

Subprojeto de Iniciação Científica – Piic/UFES

Edital:	Edital Piic 2024/2025
Título do Projeto:	Computação Quântica: teoria e aplicações
Título do Subprojeto:	Computação Quântica Aplicada a Problemas de Otimização
Candidato a Orientador:	Lúcio Souza Fassarella
Candidato a Bolsista:	Thierry Martins Ribeiro
Membros da Equipe do Projeto:	Lúcio Souza Fassarella, Thierry Martins Ribeiro.

Resumo

Pesquisa de natureza aplicada, abordagem qualitativa e objetivo exploratório visando desenvolver aplicações da computação quântica em problemas de otimização. Os objetivos específicos são: (1) implementar aplicações do algoritmo quântico QAOA em problemas de otimização elementares e comparar seu desempenho frente a abordagens clássicas; e (2) elaborar aplicações da computação quântica para problemas de otimização classicamente intratáveis, com eventual implementação dentro dos limites dos computadores quânticos disponíveis. A metodologia da pesquisa consiste no estudo da literatura pertinente e investigação de problemas específicos, com elaboração e programação de algoritmos no SDK *Qiskit* e execução nos computadores quânticos disponíveis gratuita e remotamente na plataforma IBM. Os dados da pesquisa consistem de problemas de otimização a serem selecionados da literatura ou elaborados para fins de experimentação computacional. Os resultados esperados da pesquisa são: (1) a identificação de classes de problemas de otimização que podem ser eficientemente resolvidos pela computação quântica em comparação com abordagens clássicas; e (2) protocolos padronizados para o desenvolvimento de algoritmos quânticos para resolução de classes específicas de problemas de otimização.

Palavras-chave: Algoritmos quânticos. Otimização Combinatória. Algoritmo de Otimização Quântica Aproximada (QAOA).

1 Introdução

A Computação Quântica é uma área de pesquisa, inovação e aplicações que combina contribuições da matemática, física e computação. Teve seu início na década de 1980 a partir do reconhecimento da necessidade de usarmos a Mecânica Quântica para simularmos eficientemente sistemas quânticos (FEYNMAN, 1982), passou por diversos desenvolvimentos, como a formulação em 1985 do conceito de computador quântico universal e a demonstração de que um computador quântico poderia simular qualquer processo físico de forma eficiente (DEUTSCH, 1985), e hoje está na chamada *era quântica de escala intermediária ruidosa* (*noisy intermediate-scale quantum era – NISQ*), caracterizada por computadores quânticos operacionais, mas que possuem limitações na fidelidade e escalabilidade.

A década de 2010 testemunhou um aumento no interesse e investimento na computação quântica, com o surgimento de pequenas empresas inovadoras, iniciativas governamentais e colaborações entre a academia e a indústria. Em 2019, a empresa Google afirmou ter alcançado a *supremacia quântica*, ou seja, a situação em que os computadores quânticos são capazes de resolver algumas tarefas mais rapidamente do que os computadores clássicos mais poderosos que existem – feito alegadamente alcançado pelo processador quântico Sycamore na resolução de um problema especializado (ARUTE *et al.*, 2019).

Informalmente, podemos dizer que os computadores quânticos são caracterizados pela natureza quântica da informação que processam, nos permitindo executar algoritmos que utilizam os efeitos quânticos de *superposição*, *emaranhamento* e *interferência*. Há diversos modelos teóricos de computação quântica, que podem ser empregados na simulação de sistemas e resolução de problemas matemáticos: computação quântica digital (modelo de circuito), computação quântica adiabática, computação quântica de estado de cluster, computação quântica holonômica e computação quântica topológica (BULUTA & NORI, 2009; BERNAL, 2021). No caso da computação quântica digital, sua performance superior aos computadores clássicos na resolução de alguns problemas advém do fenômeno chamado *paralelismo quântico*, *viz.*, a possibilidade de uma porta quântica afetar simultaneamente vários estados quânticos em superposição (MERMIM, 2007; RIEFFEL & POLAK, 2011).

A pesquisa em Computação Quântica pode ocorrer em três níveis: desenvolvimento de computadores quânticos (hardware), desenvolvimento de algoritmos quânticos (software) e desenvolvimento de aplicações. Este projeto foca as aplicações da computação quântica na resolução de problemas de otimização, considerando a possibilidade de realizar implementações em computadores quânticos acessíveis gratuita e remotamente em plataformas disponíveis na Internet.

A computação quântica pode oferecer uma vantagem em comparação com a computação clássica no tratamento de problemas de otimização cujo espaço das soluções possíveis é muito grande, sendo uma promessa para a abordagem de problemas difundidos em vários campos, desde logística e finanças até ciência de materiais e aprendizagem de máquina. Nesse âmbito, cabe destacar os problemas do tipo *otimização combinatória* por geralmente pertencerem à classe de complexidade NP, sendo classicamente intratáveis (BLEKOS *et al.*, 2024).

No campo da otimização quântica, destacam-se os algoritmos híbridos quântico-clássicos chamados *Solucionador Quântico Variacional* (*Variational Quantum Eigensolver* – VQE) e *Algoritmo de Otimização Aproximada Quântica* (*Quantum Approximate Optimization Algorithm* – QAOA). O algoritmo VQE tem por objetivo determinar a energia do estado fundamental de dado sistema quântico, sendo aplicado para resolver um problema de otimização mediante o mapeamento dos parâmetros do problema em um hamiltoniano cujo estado fundamental corresponde à solução procurada. Já no caso do algoritmo QAOA, a função objetivo de um problema de otimização é codificada em um estado quântico, normalmente usando um circuito quântico parametrizado; o estado quântico é preparado em um computador quântico e são feitas medições para estimar o valor esperado da função objetivo; então, técnicas clássicas de otimização são usadas para ajustar os parâmetros do circuito quântico de forma a maximizar ou minimizar a função objetivo. Cabe destacar que os algoritmos

VQE e QAOA são genéricos, no sentido de que aplicações em casos específicos requerem análises e adaptações não triviais.

Algoritmos quânticos podem ser implementados na plataforma da IBM¹ e D-wave², entre outras. A plataforma IBM oferece acesso gratuito e remoto a diversos recursos, embora com limitações em comparação com o acesso pago. Algoritmos quânticos para execução nos computadores quânticos da IBM podem ser programados no *kit de desenvolvimento de software* (SDK) *Qiskit*³ e implementados via plataforma *Colab*⁴. O Colab é um serviço hospedado do *Jupyter Notebook* disponibilizado pelo *Google* que fornece acesso gratuito a recursos de computação, enquanto o Qiskit é um pacote de ferramentas de código aberto na linguagem Python bastante versátil para elaboração e execução de circuitos quânticos (IBM, [s.d.]).

2 Objetivos

O objetivo geral deste projeto de pesquisa é desenvolver aplicações da computação quântica em problemas de otimização. Os objetivos específicos são:

- 1) Implementar aplicações do algoritmo quântico QAOA em problemas de otimização elementares e comparar seu desempenho frente a abordagens clássicas.
- 2) Elaborar aplicações da computação quântica para problemas de otimização classicamente intratáveis, com eventual implementação dentro dos limites dos computadores quânticos disponíveis.

3 Metodologia

A pesquisa tem natureza aplicada, abordagem qualitativa e objetivo exploratório. Quanto aos procedimentos, consistem do estudo de literatura pertinente combinada com a investigação de problemas específicos.

Os dados da pesquisa são problemas de otimização a serem selecionados da literatura ou elaborados para fins de experimentação computacional. Os problemas selecionados serão investigados para resolução via computação quântica, o que inclui três ações:

- desenvolvimento de algoritmos quânticos;
- programação e execução dos algoritmos desenvolvidos;
- análise de desempenho desses algoritmos.

Os resultados esperados da pesquisa são essencialmente dois:

- Identificação de classes de problemas de otimização que podem ser eficientemente resolvidos pela computação quântica em comparação com abordagens clássicas;
- Protocolos padronizados para o desenvolvimento de algoritmos quânticos para resolução de classes específicas de problemas de otimização.

1 <https://quantum.ibm.com/>

2 <https://www.dwavesys/>.

3 <https://www.ibm.com/quantum/qiskit>.

4 <https://colab.google/>.

Referências básicas para o estudo da computação quântica, do algoritmo QAOA e da programação de algoritmos quânticos no Qiskit são: (RIEFFEL; POLAK, 2011), (HIDARY, 2021), (LOREDO, 2020), (BERNAL; TAYUR; VENTIRELLI, 2021), (BLEKOS *et al.*, 2024). Naturalmente, o estudo da literatura deve ampliar o conjunto de referências pela identificação de trabalhos relevantes, obtidos a partir de indicações na bibliografia básica ou buscas na Internet.

4 Plano de Trabalho / Cronograma

Quadro 1 – Lista de atividades previstas do Subprojeto

a) CQ – estudo introdutório à Computação Quântica
b) Qiskit – estudo introdutório à programação no Qiskit
c) QAOA – estudo do algoritmo QAOA
d) Problemas – seleção e elaboração de problemas de otimização
e) Algoritmos – desenvolvimento de algoritmos para resolução de problemas de otimização
f) Programação – resolução de problemas de otimização com o algoritmo QAOA
g) Relatório Parcial
h) Relatório Final

Fonte: Produção do próprio autor.

Esclarecemos que as atividades (a), (b) e (c) serão desenvolvidas simultaneamente, mas o cronograma estabelece a ordem em que devem ser iniciadas. As atividades (d), (e) e (f) também serão desenvolvidas simultaneamente e todas elas envolvem o levantamento de literatura pertinente.

Quadro 2 – Cronograma de atividades previstas do Subprojeto (set./2024 a ago./2025)

Atividade	set.	out.	nov.	dez.	jan.	fev.	mar.	abr.	maio	jun.	jul.	ago.
a) CQ	X	X	X	X	X							
b) Qiskit		X	X	X	X							
c) QAOA			X	X	X							
d) Problemas						X	X	X	X	X	X	
e) Algoritmos						X	X	X	X	X	X	
f) Programação						X	X	X	X	X	X	
g) Relat. Parcial						X						
h) Relat. Final												X

Fonte: Produção do próprio autor.

Referências

- ARUTE, F. *et al.* Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. **Nature**, n.574, p.505–510, 2019. DOI: 10.1038/s41586-019-1666-5.
- BULUTA, I.; NORI, F. Quantum simulators. **Science**, v.326, i.5949, p.108–111, 2009. DOI: 10.1126/science.1177838.
- BERNAL, D.; TAYUR, S.; VENTIRELLI, D. **Quantum Integer Programming (QuIP) 47-779**: Lecture notes, 2021. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2012.11382>. Acesso em: 10 mai. 2024.
- BLEKOS, Kostas; BRAND, Dean; CESCHINI, Andrea; CHOU, Chiao-Hui; LI, Rui-Hao; PANDYA, Komal; SUMMER, Alessandro. A review on Quantum Approximate Optimization Algorithm and its variants. **Physics Reports**, vol. 1068, p.1-66, 2024. Doi:10.1016/j.physrep.2024.03.002.
- HARROW, A.W.; HASIDIM, A.; LLOYD, S. Quantum algorithm for linear systems of equations. **Phys. Rev. Lett.**, v.103, p.150502, Oct 2009.
- HIDARY, J.D. **Quantum Computing**: an applied approach - 2nd. ed. Cham, Switzerland: Springer, 2021.
- IBM. **Qiskit**. [s.d.]. Disponível em: <https://www.ibm.com/quantum/qiskit>. Acesso em: 20 mai. 2024.
- LOREDO, Robert. **Quantum Computing with Python and IBM Quantum Experience**: A hands-on introduction to quantum computing and writing your own quantum programs with Python. Birmigham: Packt Publishing, 2020.
- MERMIM, N.D. **Quantum Computer Science**: An Introduction. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.
- PERUZZO, A. et al. A variational eigenvalue solver on a quantum processor. **Nature Communications**, v.5, n.4213, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms5213>. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1304.3061>. Acesso em: 10 mai. 2024.
- RIEFFEL, E.; POLAK, W.H. **Quantum Computing**: A Gentle Introduction. Massachusetts: MIT Press, 2011.