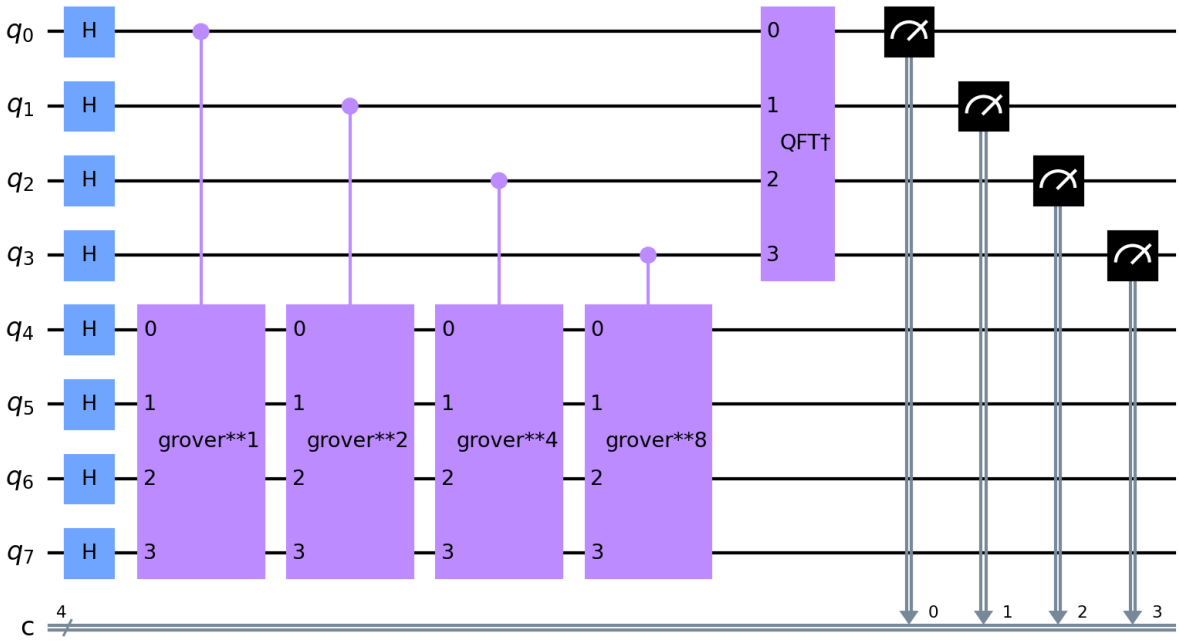


Sendo um algoritmo útil para a extração de informações, também usado por algoritmos como o de *Shor*.

1.1.8. Quantum Counting

A partir da ideia do *QPE* e usando o inverso do *QFT* + os operadores de *Grover*, podemos fazer um algoritmo para contar valores dentro de um *set*.

Exemplo - Quantum Counting

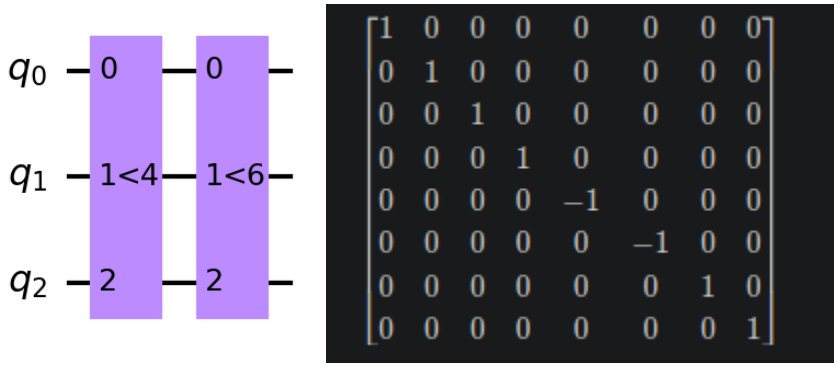


Para esse circuito precisamos de n qubits + n qubits auxiliares, do qual em cima temos o set com todos os valores possíveis e em baixo teremos a contagem em si.
Esse circuito também pode ser usado para diversos casos que é necessário contar. Contudo ele pode ser custoso em processamento, uma vez que precisamos executar o algoritmo de Grover muitas vezes, crescendo a uma taxa de $2^n - 1$ iterações a cada *qubit* adicionado.

1.1.9. Range de valores

Utilizando os *phase oracles*, podemos encodar certos *range* de valores dentro de cada um deles e, a partir de sua sobreposição podemos encontrar a diferença entre conjunto de valores.

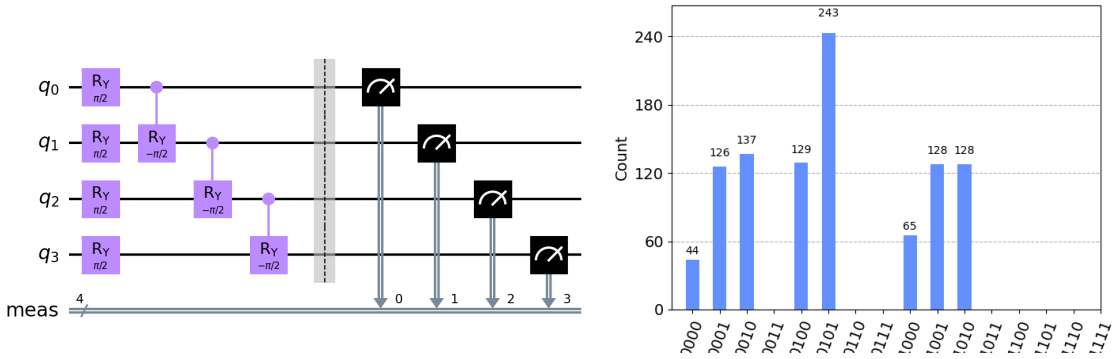
Exemplo - Exemplo Range de valores ($4 \leq x < 6$)



1.1.10. Fibonacci

Por fim, o último circuito testado foi o de *fibonacci*. Esse circuito toma proveito da sequência de valores binários sem números 1s consecutivos (como 0110, 1100 e 1111). A partir disso, basta utilizar o algoritmo, rodá-lo n vezes, e contar a quantidade de valores que apareceram, havendo então uma aproximação para o valor de *n* de *fibonacci* utilizando *n qubits*, sendo *n* iniciado em 2 (F(2) = 3).

Exemplo - Exemplo Fibonacci (F(4) = 8).



Podemos então utilizar esse algoritmo dentro de um oracle, e dividir os números que queremos encontrar.
Contudo, esse circuito acaba não sendo melhor do que a versão clássica, já que para termos o valor correto precisamos de muitas medições e para valores maiores precisamos de muitos *qubits*, o que acaba prejudicando seu uso.

1.2. Primeiro Teste de algoritmo

Com esses algoritmos em mãos, podemos começar a tentar resolver alguns problemas e verificar se a solução quântica se sobressai à versão clássica.
Durante as leituras e os testes, algumas ideias vieram à minha cabeça, as quais foram:

- Explorador de arquivos
- Conversor de milhas para Km
- Torres de Hanoi

1.2.1. Conversor de milhas para Km

Como um primeiro experimento, foram feitos alguns testes para a transformação de milhas para Km.
Uma das maneiras de fazer isso é tentar aproximar usando a sequência de fibonacci. Como já temos o algoritmo para fazer isso, só precisamos encontrar os relativos para os valores de milhas e km.

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \ldots$$

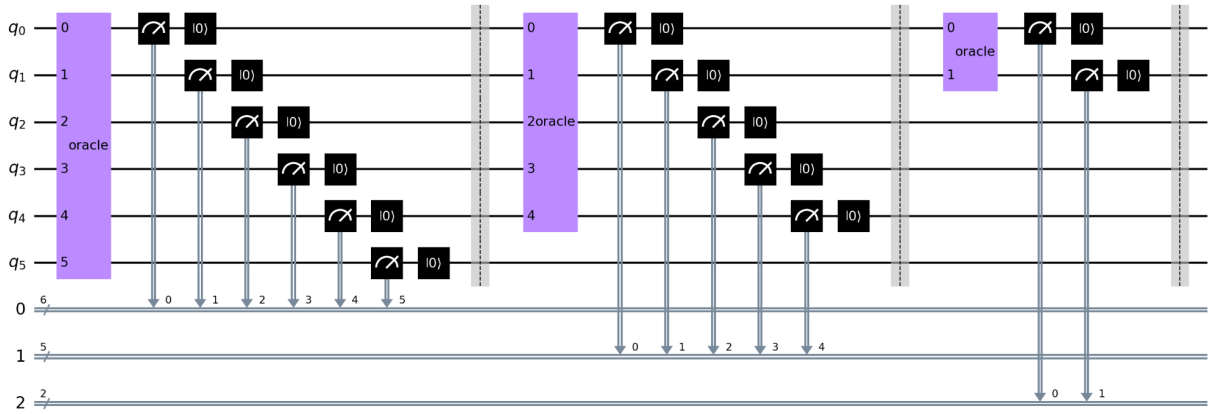
Para transformar milhas em Km, basta pegar um número da sequência (valor em milhas) e o seu sucessor será o relativo em Km.
Contudo, utilizando essa abordagem estamos limitados aos valores da sequência, para resolver isso, podemos quebrar o valor de milhas em pedaços que estão na sequência, por exemplo:

$$22 \text{ milhas} \rightarrow 21 \text{ milhas} + 1 \text{ milha} \rightarrow 34 \text{ km} + 1 \text{ km} \sim 35 \text{ km}$$

Transformação exata de milhas para Km

Com isso em mente, podemos começar a fazer a implementação. No entanto, para o circuito precisamos saber qual a quantidade de *qubits* necessário para rodar o algoritmo, além disso precisamos também saber qual o número de *qubits* para cada pedaço do número final. Sendo assim, foi necessário fazer um algoritmo clássico para pré-processar a entrada e então quebrar o valor em pedaços.

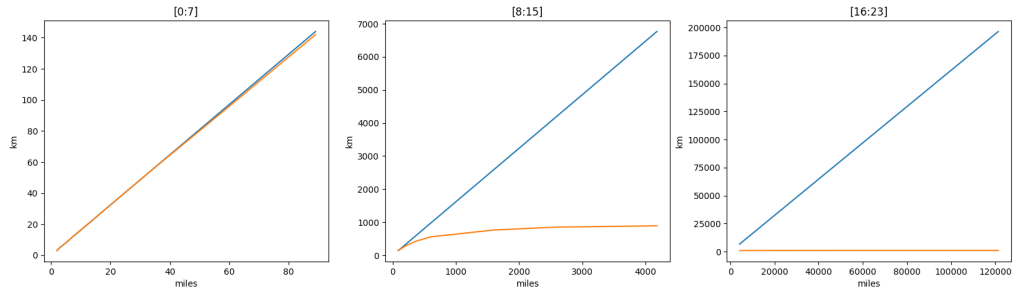
Algoritmo criado para converter 100 milhas para Km



Após executar o algoritmo, é necessário pegar o resultados e multiplicar pela quantidade de vezes que cada um deveria ser adicionado ao circuito, além de adicionar também o resto dos valores 1 e 2 que não podiam ser calculados usando esse algoritmo, e então chegamos ao valor muito próximo ao correto no final.
Há a possibilidade de colocar os *oracles* múltiplas vezes, mas isso acaba crescendo muito o circuito e há uma maior taxa de erros.

Com esse teste realizado, é possível ver que esse método possui vários problemas, como a indisponibilidade do número 1 e 2, a dificuldade em ler o resultado (uma vez que é baseado em contar a quantidade de valores diferentes após n medições) e também a imprecisão, sendo necessários muitos rodadas de execução para ter melhores resultados.

Discrepância entre os valores resultantes do algoritmo clássico e quântico



Pela imagem acima é possível ver que para valores pequenos (gráfico mais à esquerda) os valores clássicos e quânticos se aproximam muito, mas a partir de quantidades maiores há uma diferença considerável.
Sendo assim, além de pré-processamento, esse algoritmo também precisa de pós-processamento utilizando computadores clássicos, além de levar muito mais tempo para executar do que utilizando um computador convencional com a técnica de memoization.

Obs: a execução em simuladores e os computadores da IBM acaba dependendo muito de valores externos, como uso de CPU antes e durante a execução, temperatura externa, error mitigation, etc.

Sendo assim, esse método não se demonstra melhor do que as versões clássicas.
Contudo, ainda pode haver uma possibilidade de implementar essa solução usando encoding de matrizes e utilizando o dot product, operação da qual é embutida em circuitos quânticos.
Ainda não consegui pensar em como encodar isso corretamente, mas já está em mente para passos futuros/pesquisas futuras.

2. Conclusão

A partir do que foi exposto, pode se ver que o projeto está sendo encaminhado para um passo além, já possuindo implementações concretas com dados, estando no estágio de desenvolvimento.

2.1. Visão do projeto

Com a primeira implementação criada, é possível ver que nem tudo é praticável no mundo da computação quântica. Sendo assim, é necessário visar problemas que possuam algum tipo de relação íntima com a álgebra linear, ou que possam tomar proveito de efeitos quânticos.

2.2. Próximos passos

Para passos futuros, espera-se mais implementações e teste de outras técnicas envolvendo oracles e encoding.
Minha visão para o próximo teste é tentar implementar o explorador de arquivos, mas isso pode depender dos próximos artigos lidos.
Além disso, espero testar outros *frameworks*, além do *qiskit*, para facilitar alguns processos. Esses frameworks são: *Qutip* e *PennyLane.*