

Proyecto final

Red Neuronal Cuántica (QNN)

Eduardo Solano Jaime

Paulina Barba Mendoza

Cómputo cuántico

Postulados

Tal como el cómputo clásico se describe y analiza con álgebra booleana clásica, el cómputo cuántico se razona con mecánica cuántica (qué es solo un lenguaje matemático). Y este tiene cuatro postulados:

1. La definición del bit cuántico (qubit)
2. La transformación (evolución) de qubits
3. Efecto de la medición
4. Sistemas de múltiples qubits

Postulado 1: Qubit

Todo sistema físico aislado tiene asociado a sí mismo un espacio vectorial complejo normalizado perteneciente al espacio de Hilbert conocido como *vector de estado*.

Este vector estado se puede representar de dos formas que son un espacio vectorial dual:

- Ket:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \langle \psi | \\ u_2 \langle \psi | \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- Bra:

$$\langle \psi | = (C_1^*, C_2^*, \dots) = (\langle \psi | u_1 \rangle, \langle \psi | u_2 \rangle, \dots)$$

Nota -> Estos espacios son solo descripciones, no formas concretas. Por lo que todos los kets de la forma $e^{i\theta} |\psi\rangle$ representan al mismo estado vectorial para todo θ

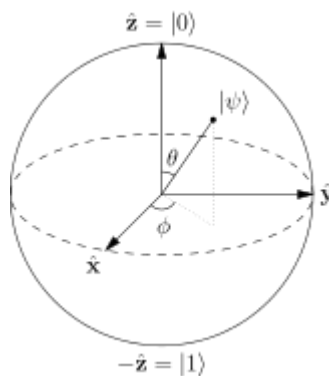
Por la definición del qubit, $|\psi\rangle$ debe ser un vector unitario por lo que su producto escalar es la unidad $\langle \psi | \psi \rangle = 1 \therefore |a|^2 + |b|^2 = 1$ dado $a, b \in \mathbb{C}$. (esto es relevante para comprender el poder de transformar problemas al espacio cuántico, pues describe la **superposición**). Así el qubit se define como un sistema de dos vectores estado: $|\psi\rangle = a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle$

Y para simplificar $\langle\phi_1| = \langle 0|$ y $\langle\phi_2| = \langle 1|$ representando *upspin* y *downspin* respectivamente. Aunque realmente sea una abstracción del fenómeno físico entre la propiedad del espín y la lógica de la mecánica cuántica (como pasa con el voltaje positivo y negativo en la lógica booleana).

De una manera más elegante, podemos representar el qubit en coordenadas polares, transformando el espacio vectorial en una **esfera de Bloch**. Terminando con un vector

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

Donde θ es el ángulo entre el eje Z y Y, y ϕ es el ángulo entre X y Y. Esto facilita la interpretación de algunas compuertas lógicas.



Postulado 2: Evolución de qubits

La transformación de un sistema cuántico cerrado del tiempo t_1 al tiempo t_2 se describe con una transformación unitaria

Un estado $|\psi\rangle$ del sistema en t_1 está relacionado con el estado $|\psi'\rangle$ en el tiempo t_2 por un operador unitario U que depende solo de t_1 y t_2 . Se puede ver con una "función" para simplificar: $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$

La transformación U (tristemente) ocurre independientemente del estado de $|\psi\rangle$.

Ejemplo:

$$|\psi\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle = |0\rangle$$

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad U|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Teniendo en cuenta que U debe ser unitaria: $UU^\dagger = I$

Postulado 3: Medición

Las mediciones cuánticas se describen como la colección $\{M_m\}$ de operadores de medición operando en el estado de espacio del sistema. El subíndice m se refiere a los posibles resultados del experimento

Si el estado de un sistema cuántico es $|\psi\rangle$ justo antes de ser medido, entonces la probabilidad de m se da por $p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$ [1] y el sistema de estado después de la medición es

$$\frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} \quad [2]$$

Siempre y cuando los operadores de medición cumplan con

$$\sum_m \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle = I$$

expresando así que la suma de las probabilidades del sistema es la unidad.

Los operadores de medición más importantes son $M_0 = |0\rangle\langle 0|$ y $M_1 = |1\rangle\langle 1|$, es decir

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad M_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Postulado 4: Sistemas de multiples qubits

El estado de espacio de un sistema físico cuántico compuesto es el producto tensorial de los sistemas independientes

Esta no es una prueba de la existencia del sistema, sino una descripción de este. El producto tensorial captura la esencia de la superposición en sistemas cuánticos.

Teniendo $|\psi_1\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ y $|\psi_2\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle$, el sistema compuesto se describe como:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle &= |\psi_1\psi_2\rangle = a \cdot c|0\rangle|0\rangle + a \cdot d|0\rangle|1\rangle + b \cdot c|1\rangle|0\rangle + b \cdot d|1\rangle|1\rangle \\ &= ac|00\rangle + ad|010\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle \end{aligned}$$

Compuertas lógicas cuánticas (1 qubit)

Antes de continuar, es necesario mencionar las principales compuertas lógicas (operadores) fundamentales para construir circuitos cuánticos y realizar operaciones sobre qubits en computación cuántica. Estas permiten manipular estados de qubits de forma controlada y determinista. Algunas de las puertas más fundamentales son:

- **Identidad:** Mantiene el estado. Su matriz es la matriz identidad $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- **Puerta Hadamard (H):** Esta puerta coloca un qubit en una superposición de los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- **Compuerta X de Pauli (NOT):** Similar a la puerta clásica NOT, invierte el estado del qubit. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
- **Compuerta Y de Pauli:** Una combinación de las puertas Z y X, aplicando una fase y una inversión. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
- **Compuerta Z de Pauli:** Aplica un cambio de fase al qubit. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
- **Puerta de fase (σ o S):** Agrega una fase de $\frac{\pi}{2}$. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
- **Puerta T:** Aplica una fase de $\frac{\pi}{4}$. Su matriz es: $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{bmatrix}$

Entrelazamiento

Es una propiedad intrínseca de los sistemas cuánticos compuestos y se usa en nuestro favor en el cómputo cuántico. Este afirma que los estados cuánticos del sistema deben de ser descritos mediante un solo estado, aun cuando físicamente los estados no estén juntos. La propiedad, en resumen, nos impide descomponer un sistema compuesto en los sistemas de los componentes.

Se explica mejor con un ejemplo al crear y destruir un EPR (un par de qubits en nombre a Einstein-Podolsky-Rosen):

Teniendo un qubit $|\psi_1\rangle$ en estado $|0\rangle$ y un operador de Hadamard:

$$U = H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Tenemos entonces $|\psi'_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

Y un espacio estado conjunto con otro qubit inicial idéntico sería

$$|\psi'_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} + 0|01\rangle + 0|11\rangle$$

Ahora definimos la transformación unitaria (importante **compuerta lógica** cuántica):

$$CNot = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Así, aplicando el **CNot** a nuestro sistema de dos qubits (y omitiendo el desarrollo) tenemos que podemos describir el sistema entrelazado de la forma

$$CNot|\psi'_1\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Lo extraño de este fenómeno es que la superposición de los qubits entrelazados queda entrelazada de igualmente. Es decir, que al medir un qubit del sistema después de aplicar el CNot, se afecta la amplitud de probabilidad del otro qubit. Esto se puede demostrar de forma matemática (Oskin, M. (2023). *Quantum Mechanics*) aplicando las fórmulas ^[1] y ^[2] antes y después de aplicar el CNot.

Operadores comunes para un sistema de 2 qubits

Para un sistema de 2 qubits, además de las compuertas cuánticas individuales, existen operadores importantes que actúan sobre ambos qubits a la vez. Algunos de los operadores más importantes son:

- **Operador de identidad (I):** Este operador deja los estados de los qubits sin cambios. Para un sistema de 2 qubits, la matriz del operador de identidad es

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- **Operador de control-NOT (CNOT):** Este previamente mencionado operador aplica una compuerta NOT controlada por otro qubit. La matriz del operador CNOT es:

$$CNot = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

- **Operador de intercambio (SWAP):** Este operador intercambia los estados de dos qubits. Para un sistema de 2 qubits, la matriz del operador SWAP es:

$$Swap = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- **Operador de superposición (S):** Este operador se utiliza para crear superposiciones de estados de qubits. Para un sistema de 2 qubits, la matriz del operador S es:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Otras propiedades

Existen otras propiedades intrínsecas de la mecánica cuántica que son tanto útiles como perjudiciales para el rendimiento de los circuitos cuánticos. Tales son la teleportación y la encodificación super densa (que ayudan a este avance tecnológico), y la decoherencia (que brinda pérdida de reversibilidad en los circuitos).

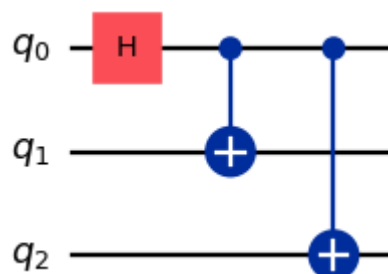
Si bien, todos ellos son temas fascinantes e increíblemente complejos, están fuera del alcance de esta pequeña introducción y de las necesidades del proyecto.

Circuitos Cuánticos

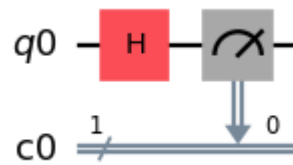
Conociendo las bases de la mecánica cuántica podemos ver el elemento fundamental del cómputo cuántico: los circuitos cuánticos.

Podemos definir los circuitos como rutinas de operaciones cuánticas coherentes en información cuántica (qubits). Se compone de compuertas, mediciones, y resets acomodados de forma secuencial.

En el siguiente ejemplo podemos ver el estado $|\psi\rangle = \frac{|000\rangle + |111\rangle}{\sqrt{2}}$, como un sistema de 3 qubits donde el primero es puesto en superposición por la compuerta de Hadamard y es posteriormente entrelazado a los otros dos qubits con compuertas CNot:



Para colapsar las probabilidades de los circuitos, usamos la propiedad de medición, que se representa de la siguiente manera (q_0 es un qubit y c_0 un bit clásico):



Algoritmos variacionales

Para mejorar los dispositivos NISQ¹ se llevó a la creación de los VQA que adoptan el modelo de las redes neuronales para encontrar los parámetros ideales para minimizar/maximizar la función objetivo del circuito cuántico y poder así competir con computadoras clásicas. Funcionan con 4 puntos clave:

1. Estructura de circuito cuántico: el comportamiento del algoritmo se describe con la construcción del circuito cuántico usando las compuertas previamente mencionadas.
2. Parametrización de compuertas: Se usan parámetros numéricos para controlar el comportamiento de las compuertas. Un circuito parametrizado se conoce como **Anzats**.
3. Optimización: Para maximizar/minimizar la función objetivo se trata el circuito variacional como una función clásica y se usa optimización clásica para ajustar los parámetros.
4. Retroalimentación cuántica-clásica: La computadora clásica evalúa la función (la medición al final del circuito) y actualiza los parámetros.

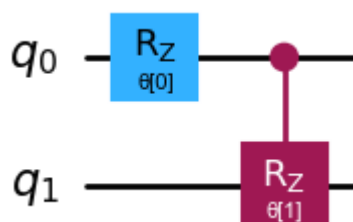
¹: Cuántica de escala intermedia ruidosa son los dispositivos no tan avanzados para resistir fallos ni tan grandes como para alcanzar la supremacía cuántica (usar cómputo cuántico para solucionar problemas que las computadoras clásicas no pueden)

Ansatz

Un circuito parametrizado se conoce como **Anzats**. Es decir, circuitos donde sus compuertas son definidas mediante parámetros tuneables. La forma más sencilla de parametrizar es rotando los qubits en el eje Z de la esfera de Bloch usando la compuerta de rotación Z

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix}$$

Donde puede haber una θ por cada compuerta a parametrizar, es decir, un vector de valores de rotación (θ) con los cuales el algoritmo de optimización puede realizar operaciones de ML o NN clásicas para resolver el circuito cuántico. Se parametriza, por ejemplo, de la siguiente manera. Aunque hay más formas y más complejas.



Métodos de parametrización

Generalmente se usa un solo método de parametrización: el circuito de expresión de Pauli. Este método usa las compuertas de Pauli y el entrelazamiento de todos los qubits del sistema. Este método se usa en su forma básica:

$$U_{\phi(x)} = \exp\left(i \sum_{s \in I} \phi_s(x) \prod_{i \in S} P_i\right)$$

Su desarrollo matemático y explicación a profundidad no entra en el alcance de esta investigación, sin embargo, es importante recalcar que este método puede ser utilizado forzando solo el uso de compuertas Y o Z de Pauli, causando efectos conocidos como Interacciones Y, Z, y ZZ.

Codificación de información clásica

A menos que nuestro problema sea cuántico por naturaleza, generalmente tenemos que transformar información clásica (bits) a información cuántica (qubits). Esto se realiza con la codificación de información o mejor conocida como **Feature Mapping**.

Teniendo N features y M registros en nuestro dataset $X = \{x^1, \dots, x^M\}$ donde $x \in \mathbb{N}^N$, existen numerosas formas de *traducir* la información a qubit:

- Básico: asociar un bitstring a un estado cuántico de longitud N a cada feature. Es decir, si un registro $x = 6$, podemos mapear el dato a su representación binaria 110_2 y convertirlo en un estado $|110\rangle$.
- De ángulo: codificar los valores de un registro como rotaciones de n qubits (siempre que $N \leq n$). Por lo que $|X\rangle = \bigoplus_{i=1}^N \cos(x_i)|0\rangle + \sin(x_i)|1\rangle$
- Otro método popular es Pauli Two Design, que alterna capas de rotación y de entrelazamiento con una capa inicial $\sqrt{H} = R_Y\left(\frac{\pi}{4}\right)$ y las capas de rotación consisten en compuertas de Pauli elegidas de forma aleatoria uniformemente.

Bibliografía

Oskin, M. (2023). Quantum Computing - Lecture Notes. Department of Computer Science and Engineering, University of Washington.

Ekert, P. (2021). Introduction to Quantum Information Science [Playlist de YouTube]. Recuperado de <https://www.youtube.com/playlist?list=PLkespgaZN4gmu0nWNmfMfIVRqw0VPkCGH>. Visitado el 1^{ro} de abril de 2024.

IBM Quantum. (n.d.). Qiskit: Open-source quantum computing software development framework for quantum physicists and researchers. Recuperado de <https://docs.quantum.ibm.com/api/qiskit/circuit> el 3 de abril de 2024.

Quantum Computing Group, IIT Roorkee. (2023). Variational Quantum Algorithms. Recuperado de <https://medium.com/@qcgitr/variational-quantum-algorithms-66367053a2f3> el 3 de abril de 2024.

Qiskit Ecosystem. Qiskit Machine Learning 0.7.2. IBM 2017 (2024). Recuperado de <https://qiskit-community.github.io/qiskit-machine-learning/index.html> el 5 de abril del 2024.