



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

Algoritmos Quânticos Híbridos e o Problema do Caixeiro Viajante

Gabriel Krzyzanowski

**Foz do Iguaçu
2023**



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

Algoritmos Quânticos Híbridos e o Problema do Caixeiro Viajante

Gabriel Krzyzanowski

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

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Bloot

Foz do Iguaçu
2023

GABRIEL KRZYZANOWSKI

**ALGORITMOS QUÂNTICOS HÍBRIDOS E O PROBLEMA DO CAIXEIRO
VIAJANTE**

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

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Bloot

Aprovado pela banca examinadora em: 13/06/2023

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

Prof. Dr. Emidio Santos Portilho Junior - UNIOESTE
Membro titular

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

AGRADECIMENTOS

Por mais solitária que seja sua caminhada, sempre existirão aqueles que estarão ao teu lado. E como uma vela acesa em uma estrada escura, projetarão a luz que lhe indicará o caminho a ser seguido. Sem estes, não estaria aqui. Então faço dessa página uma oportunidade para que saibam o quanto importante foram para mim.

Inicialmente agradeço ao meu orientador Professor Dr. Rodrigo Bloot, que em todo o trajeto do presente trabalho esteve sempre disponível. Desde o início do curso foi para mim um professor memorável, instigando sempre em todos seus alunos a curiosidade, a fome pelo conhecimento, e nos mostrando de maneira emblemática a beleza da matemática. Não tenho dúvidas que seu incrível trabalho teve impacto enorme em minha formação.

Agradeço ao Professor Dr. Raphael Fortes e ao colega de curso Anton pelas discussões do grupo. Suas figuras serviram-me de muita inspiração. Professor Raphael, sempre com muita dedicação e afinco, à frente da coordenação do curso e na participação do grupo de pesquisa, mostrou muita paixão pelo que fazia. Junto com o professor Rodrigo, me auxiliou nos estudos iniciais desta incrível área da computação quântica, os mesmos que resultaram no presente trabalho.

Agradeço à minha família por todo o suporte. Sempre se fizeram presentes, me dando o apoio necessário para cumprir essa jornada. Agradeço também a todos os meus amigos e colegas de curso. Em especial à Luanna e aos meus amigos de Engenharia Química, que me ajudaram a passar por tempos difíceis: o suporte de vocês foi essencial.

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

Por último, não poderia deixar de agradecer meus melhores amigos, Barbára e Marhlon. Desde o início dessa caminhada estivemos juntos, compartilhando vários momentos felizes e nos apoiando quando necessário. Apesar do fato de nossos caminhos terem divergido, continuarei ao lado de ambos independentemente do que aconteça, porque amizades como essas não podem ser perdidas.

Le vent se lève!... Il faut tenter de vivre!
Paul Valéry

Krzyzanowski, Gabriel. **Algoritmos Quânticos Híbridos e o Problema do Caixeiro Viajante**.64 páginas. 2023.Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu.

Resumo

Problemas de otimização são de grande interesse na indústria e na academia, em especial o problema do Caixeiro Viajante. Este é um famoso problema NP-hard que desafia algoritmos na busca de uma solução eficaz e eficiente. O uso de computadores quânticos para encontrar soluções de tais problemas apresenta-se como uma possível alternativa para o futuro. No presente trabalho, utilizamos dois algoritmos quânticos variacionais bem estabelecidos na literatura para resolver instâncias simples do problema do Caixeiro Viajante. Com a motivação de se realizar uma prova de conceito, obtivemos resultados que demonstram a viabilidade do método, quando comparados com o *benchmark* clássico representado pelo método Simplex. Apesar dos possíveis gargalos nas aplicações de problemas em escala, nossos experimentos demonstraram resultados que nos encorajam a aprofundar as pesquisas neste campo.

Palavras chave: Algoritmos Quânticos Variacionais, Otimização Combinatória.

Krzyzanowski, Gabriel. **Hybrid Quantum Algorithms and the Traveling Salesman Problem.** 64 pages. 2023. Final Project (Undergraduate in Physical Engineering) - Federal University for Latin American Integration, Foz do Iguaçu.

Abstract

Optimization problems are of great interest in both industry and academia, especially the Traveling Salesman Problem. This is a famous NP-hard problem that challenges algorithms in the search for an effective and efficient solution. The use of quantum computers to find solutions for such problems presents itself as a possible alternative for the future. In this present work, we utilized two well-established variational quantum algorithms from the literature to solve simple instances of the Traveling Salesman Problem. With the motivation of conducting a proof of concept, we obtained results that demonstrate the viability of the method when compared to the classical benchmark represented by the Simplex method. Despite potential bottlenecks in large-scale problem applications, our experiments showed promising results that encourage us to further research in this field.

Keywords Variational Quantum Algorithms, Combinatorial Optimization.

Krzyzanowski, Gabriel. **Algoritmos cuánticos híbridos y el problema del viajante de comercio.** 64 páginas. 2023. Trabajo de finalización de curso (Graduación en Ingeniería Física) - Universidad Federal para la Integración Latinoamericana, Foz do Iguaçu.

Resumen

Los problemas de optimización son de gran interés tanto en la industria como en la academia, especialmente el Problema del Viajante. Este es un famoso problema NP-hard que desafía a los algoritmos en la búsqueda de una solución efectiva y eficiente. El uso de computadoras cuánticas para encontrar soluciones a este tipo de problemas se presenta como una posible alternativa para el futuro. En este trabajo, utilizamos dos algoritmos cuánticos variacionales bien establecidos en la literatura para resolver instancias simples del Problema del Viajante. Con la motivación de realizar una prueba de concepto, obtuvimos resultados que demuestran la viabilidad del método, en comparación con el benchmark clásico representado por el método Simplex. A pesar de posibles obstáculos en la aplicación de problemas a gran escala, nuestros experimentos mostraron resultados prometedores que nos animan a profundizar en la investigación en este campo.

Palavras chave: Algoritmos Cuánticos Variacionales, Optimización Combinatoria.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | | |
|----|--|----|
| 1 | Representação abstrata de um qubit através da Esfera de Bloch. Podemos encarar o vetor $ \psi\rangle$ como uma função de onda descrevendo o estado do qubit. | 16 |
| 2 | Ilustração de possíveis medidas de pares de qubits. Neste caso podemos fazer uma analogia com lançamentos de moedas e suas possibilidades de medida. | 17 |
| 3 | Atuação de três operadores (f, g, h) em 4 qubits junto com a atuação de portas Hadamard nos mesmos. | 20 |
| 4 | Medida em um computador quântico. | 22 |
| 5 | Atuação de gates Hadamard na base computacional $ 0\rangle^{\otimes n}$ e atuação de transformação unitária U_f na base $ 0\rangle^{\otimes n} 0\rangle^{\otimes m}$ | 24 |
| 6 | Estrutura geral de um algoritmo quântico variacional. | 26 |
| 7 | Diagrama esquemático do VQE. | 30 |
| 8 | Diagrama Esquemático do QAOA Para o Problema do Corte Máximo. (a) Representação do circuito quântico que implementa o QAOA tendo H_C como função objetivo codificando o Hamiltoniano do problema. (b) Problema do Corte Máximo em um grafo com 5 vértices, onde os vértices em azul formam o conjunto solução (note que as arestas w_{25} e w_{13} não participam da solução). | 34 |
| 9 | sTSP 4 cidades. | 37 |
| 10 | aTSP 4 cidades. | 39 |
| 11 | Círculo final QAOA. A configuração de portas lógicas é a mesma para ambas as instâncias, mudando apenas os ângulos de rotação aplicados. | 50 |
| 12 | Resultados obtidos utilizando o QAOA para instância ts_{01} . Podemos notar que o estado com maior probabilidade foi 011110 (indicado em vermelho), com valor da função custo avaliado em 64, que corresponde a configuração que minimiza a função objetivo da instância. . . | 51 |
| 13 | Resultados obtidos utilizando o QAOA para instância ts_{02} . Nessa instância, observamos um histograma com uma distribuição mais esparsa, e o estado correspondente a resposta correta do problema, 110011 (indicada em vermelho), com baixo valor de probabilidade, apesar da função custo chegar ao seu valor mínimo (no caso o valor 80). | 52 |
| 14 | Ansatz <i>TwoLocal</i> utilizado para as instâncias simétricas do TSP. Os elementos R_y são portas de rotação em torno do eixo y para os respectivos qubits. Já os elementos em azul são portas R_z controladas, que realizam uma rotação em torno do eixo z no qubit alvo caso o qubit de controle esteja no estado 1. | 52 |

| | | |
|----|---|----|
| 15 | Resultados obtidos com VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas. Esquerda: Histograma para instância ts_{01} . Direita: Histograma para instância ts_{02} . Em ambos os experimentos a rotina encontrou o autovalor correspondente ao estado fundamental igual ao valor mínimo da função custo correspondente à instância. | 53 |
| 16 | Ansatz variado. | 53 |
| 17 | Figura ilustrando os resultados do VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas utilizando o Ansatz variado. Histograma com a resposta do VQE para a instância ts_{01} . Aqui foram omitidas as strings pois o objetivo era apenas ilustrar os resultados esparsos. . . | 54 |
| 18 | Figura ilustrando os resultados do VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas utilizando o Ansatz variado. Histograma com a resposta para ts_{02} . Aqui também foram omitidas as strings pois o objetivo era apenas ilustrar os resultados esparsos. | 55 |
| 19 | Ansatz two-local, da Qiskit, para a instância ts_{03} . Percebe-se que a estrutura possui profundidade severa, resultando assim em uma convergência robusta para o resultado exato. | 56 |
| 20 | Resultado obtido aplicando o VQE, no simulador, para a instância não simétrica ts_{03} . Neste experimento, a rotina encontrou o autovalor correspondente ao estado fundamental igual ao valor mínimo da função custo correspondente à instância. No entanto, o resultado ilustrado no histograma abaixo corresponde ao estado obtido que não é o exato (esquerda). Para uma configuração com 48 parâmetros o tour mínimo também foi atingido com o histograma (a direita) contendo o estado correto (apresentado na Tabela 4). | 57 |

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 | 13 |
| 1.1 OBJETIVOS | 14 |
| 1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO | 14 |
| 2 FUNDAMENTOS DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA | 15 |
| 2.1 QUBITS E ESTADOS QUÂNTICOS | 15 |
| 2.2 OPERAÇÕES REVERSÍVEIS | 18 |
| 2.2.1 Diagramas de Circuito | 19 |
| 2.3 EMARANHAMENTO | 20 |
| 2.4 MEDIDAS EM UM COMPUTADOR QUÂNTICO | 21 |
| 2.4.1 Regra de Born | 22 |
| 2.4.2 Medidas em Bases Distintas | 23 |
| 2.4.3 Sobre Estatística e Valor Esperado | 23 |
| 2.5 PARALELISMO QUÂNTICO | 24 |
| 2.6 COMENTÁRIOS | 25 |
| 3 ALGORITMOS QUÂNTICOS VARIACIONAIS (VQAS) | 26 |
| 3.1 CONCEITOS BÁSICOS | 26 |
| 3.1.1 Princípio Variacional | 27 |
| 3.2 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER | 28 |
| 3.2.1 Quantum Expectation Extimation (QEE) | 28 |
| 3.2.2 Preparação de Estados e Medindo o Valor Esperado | 29 |
| 3.3 QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM | 30 |
| 3.3.1 Otimização Combinatória | 30 |
| 3.3.2 Operador Gamma e Operador de Mistura | 31 |
| 3.3.3 Função Custo e Estado Quântico Variacional | 32 |
| 3.3.4 Aplicação do QAOA no Problema de Corte Máximo | 32 |
| 3.4 COMENTÁRIOS | 33 |
| 4 PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE | 35 |
| 4.1 INTRODUÇÃO AO PROBLEMA | 35 |
| 4.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA SIMÉTRICO | 36 |
| 4.2.1 Exemplo | 36 |
| 4.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA NÃO SIMÉTRICO | 37 |
| 4.3.1 Exemplo | 38 |
| 4.4 COMPARAÇÃO COM O PROCEDIMENTO CLÁSSICO | 39 |
| 4.5 COMENTÁRIOS | 41 |
| 5 FORMULAÇÃO DO TIPO QUBO E HAMILTONIANO DE ISING | 42 |
| 5.1 FORMULAÇÃO POR MEIO DE QUBO | 42 |
| 5.1.1 QUBO Restrito para QUBO Irrestrito | 42 |
| 5.1.2 Formulação do problema simétrico como um QUBO | 43 |
| 5.1.3 Formulação do problema não simétrico como um QUBO | 45 |
| 5.2 HAMILTONIANO DE ISING E SUA RELAÇÃO COM O QUBO | 46 |

| | |
|---|----|
| 5.2.1 QUBO para Ising | 47 |
| 5.3 COMENTÁRIOS | 48 |
| 6 RESOLVENDO O TSP UTILIZANDO ALGORITMOS HÍBRIDOS: EXPERIMENTOS E RESULTADOS | 49 |
| 6.1 INSTÂNCIAS SIMÉTRICAS: COMPARANDO VQE E QAOA | 49 |
| 6.2 UTILIZANDO VQE PARA A INSTÂNCIA NÃO SIMÉTRICA | 51 |
| 6.3 COMENTÁRIOS | 55 |
| 7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS | 58 |
| REFERÊNCIAS | 60 |
| APÊNDICE A – CÁLCULOS PARA O ATSP | 63 |
| APÊNDICE B – HAMILTONIANO DE ISING PARA O STSP | 64 |

1 INTRODUÇÃO

A computação quântica emerge como uma área promissora na vanguarda do desenvolvimento científico e tecnológico, prometendo mudanças com potencial uso disruptivo na academia e indústria. Nas vistas desse potencial, grandes esforços vêm sendo feito para a construção de dispositivos capazes de atingir a *Supremacia Quântica*, termo esse cunhado por (PRESKILL, 2012) para definir uma máquina quântica programável capaz de resolver tal problema que seria impossível ser resolvido em um tempo hábil utilizando computadores clássicos.

A primeira ideia de um computador quântico remonta à (FEYNMAN, 1982), que propôs a utilização de sistemas quânticos para realizar um tipo de "*computação universal*". Seguiram-se décadas após o estabelecimento dessa ideia, até que a empresa americana IBM inaugurou em 2016 o primeiro sistema de computação quântica na nuvem, ampliando o acesso a computadores quânticos reais. Porém, o estado atual da computação quântica ainda está distante daquele idealizado por Feynman. Os dispositivos atuais sofrem com o fenômeno de decoerência, e possuem poucos qubits manipuláveis, o que torna impraticável quaisquer aplicações de problemas de grande escala. (PRESKILL, 2018) criou o termo *Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) computers* para se referir aos computadores quânticos da era pré *Supremacia Quântica*, e estudos vêm sendo feitos a fim de compreender que aplicações e que problemas podem ser resolvidos com tais dispositivos.

É nesse contexto que surgem os algoritmos quânticos, que podem ser executados em computadores quânticos no intuito de resolver tarefas específicas, como a fatoração de números primos (SHOR, 1994), a simulação de sistemas quânticos (LLOYD, 1996), ou a resolução de sistemas lineares de equações (HARROW; HASSIDIM; LLOYD, 2009). A principal características desses algorítmos consiste no ganho exponencial de performance quando comparados a métodos clássicos.

Na era de dispositivos NISQ, os *Algoritmos Quânticos Variacionais* apresentam-se como os principais atores para a obtenção de alguma vantagem computacional (CEREZO et al., 2021), abrangendo problemas de uma classe substancial de áreas do conhecimento. Exemplos incluem a *Simulação de sistemas dinâmicos*, *Machine Learning*, *Correção de Erros em Computadores Quânticos*, e mais relevante para o presente trabalho a *Otimização Combinatória*.

Dentro desse escopo, o *Problema do Caixeiro Viajante* chama a atenção pela complexidade e potencial de aplicabilidade, sendo um candidato excelente ao estudo da aplicação de algoritmos variacionais como possível ferramenta de solução. Dada a

sua relevância, já foram propostos diversos métodos e realizados estudos exaustivos sob diversas instâncias do problema. Dito isto, qualquer estudo voltado ao uso de novas ferramentas para a obtenção de soluções viáveis é relevante do ponto de vista acadêmico e justificável por si só.

1.1 OBJETIVOS

O presente trabalho possui como objetivo validar o uso de algoritmos variacionais aplicados ao Problema do Caixeiro Viajante. Utilizaremos instâncias reduzidas do problema, pois nos limitaremos a analisar provas de conceito. Ademais, uma introdução básica à computação será apresentada com a finalidade de estabelecer as bases que sustentam o trabalho. Para aqueles que não estão familiarizados com a área de computação quântica, recomendamos a leitura de (MERMIN, 2007) e (ALBINO; GOMES; BLOOT, 2020). Sobre os objetivos gerais e específicos, segue que:

- Objetivo principal - O trabalho possui como objetivo principal mostrar a possibilidade do uso de computadores quânticos na resolução de um problema de Programação Linear Inteira Binária através de sua conversão em um Hamiltoniano de Ising.
- Objetivo específico - Utilizaremos os algoritmos VQE e QAOA, para resolver algumas instâncias do problema (simétricas e assimétricas) e comparamos os resultados para os diferentes algoritmos com o intuito de avaliar o mais adequado para a utilização em problemas de escala real.

1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O trabalho foi organizado em sete capítulos, sendo o capítulo 1 a introdução. Nos capítulos 2 e 3 faremos uma breve exposição a temas relevantes de computação quântica e algoritmos variacionais. No capítulo 4 apresentamos o problema do Caixeiro Viajante e sua formulação matemática, assim como as instâncias escolhidas para testes posteriores e os resultados obtidos através de métodos clássicos. Por sua vez, abordaremos no capítulo 5, uma breve exposição as formulações QUBO, trataremos também da formulação de um problema como um Hamiltoniano de Ising. No capítulo 6, os resultados e experimentos serão apresentados. Finalmente, no capítulo 7 apresentaremos as conclusões e perspectivas para futuros trabalhos.

2 FUNDAMENTOS DE COMPUTAÇÃO QUÂNTICA

A fim de estabelecer um base teórica para sustentar os argumentos e conclusões do presente trabalho, apresentaremos neste capítulo alguns conceitos fundamentais da computação quântica. Faremos isso de forma concisa, uma vez que a intenção do trabalho não é a de ser um texto voltado a aprendizagem do tópico em questão. Entretanto, sempre que necessário, detalharemos as passagens para uma melhor compreensão das respectivas discussões.

2.1 QUBITS E ESTADOS QUÂNTICOS

Sabemos (TOCCI, 1994) que a unidade básica de informação em um computador clássico é o *bit* (aqui chamaremos de *cbit*). Associamos a cada *cbit* dois níveis possíveis: 0 ou 1; ou seja, uma configuração com n *cbits* distintos possui 2^n estados. Um computador clássico opera em uma *string* (conjunto de valores) como 001101010, transformando-a em outra através de operações lógicas.

De forma análoga, como ilustrado em (MERMIN, 2007), a unidade básica de informação em um computador quântico é o *qubit*. Essa terminologia é usada como referência ao termo *quantum bit*. Vamos associar a cada *qubit* dois estados possíveis - $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ - utilizando a notação de Dirac

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Apesar da semelhança, existe uma diferença fundamental entre o *cbit* e o *qubit*, a qual é baseada no fato de podermos associar um estado geral $|\psi\rangle$ ao último, onde

$$|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

, sendo $\alpha_0, \alpha_1 \in \mathbb{C}$ e $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$. Aqui $|\psi\rangle$ é dito ser uma superposição dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ com amplitudes α_0 e α_1 e representa um vetor no *Espaço de Hilbert*. Esse vetor, chamado de *ket*, contém toda a informação sob o estado do *qubit*¹ e possui um par dual chamado de *bra* $\langle\psi|$. Um computador quântico opera em um conjunto de *qubits* através de operações especiais que estudaremos a frente na seção

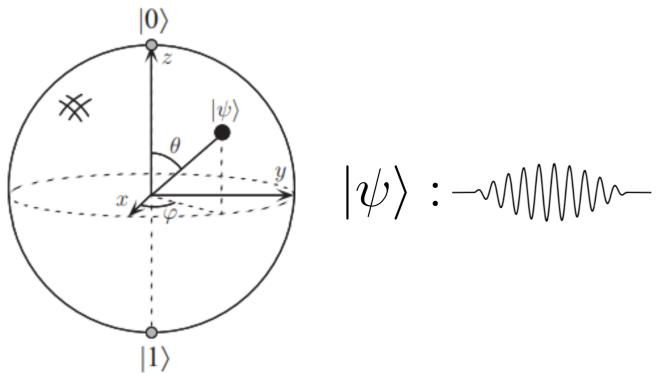
¹Isso apenas é verdade se estivermos lidando com estados puros, como é o caso do presente trabalho. Para ocasiões em que isso não é verdade, devemos lidar com o formalismo das matrizes densidade.

de Operações Reversíveis.

Na área de computação quântica, a *Esfera de Bloch* (Figura 1) é uma representação geométrica de um estado quântico puro de dois níveis no espaço de Hilbert bidimensional, nomeada em homenagem ao físico suíço *Félix Bloch*. O polo norte e sul da esfera correspondem aos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ respectivamente, enquanto os outros pontos na superfície da esfera são caracterizados pelo estado geral

$$|\psi\rangle = \frac{\cos(\theta)}{2}|0\rangle + e^{i\varphi} \frac{\sin(\theta)}{2}|1\rangle, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (3)$$

Figura 1: Representação abstrata de um qubit através da Esfera de Bloch. Podemos encarar o vetor $|\psi\rangle$ como uma função de onda descrevendo o estado do qubit.



Fonte: (NIELSEN; CHUANG, 2011).

Essa representação é útil para compreendermos a atuação de operadores em qubits. Um par de *qubits* pode ser encontrado em um dos quatro possíveis estados abaixo:

$$|0\rangle|0\rangle, \quad |0\rangle|1\rangle, \quad |1\rangle|0\rangle, \quad |1\rangle|1\rangle,$$

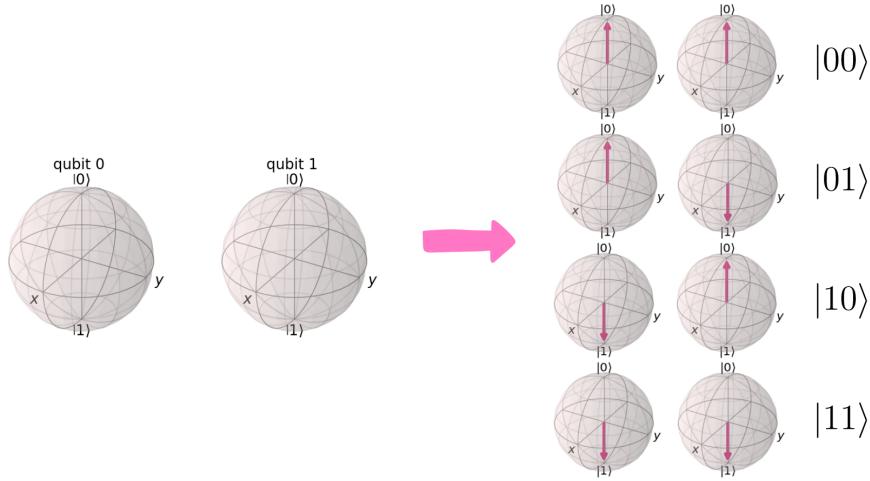
cuja combinação é ilustrada na Figura 2. Existem algumas notações alternativas para representar múltiplos *qubits*, como utilizar a expansão em binário dos respectivos inteiros da base 10, onde o subscrito representa a base em que a expansão é feita:

$$|0\rangle_2, \quad |1\rangle_2, \quad |2\rangle_2, \quad |3\rangle_2.$$

Representamos uma superposição de múltiplos *qubits* como

$$|\psi\rangle = \sum_{0 \leq x \leq 2^n} \alpha_x |x\rangle_n, \quad \text{onde} \quad \sum_{0 \leq x \leq 2^n} |\alpha_x|^2 = 1. \quad (4)$$

Figura 2: Ilustração de possíveis medidas de pares de qubits. Neste caso podemos fazer uma analogia com lançamentos de moedas e suas possibilidades de medida.



Fonte: De autoria própria.

Adicionalmente, se tivermos dois *qubits*, onde o primeiro é descrito por $|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$ e o segundo por $|\phi\rangle = \beta_0|0\rangle + \beta_1|1\rangle$, o estado $|\Psi\rangle$ formado pela combinação de $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ é dado por:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle) \otimes (\beta_0|0\rangle + \beta_1|1\rangle) \\ &= \alpha_0\beta_0|00\rangle + \alpha_0\beta_1|01\rangle + \alpha_1\beta_0|10\rangle + \alpha_1\beta_1|11\rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

onde $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ representa o produto tensorial dos dois estados. Em um computador clássico, um *cbit* é codificado em um sinal elétrico com uma faixa de tensão específica associada a um de dois níveis². Como sistema físico atribuído, pode-se utilizar um chip supercondutor de Silício ou Germânio (*Transistor*) (TOCCI, 1994).

Já em um computador quântico, pela natureza dos *qubits*, devemos utilizar sistemas de natureza quântica para simulá-los. Existem várias alternativas viáveis, como codificar um qubit na polarização de um fóton (horizontal $|H\rangle \equiv |0\rangle$ e vertical $|V\rangle \equiv |1\rangle$), ou utilizar um chip de material supercondutor onde pares de elétrons sofrem o fenômeno de tunelamento, permitindo que os elétrons possam ser encontrados em apenas dois níveis de energia (LADD et al., 2010). Outro cenário consistiria em utilizar a técnica de *Ressonância Magnética Núclear*, criando *qubits* em um estado de dois níveis através de pulsos de radio-frequência no spin nuclear de uma molécula de clorofórmio (OLIVEIRA et al., 2011).

²Geralmente $\sim 5V$ representando um sinal *HIGH* e $\sim 0V$ um sinal *LOW*.

2.2 OPERAÇÕES REVERSÍVEIS

Computadores quânticos realizam uma parte importante de seu trabalho através de operações reversíveis. A necessidade da reversibilidade dos operadores lógicos, surge da própria natureza da Mecânica Quântica, uma vez que suas operações são reversíveis (e também unitárias). Podemos ir além e considerar a necessidade da reversibilidade como uma consequência direta da segunda lei da termodinâmica, uma vez que a irreversibilidade lógica de operadores clássicos aumenta a entropia do sistema, dissipando energia, o que em um sistema quântico levaria a perda de coerência. Consequentemente, na computação quântica as operações reversíveis são imprescindíveis para garantir o acesso aos autovalores associados às medidas do circuito. Porém, para podermos explorar melhor esse conceito, precisamos compreender o que são Operadores Hermitianos e Unitários.

Um operador \hat{A} é dito ser *Hermitiano* se $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, onde \hat{A}^\dagger é o operador adjunto a \hat{A} obtido através do cálculo da matriz transposta conjugada de \hat{A} , e na Mecânica Quântica representamos observáveis através de Operadores Hermitianos (SAKURAI; COMMINS, 1995). Por outro lado, um operador é unitário se o respectivo operador adjunto for igual ao operador inverso, ou seja, dado um operador U , ele é unitário se

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I. \quad (6)$$

Como toda transformação unitária está associada a uma operação inversa (por definição), a atuação de um operador unitário em um *qubit* é reversível (MERMIN, 2007), e os primeiros operadores que veremos são os *Operadores de Pauli*:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

É possível representar estes operadores através da seguinte notação: X, Y, Z, cujas respectivas atuações em um qubit são dadas por:

$$\mathbf{X}|x\rangle = \begin{cases} |1\rangle, & \text{se } x = 0 \\ |0\rangle, & \text{se } x = 1 \end{cases}. \quad (8)$$

$$\mathbf{Y}|x\rangle = \begin{cases} i|1\rangle, & \text{se } x = 0 \\ -i|0\rangle, & \text{se } x = 1 \end{cases}. \quad (9)$$

$$\mathbf{Z}|x\rangle = \begin{cases} |0\rangle, & \text{se } x = 0 \\ -|1\rangle, & \text{se } x = 1 \end{cases}. \quad (10)$$

Note que analisando as equações 8, 9 e 10, vemos que tais atuações podem ser

compreendidas como uma rotação do vetor que representa o estado do *qubit* na esfera de Bloch. Ademais, sabemos que a união das matrizes de Pauli com a matriz identidade forma uma base para o espaço vetorial de matrizes hermitianas 2×2 . Ou seja, podemos decompor qualquer operador Hermitiano em termos destes operadores.

Outro operador relevante para o presente trabalho é a porta *Hadamard*, que é descrita como

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

cuja atuação em um qubit é dada por

$$\mathbf{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad \text{e} \quad \mathbf{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (12)$$

Pela equação 12 vemos que o operador Hadamard direciona o qubit para uma superposição equitativa dos estados da base computacional.

Até este momento todos os operadores apresentados atuam em apenas um *qubit*, porém temos uma classe de operadores que chamamos de *Operadores Controlados*, cuja atuação depende do estado de um (ou mais) *qubits*. Em especial, o operador *CNOT* atua em dois *qubits* (que podem ser descritos como *qubit de controle* e *qubit alvo*), da seguinte forma:

$$\mathbf{C}_{10}|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y \oplus x\rangle, \quad \mathbf{C}_{01}|x\rangle|y\rangle = |x \oplus y\rangle|y\rangle, \quad (13)$$

onde \oplus é uma soma na Aritimética Modular de base 2.

Por último, temos os operadores de rotação $\mathbf{RX}(\theta)$, $\mathbf{RY}(\theta)$ e $\mathbf{RZ}(\theta)$, que representam rotações parametrizadas por um ângulo θ na esfera de *Bloch* em torno dos eixos *x*, *y* e *z* respectivamente. As matrizes que representam estes operadores são

$$\mathbf{RX}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\mathbf{RY}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (15)$$

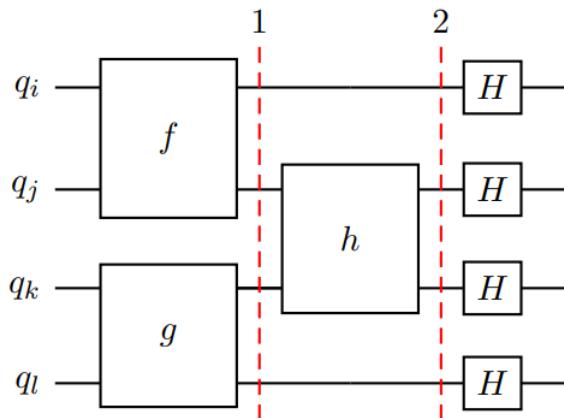
$$\mathbf{RZ}(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

2.2.1 Diagramas de Circuito

Representamos a atuação de operadores em *qubits* através de *portas quânticas* (do inglês *quantum gates*). Estes são dispostos em diagramas de circuito como o da Figura 3. Neste caso temos 3 *portas quânticas* atuando em um conjunto de 4 *qubits*.

Cada linha do circuito representa a evolução temporal de um *qubit*, e da esquerda para a direita observamos como ele evolui com a atuação das operações reversíveis. O operador f atua nos *qubits* q_i e q_j enquanto g atua em q_k e q_l . Como ambos estão alinhados verticalmente a atuação no estado conjunto é simultânea e podemos representá-la através do produto tensorial $f_{i,j} \otimes g_{k,l}$. Logo após a porta h atua em q_j e q_k como $I_i \otimes h_{j,k} \otimes I_l$. Por último, 4 portas Hadamard atuam nos 4 *qubits* simultaneamente.

Figura 3: Atuação de três operadores (f, g, h) em 4 *qubits* junto com a atuação de portas Hadamard nos mesmos.



Fonte: De autoria própria.

2.3 EMARANHAMENTO

Em 1935 Einstein, Podolsky e Rosen publicaram o famoso artigo nomeado "*Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*" com a intenção de demonstrar uma suposta falha fundamental na teoria da Mecânica Quântica. Com esse artigo eles introduziram o conceito de *Emaranhamento*, que chamaram de "*ação fantasmagórica a distância*".

Em 1951, David Bohm propôs uma versão simplificada do experimento que iremos abordar para compreendermos o fenômeno. Para tal experimento, consideraremos o decaimento de um píon neutro em um elétron e um pósitron

$$\pi^0 \rightarrow e^- + e^+$$

Assumindo que o píon estava em repouso, o elétron e o pósitron rumam em direções opostas. Pela conservação de momento angular, temos que o estado do sistema é o seguinte singuleto:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_{-}\downarrow_{+} + \downarrow_{-}\uparrow_{+}). \quad (17)$$

A equação 17 nos diz que os spins do elétron e pósitron estão intrinsecamente correlacionados. Se uma medição for feita, e descobrirmos que o elétron tem *spin up* (\uparrow_{-}), a única possibilidade é encontrarmos o pósitron com *spin down* (\downarrow_{+}) e vice-versa. Ademais, essa correlação é independente da distância que se encontram o elétron e o pósitron.

Uma vez que temos uma ideia clara do que é um estado emaranhado, vejamos como identificá-lo. Um sistema que pode ser dividido em dois subsistemas no espaço de Hilbert é conhecido como *Sistema Quântico Bipartido* (PRESKILL, 1998). Se denotarmos como \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B os dois subespaços, temos que o espaço de Hilbert do sistema composto é descrito por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \quad (18)$$

Porém nem todos os estados $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ são emaranhados. Quando dois estados estão emaranhados, o sub-estado de cada sistema composto só pode ser descrito em relação ao outro sub-estado. Quando dois estados não estão emaranhados dizemos que eles estão em um *estado produto*. Então se $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A$, $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_B$ e $|\chi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$, $|\chi\rangle$ é um estado produto (MCMAHON, 2007).

Estados que não podem ser descritos como um estado produto no sistema bipartido são estados emaranhados. Um exemplo de uma base para um estado bipartido é a *Base de Bell*, a qual é constituída de quatro estados emaranhados denominados de *Estado de Bell*:

$$|\Psi_{x,y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0y\rangle + (-1)^x|1\bar{y}\rangle) \quad x, y = 0, 1 \quad (19)$$

onde se $y = 0 \rightarrow \bar{y} = 1$, e vice versa.

2.4 MEDIDAS EM UM COMPUTADOR QUÂNTICO

O conceito de medida é de fundamental importância na computação quântica, visto que ao contrário da computação clássica, onde a medida não é disruptiva, em um computador quântico ela corrompe o estado que estamos trabalhando, ou seja, a medida *colapsa* o estado quântico. Ao contrário de todas as operações realizadas em um computador quântico, a medida é uma *Operação Irreversível*.

2.4.1 Regra de Born

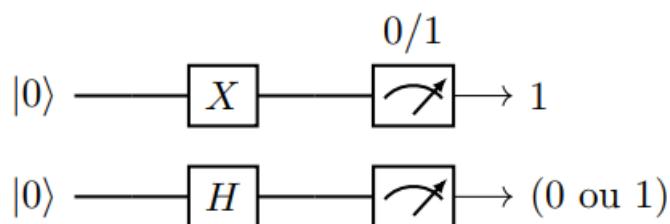
Para descrevermos completamente o estado de um *bit*, precisamos apenas uma informação, isto é, se o *bit* está no nível 0 ou 1. Porém, para explicitarmos completamente o estado de um *qubit* (Eq 2), precisamos especificar as constantes α_0 e α_1 sujeitas a condição de normalização $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$. Mas, segundo a Regra de Born (BORN, 1926), não podemos medir um estado quântico e obter simultaneamente todas as constantes que o caracterizam. Dado um estado quântico de n *qubits*, descrito por

$$|\Psi\rangle = \sum_{0 \leq x \leq 2^n} \alpha_x |x\rangle_n, \quad (20)$$

é comum dizer que $|\alpha_x|^2$ indica a probabilidade de encontrarmos o estado $|x\rangle_n$ ao medirmos $|\Psi\rangle$, mas isso é um abuso de linguagem, uma vez que $|x\rangle_n$ é apenas um dos sub-estados que compõe o estado como um todo. Podemos dizer, com mais precisão, que uma medida de energia sob o estado descrito pelo vetor de onda $|\Psi\rangle$ levará a uma observação de um nível de energia E_x com probabilidade dada por $P(x) = \langle x|\Psi\rangle = |\alpha_x|^2$, e ainda, após a medida o estado $|\Psi\rangle$ colapsa para $|x\rangle_n$. Vejamos então como representar uma medida em um computador quântico através de um diagrama de circuito.

Inicialmente consideraremos a operação $X|0\rangle$, sabemos pela regra de Born, que a probabilidade de medirmos algum estado específico é dada pelo módulo quadrático da probabilidade que acompanha o estado, nesse caso o estado final será $|1\rangle$ e sua probabilidade associada 1. O ato da medida é representado pelo elemento de circuito apresentado na figura 4. Note que uma vez que a medida é feita, a representamos na base computacional. A mesma ideia pode ser aplicada se atuarmos uma porta Hadamard no estado inicial, onde a operação nos leva ao estado $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ com a mesma probabilidade (de valor 0.5).

Figura 4: Medida em um computador quântico.



Fonte: De autoria própria.

2.4.2 Medidas em Bases Distintas

Até agora falamos apenas sobre medidas na base computacional ($|0\rangle$ e $|1\rangle$), porém, não precisamos nos limitar a mesma. Uma possível alternativa, é utilizar a base formada pelo conjunto

$$|+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad \text{e} \quad |-\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (21)$$

Dado um estado arbitrário, obtido através da equação 2, ele pode ser descrito em função desta base como:

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha_0 + \alpha_1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{\alpha_0 - \alpha_1}{\sqrt{2}}|-\rangle.$$

Pela regra de Born, uma medida nessa base nos levaria aos estados $|+\rangle$ ou $|-\rangle$ com probabilidades $|\alpha_0 + \alpha_1|^2/2$ e $|\alpha_0 - \alpha_1|^2/2$ respectivamente.

Então, dado quaisquer estados ortonormais $|a\rangle$ e $|b\rangle$ formando uma base, é possível expressar um estado arbitrário como uma combinação linear $\alpha_0|a\rangle + \alpha_1|b\rangle$ dos estados da base. Além disso, podemos realizar uma medida com respeito a $|a\rangle$ e $|b\rangle$, resultando em a com probabilidade $|\alpha_0|^2$ ou b com probabilidade $|\alpha_1|^2$. A condição de ortonormalidade é necessária para garantir que $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$ (NIELSEN; CHUANG, 2011)

2.4.3 Sobre Estatística e Valor Esperado

O processo computacional geral de um computador quântico é dado ao realizarmos vários experimentos idênticos, seguido de uma análise estatística sobre o resultado dos mesmos. Dito isso, é importante introduzirmos a ideia de *Valor Esperado*. Na estatística, o valor esperado é definido como a média aritmética de vários resultados independentes de uma variável aleatória (PISHRO-NIK, 2016), ou seja, a média de todos os possíveis resultados de um dado experimento. Por exemplo, suponha que temos um sistema de spin 1/2 e realizamos diversas medidas sob o eixo z . O valor esperado do operador S_z indicará a média dos possíveis resultados, e poderá assumir valores entre $-\hbar/2$ e $\hbar/2$. A longo prazo, esperamos que um experimento gere um resultado mais próximo àquele indicado pelo valor esperado.

O *Valor Esperado* de um dado Operador $\hat{\mathcal{H}}$ é o *valor médio* daquele operador com respeito a um dado estado quântico (NIELSEN; CHUANG, 2011). Isto é dizer, se preparamos diversas cópias idênticas de $|\psi\rangle$ e medirmos todas em relação a $\hat{\mathcal{H}}$, qual será a média dos valores medidos? Esse é o valor esperado, e é escrito como:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \sum_i P(\omega_i)\omega_i, \quad (22)$$

onde ω_i é o valor obtido e $P(\omega_i)$ a respectiva probabilidade de obter esse valor. Sendo $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = \omega_i|\psi\rangle$ e $P(\omega_i) = |\langle\omega_i|\psi\rangle|^2$, podemos reescrever $\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle$ como:

$$\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle = \sum_i \langle\psi|\hat{\mathcal{H}}|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle. \quad (23)$$

Porém, como $\sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i| = 1$ temos que

$$\langle\hat{\mathcal{H}}\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle. \quad (24)$$

2.5 PARALELISMO QUÂNTICO

De acordo com (MERMIN, 2007) um computador quântico devidamente programado deve ser capaz de agir em um número x e produzir outro número $f(x)$, para alguma função específica f . Se especificarmos o número x como n bits inteiros e o número $f(x)$ como m bits inteiros serão necessários ao menos $m + n$ qubits para realizar este processo computacional. Então vamos assumir que o cálculo de $f(x)$ é feito através de uma transformação unitária U_f nos qubits de entrada e saída, onde:

$$U_f(|x\rangle_n|y\rangle_m) = |x\rangle_n|y \oplus f(x)\rangle_m. \quad (25)$$

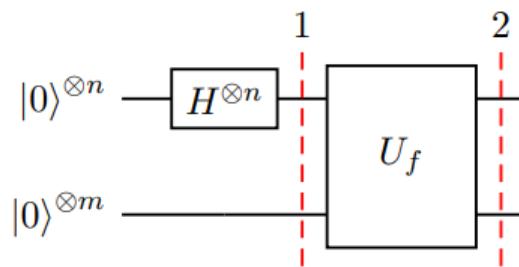
Agora, note que se os qubits de entrada estiverem na base $|0\rangle^{\otimes n}$ e atuarmos com n portas Hadamard, obteremos o estado

$$H^{\otimes n}|0\rangle_n = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n} |x\rangle_n. \quad (26)$$

Se aplicarmos a transformação unitária da equação 25 como no diagrama de circuitos da Figura 5, temos

$$U_f(H^{\otimes n} \otimes 1_m)(|0\rangle_n|0\rangle_m) = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_0^{2^n} |x\rangle_n|f(x)\rangle_m. \quad (27)$$

Figura 5: Atuação de gates Hadamard na base computacional $|0\rangle^{\otimes n}$ e atuação de transformação unitária U_f na base $|0\rangle^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes m}$.



Fonte: De autoria própria.

A equação 27 nos diz que se antes de atuarmos com U_f , nós simplesmente atuarmos com uma Hadamard em cada *qubit* de entrada no estado padrão $|0\rangle^{\otimes n}$, o resultado do processo computacional é descrito por um estado cuja estrutura não pode ser explicitada sem conhecer o resultado de todas as 2^n avaliações da função, mas sabemos que não é possível acessá-los. Dessa modo, seria preciso clonar esses resultados antes de realizarmos a medida para medi-los separadamente, o que não é permitido de acordo com o *Teorema da não-clonagem* (PARK, 1970).

2.6 COMENTÁRIOS

Os fundamentos que foram brevemente discutidos no presente capítulo podem ser usados para o desenvolvimento de algoritmos que abrangem diversas áreas e problemas, dentro delas a Otimização está incluída. Nos próximos capítulos, veremos estratégias de como utilizar o paralelismo quântico para obter alguma vantagem computacional comparada com os métodos clássicos na solução de tais problemas. Primeiramente, avaliaremos e buscaremos entender a teoria por trás de dois algoritmos conceituados dentro da computação quântica, sendo eles o Variational Quantum Eigensolver (VQE) e o Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA). Cabe ressaltar que os estudos seguem a linha de prova de conceito, visto que a análise da performance de execução foge do escopo do presente trabalho.

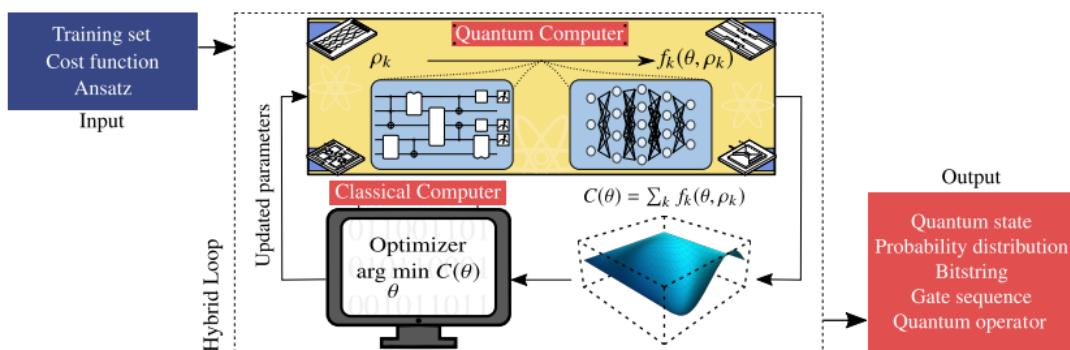
3 ALGORITMOS QUÂNTICOS VARIACIONAIS (VQAS)

Segundo (CEREZO et al., 2021) os *Algoritmos Quânticos Variacionais* tem surgido como estratégia principal para obtermos alguma vantagem computacional efetiva na era de dispositivos NISQ. Neste capítulo, discutiremos as bases teóricas que descrevem os diferentes algoritmos variacionais, e demonstraremos dois exemplos, a saber: o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) introduzido por (PERUZZO et al., 2014) e o *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA) inicialmente apresentado por (FARHI; GOLDSTONE; GUTMANN, 2014).

3.1 CONCEITOS BÁSICOS

Os algoritmos quânticos variacionais podem ser utilizados em vários escopos, gerando diversas estruturas de níveis e complexidades distintas. Apesar disso, podemos destacar alguns elementos básicos que todos os VQAs tem em comum. A Figura 6 explica a estrutura habitual de um VQA. Podemos separá-los inicialmente em dois blocos, uma QPU (*Quantum Processing Unit*) que roda um algoritmo quântico parametrizado, e uma CPU (*Classical Processing Unit*) que a partir de um algoritmo de otimização clássica atualizará os parâmetros utilizados na QPU.

Figura 6: Estrutura geral de um algoritmo quântico variacional.



Fonte: (CEREZO et al., 2021).

O algoritmo variacional tem como *input* um conjunto de dados $\{\rho_k\}$, uma função custo $C(\theta)$ que codifica a solução do problema, e um *Ansatz* (círculo quântico parametrizado por um conjunto discreto de ângulos θ). O *output* será a solução do problema, que dependerá da forma como definimos a função custo, podendo ser um estado quântico, uma distribuição de probabilidade, ou algum elemento do *Ansatz*.

A função custo essencialmente mapeia os valores dos parâmetros θ em números reais, ou seja, ela define uma superfície de busca. Podemos escrever-lá da

seguinte forma:

$$C(\boldsymbol{\theta}) = \sum_k f_k(\boldsymbol{\theta}, \{\rho_k\}). \quad (28)$$

O algoritmo clássico de otimização terá a tarefa de encontrar sob essa superfície os valores $\boldsymbol{\theta}^*$ que minimizam a função custo, sendo

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} C(\boldsymbol{\theta}), \quad (29)$$

rodando em *loop*, e a cada iteração utiliza um circuito quântico para estimar o valor esperado do operador hamiltoniano que define o problema, a partir de alguma estratégia a depender da forma do *Ansatz*. A solução final do problema será obtida quando algum critério de parada previamente estabelecido for atendido.

Tanto o VQE quanto o QAOA utilizam o *Princípio Variacional* da mecânica quântica para encontrar o valor esperado do operador Hamiltoniano que define o problema, e a partir disso realizam operações para encontrar a resposta do problema. Por conseguinte, se mostra necessário estudarmos o princípio variacional para compreendermos a estrutura por trás de tais algoritmos.

3.1.1 Princípio Variacional

Suponha que queremos calcular o valor do estado fundamental de energia E_f para um sistema descrito pelo hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$, porém não conseguimos resolver a equação de Schrödinger (por qualquer limitação que seja). O Princípio Variacional lhe dará um limite superior para E_f , e com algum trabalho conseguimos derivar o valor exato (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018). Podemos escrever $\hat{\mathcal{H}}$ como

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (30)$$

sendo λ_i os autovalores e $|\psi_i\rangle$ os autovetores que formam a base para o operador $\hat{\mathcal{H}}$.

O valor esperado de $\hat{\mathcal{H}}$ em um estado qualquer $|\Psi\rangle$ é dado por:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{\mathcal{H}} | \Psi \rangle. \quad (31)$$

Substituindo $\hat{\mathcal{H}}$ na equação 31 por sua representação da equação 30 obtemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_\Psi &= \langle \Psi | \left(\sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) | \Psi \rangle = \sum_i \lambda_i \langle \Psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \Psi \rangle \\ &\Rightarrow \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_\Psi = \sum_i \lambda_i |\langle \psi_i | \Psi \rangle|^2. \end{aligned}$$

Uma vez que todos os termos da expansão são positivos, e pelo menos um deles

envolve o valor de λ_{min} , fica claro que:

$$\lambda_{min} \leq \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \hat{\mathcal{H}} | \Psi \rangle = \sum_i \lambda_i |\langle \psi_i | \Psi \rangle|^2, \quad (32)$$

e como por definição E_f é igual ao menor autovalor de $\hat{\mathcal{H}}$, encontramos um limite máximo para o mesmo.

Algo importante a se notar é que o valor de energia esperado para o estado fundamental $|\Psi_f\rangle$ é:

$$\langle \Psi_f | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_f \rangle = \langle \Psi_f | \lambda_{min} | \Psi_f \rangle = \lambda_{min}.$$

Consequentemente:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_{\Psi_f} = \lambda_{min}. \quad (33)$$

A equação 33 nos diz que para encontrarmos E_f devemos calcular o valor esperado do operador hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ correspondente ao estado fundamental $|\Psi_f\rangle$.

3.2 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER

Uma das principais aplicações dos VQAs é encontrar estados fundamentais de energia para diferentes sistemas físicos a partir dos autovalores de um dado operador, que é escolhido como o hamiltoniano do sistema. Previamente aos algoritmos variacionais, essa tarefa era feita através do *Algoritmo de Estimação de Fase* ou QPE (*Quantum Phase Estimation*) introduzido por (KITAEV, 1995). Dado um operador unitário $\hat{\mathcal{H}}$ e um estado quântico $|\psi\rangle$ tal que $\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle$, o QPE estima a fase global θ através de diversas operações controladas. Porém a profundidade e o tempo de coerência necessários para o QPE tornam impraticáveis quaisquer implementações reais na era de dispositivos NISQ.

O VQE se apresenta como uma alternativa ao QPE, onde o estado fundamental é encontrado através do Princípio Variacional, ou seja, calculando o valor esperado do Hamiltoniano, e através de uma estratégia de medidas locais, diminuímos consideravelmente o tempo de coerência necessário para a convergência do algoritmo.

3.2.1 Quantum Expectation Extimation (QEE)

Na seção 2.2, mostramos que os operadores de Pauli junto com a matriz identidade formam uma base para o espaço vetorial das matrizes hermitianas $2^n \times 2^n$, que podemos escrever qualquer operador hamiltoniano como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i c_i \sigma_i^\alpha + \sum_{j,k} c_{j,k} \sigma_j^\alpha \sigma_k^\beta + \dots$$

onde $c_i, c_{j,k} \in \mathbb{R}$ e $\sigma_i^\alpha, \sigma_j^\alpha, \sigma_k^\beta$ são operadores de Pauli, com α e β representando o subespaço de atuação. Pela linearidade das operações vale que:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \sum_i c_i \langle \sigma_i^\alpha \rangle + \sum_{j,k} c_{j,k} \langle \sigma_j^\alpha \rangle \langle \sigma_k^\beta \rangle \quad (34)$$

Consequentemente, o cálculo de $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ se reduz ao cálculo de um número polinomial de valores esperados de produtos tensoriais de matrizes de Pauli e da matriz identidade (PERUZZO et al., 2014).

3.2.2 Preparação de Estados e Medindo o Valor Esperado

Um problema de autovalor de um observável representado por um operador $\hat{\mathcal{H}}$, pode ser reescrito como um problema variacional, em termos do coeficiente de *Rayleigh-Ritz*, onde o autovetor $|\Psi\rangle$ correspondente ao autovalor mínimo é o vetor que minimiza:

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{H}} | \Psi \rangle \quad (35)$$

Então computando esse coeficiente, utilizando o QEE como uma subrotina podemos preparar autovetores desconhecidos.

Segue o algoritmo adaptado de (PERUZZO et al., 2014) que detalha a implementação do VQE:

1. Projete um circuito controlado por um conjunto de parâmetros $\{\theta_i\}$ que possam preparar uma classe de estados. Prepare o estado inicial $|\Psi^0\rangle$ e defina a seguinte função objetivo:

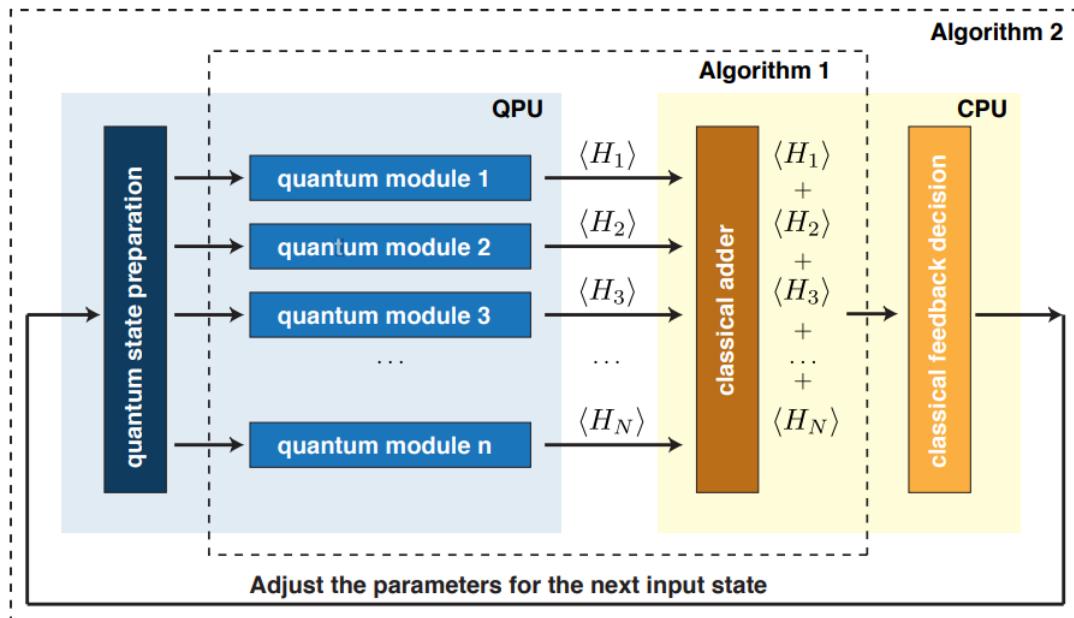
$$C(\boldsymbol{\theta}) = f(\{\theta_i^n\}) = \langle \Psi(\{\theta_i^n\}) | \hat{\mathcal{H}} | (\{\theta_i^n\}) \rangle$$

onde $i, n \in \mathbb{Z}$, e representam o número de parâmetros e a iteração atual respectivamente;

2. Sendo o valor inicial de $n = 0$, repita até alguma condição de parada ser atingida:
 - (a) Chame o QEE com $\{\theta_i^n\}$ como input;
 - (i) Utilizando a QPU, calcule $\langle \sigma_\alpha^i \rangle, \langle \sigma_\alpha^i \sigma_\beta^j \rangle \dots$ em $|\Psi^n\rangle$ para todos os termos de $\hat{\mathcal{H}}$;
 - (ii) Some os valores da QPU com seus respectivos pesos c para obter $f(\{\theta_i^n\})$;
 - (b) Alimente o algoritmo clássico de minimização com $f(\{\theta_i^n\})$ e o deixe determinar $\{\theta_i^{n+1}\}$.

Apresentamos na Figura 7 uma representação esquemática da estrutura geral do algoritmo, onde *Algorithm 1* representa o QPE e *Algorithm 2* o VQE.

Figura 7: Diagrama esquemático do VQE.



Fonte: (PERUZZO et al., 2014).

3.3 QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM

O QAOA é um algoritmo variacional inicialmente projetado para resolver problemas de *Otimização Combinatória*. Ele é inspirado no *Algoritmo de Evolução Adiabática* (FARHI et al., 2000), porém ao contrário desse, busca apenas uma resposta aproximada para o problema em questão.

Assim como no VQE, a função custo codifica o valor esperado de um Hamiltoniano (que aqui chamaremos de Função Objetivo) sob um estado ψ , mas nesse caso, ψ depende de um conjunto de ângulos $\{\gamma, \beta\}$. Adicionalmente, o algoritmo depende de um inteiro $p \geq 1$ e a precisão da aproximação melhora conforme p aumenta. Veremos ainda como resolver o problema conhecido como *Problema de Corte Máximo*, utilizando uma variação do QAOA em que fixamos o valor da constante p .

3.3.1 Otimização Combinatória

Problemas de Otimização Combinatória são especificados por n bits e m cláusulas, onde cada cláusula é uma restrição em um subconjunto de bits. Definimos uma função objetivo como o número de cláusulas satisfeitas da seguinte forma:

$$C(z) = \sum_{\alpha=1}^m C_\alpha, \quad (36)$$

onde $z = z_1 z_2 \dots z_n$ é uma *string* e $C_\alpha = 1$ se z satisfaz a cláusula α e $C_\alpha = 0$ caso contrário. Algoritmos de Otimização Aproximada buscam uma *string* z para qual $C(z)$ se aproxima do máximo (ou mínimo) de C .

3.3.2 Operador Gamma e Operador de Mistura

Vamos construir um operador U que depende de um ângulo γ utilizando a equação 36 da seguinte forma:

$$U(z, \gamma) = e^{-i\gamma C(z)} = \prod_{\alpha=1}^m e^{-i\gamma C_\alpha}, \quad (37)$$

$U(z, \gamma)$ é conhecido como *Operador Gamma*, e utilizamos ele para evoluir o estado inicial do problema para o estado final contendo a solução.

Porém, suponha que um dado estado inicial seja escrito como $|\psi\rangle = \sum_x \psi_x |x\rangle$ e queremos encontrar o estado fundamental de algum hamiltoniano na forma $H_c = \sum_x E_x |x\rangle \langle x|$. Aplicando o operador $U(z, \gamma)$ tendo H_c como função objetivo obtemos:

$$|\psi(\gamma)\rangle = U(z, \gamma)|\psi\rangle = \sum_x e^{-i\gamma E_x} \psi_x |x\rangle$$

Logo, a probabilidade associada à medida de $|\psi(\gamma)\rangle$ será dada por

$$p_x = |\langle x | \psi(\gamma) \rangle|^2 = |e^{-i\gamma E_x} \psi_x|^2 = |\psi_x|^2$$

Isso nos diz que a probabilidade p_x de encontrarmos um estado $|x\rangle$ a partir do estado evoluído $|\psi(\gamma)\rangle$ utilizando o operador gamma é a mesma que obteríamos se medíssemos o estado inicial $|\psi\rangle$. O que é um problema, uma vez que queremos maximizar a função $\langle \psi(\gamma) | H_c | \psi(\gamma) \rangle$ (que, neste caso, é constante). Para resolvê-lo, vamos introduzir o *Operador de Mistura*, definido como

$$B = \sum_{j=1}^n \sigma_j^x, \quad (38)$$

e sua atuação no espaço de Hilbert, com a dependência de um ângulo β , dada por:

$$U(B, \beta) = e^{-i\beta B} = \prod_{j=1}^n e^{-i\beta \sigma_j^x}. \quad (39)$$

Agora o funcional de energia $\langle \psi(\gamma, \beta) | H_c | \psi(\gamma, \beta) \rangle$ não é mais constante e podemos maximizá-lo variando os ângulos γ e β .

3.3.3 Função Custo e Estado Quântico Variacional

O estado inicial será a seguinte superposição:

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_z |z\rangle. \quad (40)$$

Para qualquer inteiro $p \geq 1$ e $2p$ ângulos $\gamma_1 \dots \gamma_p = \boldsymbol{\gamma}$ e $\beta_1 \dots \beta_p = \boldsymbol{\beta}$ vamos definir o seguinte estado parametrizado:

$$|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}\rangle = U(B, \beta_p)U(C, \gamma_p)\dots U(B, \beta_1)U(C, \gamma_1)|s\rangle. \quad (41)$$

Se F_p for a função custo, definida como o valor esperado de $C(z)$ nesse estado, temos que

$$F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \langle \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta} | C(z) | \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta} \rangle. \quad (42)$$

Adicionalmente, definimos M_p como o máximo de F_p sob todos os ângulos, ou seja

$$M_p = \max_{\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}} F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}), \quad (43)$$

(FARHI; GOLDSTONE; GUTMANN, 2014) mostraram que:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} M_p = \max_z C(z). \quad (44)$$

Esse resultado mostra que ao criarmos um estado quântico dependente do conjunto de ângulos $(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ e de uma constante p (que evoluí através da dinâmica gerada pelos operadores gamma e de mistura), se fizermos $p \rightarrow \infty$ e medirmos a função custo como o valor esperado da função objetivo sob o estado parametrizado, encontraremos uma boa aproximação para o máximo de F_p (que é a solução exata do problema).

3.3.4 Aplicação do QAOA no Problema de Corte Máximo

O Problema do Corte Máximo é um problema *NP-Hard*, onde dado um grafo com n vértices e m arestas formando um conjunto $\{\langle jk \rangle\}$, queremos encontrar uma string z que faça

$$C = \sum_{\langle jk \rangle} C_{\langle jk \rangle}, \quad (45)$$

onde

$$C_{\langle jk \rangle} = \frac{1}{2}(-\sigma_j^z \sigma_k^z + 1), \quad (46)$$

deve alcançar o maior possível. Desse modo, podemos definir a função custo como:

$$F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{\langle jk \rangle} \langle s | U^\dagger(C, \gamma_1) \dots U^\dagger(B, \beta_p) C_{\langle jk \rangle} U(B, \beta_p) \dots U(C, \gamma_1) | s \rangle. \quad (47)$$

Fixando p podemos mostrar que cada aresta $\langle jk \rangle$ em nossa soma $F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ está associada a um subgrafo $g(j, k)$ o que nos permite avaliar a função custo em termos de subsistemas quânticos independentes. Então podemos reescrever $F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ como:

$$F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_g \omega_g f_g(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}), \quad (48)$$

onde ω_g é o número de ocorrências do subgrafo g , e $f_g(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ é uma nova função que mede o valor esperado de $C_{\langle jk \rangle}$ sob um estado construído a partir de operadores cuja atuação é restrita ao subgrafo $g(j, k)$, para mais detalhes ver (FARHI; GOLDSTONE; GUTMANN, 2014).

Com isso, construímos o seguinte algoritmo:

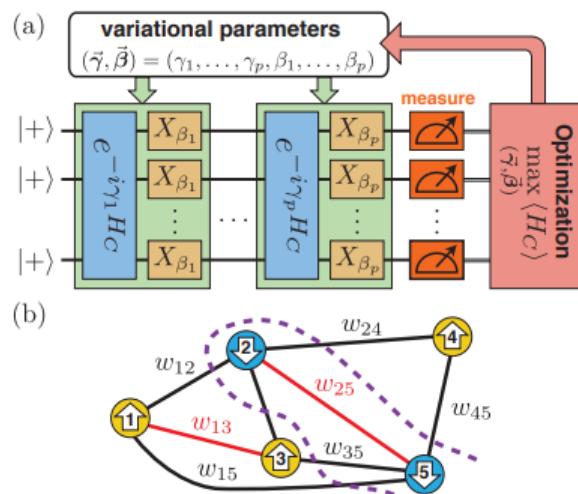
1. Primeiro encontramos os ângulos $(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ que maximizam F_p .
2. Em um computador quântico produzimos o estado $|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}\rangle$.
3. Ao medirmos na base computacional, encontramos uma string z e calculamos $C(z)$.
4. Repetindo os passos acima vamos encontrar um conjunto de valores de $C(z)$ cuja média é $F_p(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$

A figura 8 apresenta uma representação esquemática do QAOA, assim como uma visualização do problema.

3.4 COMENTÁRIOS

Estas duas técnicas variacionais estão entre as mais utilizadas em aplicações. As duas possuem algumas diferenças e vamos testá-las de forma comparativa no mesmo problema. Neste espírito, nos próximos capítulos apresentamos os resultados obtidos usando os dispositivos da *IBM Quantum* (os quais foram programados através do kit de desenvolvimento de software (SDK) *open-source Qiskit*).

Figura 8: Diagrama Esquemático do QAOA Para o Problema do Corte Máximo. (a) Representação do circuito quântico que implementa o QAOA tendo H_C como função objetivo codificando o Hamiltoniano do problema. (b) Problema do Corte Máximo em um grafo com 5 vértices, onde os vértices em azul formam o conjunto solução (note que as arestas w_{25} e w_{13} não participam da solução).



Fonte: (ZHOU et al., 2020).

4 PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE

O presente trabalho propõe uma maneira de utilizar algoritmos quânticos para resolver o problema do caixeiro viajante. Apresentaremos nesse capítulo então o problema, assim como algumas formulações iniciais e instâncias que a frente serão utilizadas para os respectivos testes das técnicas estudadas.

4.1 INTRODUÇÃO AO PROBLEMA

O problema do Caixeiro Viajante, ou *Travelling Salesman Problem* (TSP) é um problema largamente estudado no ramo da *combinatória* e da *teoria da complexidade computacional*. Como demonstrado por (GAREY; JOHNSON, 1979) esse é um problema *NP-Completo* (*Nondeterministic Polynomial-Time Complete*), i.e., dada uma solução viável, a mesma pode ser checada em tempo polinomial em uma *Máquina de Turing Não-Determinística*, porém encontrá-la não é uma tarefa simples. O presente trabalho não tem como foco compreender o que significa "não ser uma tarefa simples". Caso o leitor queira se aprofundar no tema, recomenda-se a leitura de (SIPSER, 1996). **A formulação geral do problema passa a ser caracterizada pelo seguinte questionamento:** Dado um grupo de cidades e o custo para viajar entre pares do grupo, qual é o caminho que passa por todas as cidades e retorna ao ponto inicial minimizando o custo total atrelado à viagem?

Além das aplicações óbvias voltadas a entregas, transporte e logística, (COOK, 2015) apresentou diversas áreas que podem se beneficiar com uma solução viável para o TSP, como o Mapeamento de Genoma, Automação de Máquinas Industriais, ou até mesmo Testes de Microprocessadores. (MATAI; SINGH; MITTAL, 2010) apresentaram três classificações distintas para o TSP, dentro das quais, duas estudaremos assegurar. São elas: *symmetric travelling salesman problem* (sTSP) e *asymmetric travelling salesman problem* (aTSP), respectivamente Problema do Caixeiro Viajante Simétrico e Assimétrico.

Matematicamente, o problema pode ser descrito como: *sejam* $N = \{n_1, n_2, \dots, n_k\}$ um conjunto de cidades, $A = \{(i, j) : i, j \in N\}$ o conjunto de respectivos caminhos e $d_{i,j}$ o custo associado ao caminho $(i, j) \in N$. Denotaremos por sTSP o problema de encontrar o caminho mínimo que visite todas as cidades com a condição $d_{ij} = d_{ji}$, e aTSP o caso em que $d_{ij} \neq d_{ji}$.

4.2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA SIMÉTRICO

Podemos formular o TSP como um problema de *Programação Linear Inteira*, em que dada uma matriz simétrica $D = (d_{ij})$ (onde d_{ij} representa a distância de i para j), queremos encontrar um conjunto solução tal que a soma das distâncias d_{ij} de pontos consecutivos no conjunto seja mínima.

As variáveis $x_{i,j}$ definem o problema caracterizado por um grafo $G = (N, A)$ em que o conjunto de vértices $N = \{n_1, n_2, \dots, n_k\}$ representa as cidades e o conjunto $A = \{(i, j) : i, j \in N\}$ as arestas. Assumimos $x_{i,j} = 1$ se o vértice i, j faz parte do conjunto solução, e $x_{i,j} = 0$ caso contrário. O problema então é traduzido para uma formulação que permite encontrar o *Caminho Hamiltoniano*¹ que minimiza a respectiva função objetivo (sujeita a algumas restrições). Ou seja, temos:

Formulação 1

$$\text{Minimizar: } z = \sum_{i < j} d_{i,j} x_{i,j} \quad (49)$$

$$\text{Sujeita a: } \sum_{i < k} x_{i,k} + \sum_{j > k} x_{k,j} = 2, \quad \forall j \in N, \quad k \in N \quad (50)$$

$$\sum_{i,j \in S} x_{i,j} \leq |S| - 1, \quad (S \subset N) \quad (51)$$

$$\{x_{i,j} \in \{0, 1\}, \quad \forall (i, j) \in A\} \quad (52)$$

As restrições 50 e 52 são conhecidas na Teoria dos Grafos como *restrição de grau* e de *integralidade*, elas servem para garantir que em cada vértice do grafo tenhamos apenas duas arestas (representando a entrada/saída da cidade). O conjunto S é especificado como o conjunto com os vértices de um subgrafo de G . A restrição 51 por sua vez, é uma *restrição de eliminação de subtour*, que garante a não existência de caminhos pré-hamiltonianos, i.e., caminhos hamiltonianos que não incluem todos os vértices do grafo.

4.2.1 Exemplo

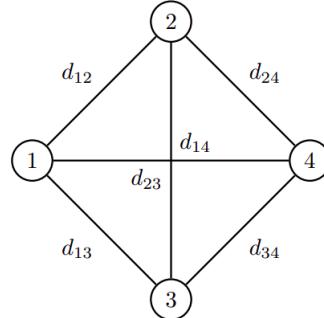
A título de exemplo, vejamos como utilizar a Formulação 1 para descrever um problema com 4 cidades. O problema é especificado na Figura 9, indicando que as distâncias podem ser alocadas em uma matriz D_s chamada matriz de distâncias e definida por:

$$D_s = \begin{bmatrix} 0 & d_{12} & d_{13} & d_{14} \\ d_{12} & 0 & d_{23} & d_{24} \\ d_{13} & d_{23} & 0 & d_{34} \\ d_{14} & d_{24} & d_{34} & 0 \end{bmatrix}. \quad (53)$$

¹O caminho que percorre todos os vértices do grafo apenas uma vez e retorna ao vértice inicial

Repare que os elementos na diagonal principal d_{ii} são nulos.

Figura 9: sTSP 4 cidades.



Fonte: De autoria própria.

Dada a simetria do problema existe a possibilidade do uso de variáveis restrito ao número de arestas (caminhos) do problema. Seguindo as restrições propostas, o problema pode ser descrito neste caso pela formulação abaixo:

$$\text{Minimizar: } z = d_{12}x_{12} + d_{13}x_{13} + d_{14}x_{14} + d_{23}x_{23} + d_{24}x_{24} + d_{34}x_{34}$$

$$\text{Sujeita a: } x_{12} + x_{13} + x_{14} = 2$$

$$x_{12} + x_{23} + x_{24} = 2$$

$$x_{13} + x_{23} + x_{34} = 2$$

$$x_{14} + x_{24} + x_{34} = 2$$

$$x_{12} + x_{13} \geq 1$$

$$x_{12} + x_{14} \geq 1$$

$$x_{13} + x_{14} \geq 1$$

$$x_{23} + x_{24} \geq 1$$

$$x_{i,j} \in \{0, 1\} \quad \forall i, j \in N$$

A formulação apresentada possui um total de seis variáveis de decisão com oito restrições, sendo que quatro representam equações e a outra metade denota um sistema de inequações.

4.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA NÃO SIMÉTRICO

Uma das formulações clássicas do problema é atribuída a (DANTZIG; FULKERSON; JOHNSON, 1954). Ela pode ser facilmente extendida para o aTSP, a qual será utilizada no presente trabalho.

Formulação 2

$$\text{Minimizar: } z = \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^n d_{i,j} x_{i,j} \right) \quad (54)$$

$$\text{Sujeita a: } \sum_{i=1}^n x_{i,j} = 1, \quad \forall j \in N \quad (55)$$

$$\sum_{j=1}^n x_{i,j} = 1, \quad \forall i \in N \quad (56)$$

$$\sum_{i \in S, j \notin S} x_{i,j} \geq 1, \quad \forall S \subset \mathcal{S} \quad (57)$$

$$\{x_{i,j} \in \{0, 1\}, \quad \forall i, j \in N\} \quad (58)$$

As restrições 55 e 56 servem para garantir que em cada vértice do grafo tenhamos apenas duas arestas (representando a entrada/saída da cidade). Por fim, a restrição 57 garante a não existência de caminhos pré-hamiltonianos. Assumimos que \mathcal{S} representa o conjunto de todos os subconjuntos contidos no grafo enquanto que S é um conjunto específico. Assim, para cada $S \in \mathcal{S}$ podemos impor que haja pelo menos uma aresta do ciclo que saia do conjunto.

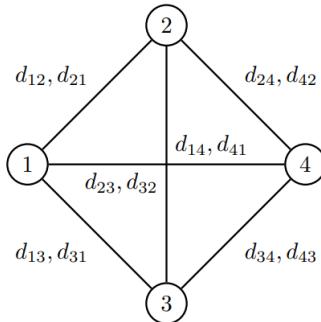
4.3.1 Exemplo

A título de exemplo, vejamos como utilizar novamente a Formulação 2 para descrever um problema com 4 cidades. O problema é especificado na Figura 10. Tal qual na equação 53, as distâncias podem ser alocadas em uma matriz D_a chamada matriz de distâncias e definida por

$$D_a = \begin{bmatrix} 0 & d_{12} & d_{13} & d_{14} \\ d_{21} & 0 & d_{23} & d_{24} \\ d_{31} & d_{32} & 0 & d_{34} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & 0 \end{bmatrix}. \quad (59)$$

A matriz neste caso não é simétrica, o que corresponde a dizer que a direção do caminho escolhido na rota tem peso diferente dependendo da direção. Seguindo as restrições propostas, o problema pode ser descrito neste caso pela formulação abaixo:

Figura 10: aTSP 4 cidades.



Fonte: De autoria própria.

$$\text{Minimizar: } z = \sum_{j=1}^4 \left(\sum_{i=1}^4 d_{ij} x_{ij} \right)$$

$$\text{Sujeita a: } x_{1j} + x_{2j} + x_{3j} + x_{4j} = 1 \quad \forall j \in N$$

$$x_{i1} + x_{i2} + x_{i3} + x_{i4} = 1 \quad \forall i \in N$$

$$x_{13} + x_{14} + x_{23} + x_{24} \geq 1$$

$$x_{12} + x_{13} + x_{42} + x_{43} \geq 1$$

$$x_{12} + x_{14} + x_{32} + x_{34} \geq 1$$

$$x_{21} + x_{24} + x_{31} + x_{34} \geq 1$$

$$x_{21} + x_{23} + x_{41} + x_{43} \geq 1$$

$$x_{41} + x_{42} + x_{31} + x_{32} \geq 1$$

$$x_{i,j} \in \{0, 1\}$$

Note que as respectivas distâncias foram especificadas como $d_{ij,ji}$ na Figura 10 para explicitar que estamos tratando do caso assimétrico. A formulação para este caso possui um total de doze variáveis de decisão com quatorze restrições, sendo oito de igualdade e seis de desigualdade.

4.4 COMPARAÇÃO COM O PROCEDIMENTO CLÁSSICO

Para fins de comparação, na presente seção estabeleceremos um conjunto de problemas e exemplos a serem testados e comparados. Utilizaremos soluções elaboradas por meio de um *solver* baseado no método *Simplex* como *benchmark*. Vamos considerar dois casos: um em que o problema é simétrico e outro em que ele não é. As distâncias serão especificadas e as instâncias indicadas como ts01 e ts02 para os simétricos, e ta01 para o não simétrico.

Tabela 1: Distâncias da instância ts01.

| | cidade 1 | cidade 2 | cidade 3 | cidade 4 |
|----------|----------|----------|----------|----------|
| cidade 1 | 0 | 12 | 14 | 17 |
| cidade 2 | 12 | 0 | 15 | 18 |
| cidade 3 | 14 | 15 | 0 | 29 |
| cidade 4 | 17 | 18 | 29 | 0 |

Tabela 2: Distâncias da instância ts02.

| | cidade 1 | cidade 2 | cidade 3 | cidade 4 |
|----------|----------|----------|----------|----------|
| cidade 1 | 0 | 10 | 15 | 20 |
| cidade 2 | 10 | 0 | 35 | 25 |
| cidade 3 | 15 | 35 | 0 | 30 |
| cidade 4 | 20 | 25 | 30 | 0 |

Tabela 3: Distâncias da instância ta01.

| | cidade 1 | cidade 2 | cidade 3 | cidade 4 |
|----------|----------|----------|----------|----------|
| cidade 1 | 0 | 10 | 15 | 20 |
| cidade 2 | 12 | 0 | 35 | 25 |
| cidade 3 | 7 | 36 | 0 | 30 |
| cidade 4 | 20 | 4 | 30 | 0 |

Tabela 4: Resultados do *solver* para as instâncias estabelecidas.

| Instância | Tour mínimo | Solução por Simplex |
|-----------|-------------|---------------------|
| ts01 | 64 | 011110 |
| ts02 | 80 | 110011 |
| ta01 | 61 | 010100001010 |

O tempo de execução não considerado dada as escalas limitadas dos problemas avaliados. Nosso interesse é comparar a precisão do resultado usando os algoritmos quânticos híbridos. Os resultados utilizando o simplex foram gerados em uma planilha de Excel a partir do *solver* disponível nesta plataforma. Devido a pequena dimensão dos problemas, utilizamos uma rotina de força bruta para validar os resultados fornecidos pelo *solver*, implementada no software MatLab da Mathworks.

4.5 COMENTÁRIOS

Neste ponto percebemos que o aumento do número de cidades escala rapidamente com o número de variáveis de decisão. No caso não simétrico se considerarmos n como o número de cidades, temos que o número de variáveis escala com a dimensão da matriz de distâncias, desconsiderando as diagonais. No caso do nosso exemplo, temos doze variáveis de decisão, as quais impactam também o número de restrições. Por outro lado, para o problema simétrico o número de variáveis é relacionada com o número de arestas e possui um aumento com o número de cidades de uma ordem menor que o problema não simétrico. Nos próximos capítulos veremos como escrever as formulações escolhidas de uma maneira adequada para problemas em computação quântica, e utilizaremos os algoritmos apresentados no capítulo 3 para testá-las.

5 FORMULAÇÃO DO TIPO QUBO E HAMILTONIANO DE ISING

No presente capítulo, estudaremos a formulação do problema do caixeiro viajante por meio de *Programação Quadrática Binária Irrestrita* e sua contraparte escrita na forma de um *Hamiltoniano de Ising*.

5.1 FORMULAÇÃO POR MEIO DE QUBO

Programação Quadrática Binária Irrestrita (ou QUBO do inglês *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*), é um ramo da matemática combinatória com diversas aplicações em diferentes áreas, como *Machine Learning*, Economia e mais relevante para o presente trabalho computação quântica. Problemas do tipo QUBO são escritos como:

$$E(x) = \sum_{i,j} x_j Q_{ij} x_i ; \quad x_{i,j} \in \{0, 1\}, \quad (60)$$

onde $x_{i,j}$ são variáveis binárias(i.e, assumem apenas valor 0 ou 1), e Q_{ij} é uma matriz simétrica. Resolver um problema QUBO se resume a encontrar os valores das variáveis binárias que compõem o problema que minimizam a função custo $E(x)$. Problemas do tipo QUBO são NP-Hard, porém diversos avanços estão sendo feitos utilizando meta-heurísticas para resolve-los. Tais procedimentos são de grande valor para a mecânica quântica, como pontuado por (GLOVER; KOCHENBERGER; YU, 2018).

O interesse por escrever problemas conhecidos como QUBOs tem crescido recentemente na área de computação quântica, pelo advento de computadores quânticos baseados em *Quantum Annealing* (JOHNSON et al., 2011). Em linhas simples, um computador quântico construído dessa maneira utiliza o *Teorema Adiabático* da mecânica quântica para encontrar o valor mínimo de um Hamiltoniano na formulação de *Ising* que caracteriza o problema. Ainda neste capítulo, estudaremos a equivalência entre modelos do tipo QUBO e tais Hamiltonianos e como utilizamos essa equivalência para resolver o TSP.

5.1.1 QUBO Restrito para QUBO Irrestrito

As formulações explicitadas no capítulo anterior utilizam uma função custo sujeita a um conjunto de restrições que delimitam o espaço de busca da solução ótima do

problema. Uma segunda abordagem seria escrever uma função custo irrestrita equivalente, ou seja, uma função que não esteja sujeita a um conjunto de restrições.

Esse procedimento foi estudado por (GLOVER; KOCHENBERGER; YU, 2018) para diversos casos. Adicionamos à função objetivo penalidades quadráticas referentes a cada restrição. As penalidades introduzidas são escolhidas, ao ponto que, a influência das restrições no problema original seja efetivamente simulada no problema irrestrito conforme o optimizador busca pela solução ótima. Ou seja, as penalidades são escolhidas de forma que sejam nulas (para soluções inviáveis) e iguais a algum número positivo para soluções viáveis. Na Tabela 5, temos um conjunto de penalidades equivalentes conhecidas:

Tabela 5: Relação restrição/penalidade para casos conhecidos.

| Restrição Clássica | Penalidade Equivalente |
|--------------------------|-------------------------------|
| $x + y \leq 1$ | $P(xy)$ |
| $x + y \geq 1$ | $P(1 - x - y + xy)$ |
| $x + y = 1$ | $P(1 - x - y + 2xy)$ |
| $x \leq y$ | $P(x - xy)$ |
| $x_1 + x_2 + x_3 \leq 1$ | $P(x_1x_2 + x_1x_3 + x_2x_3)$ |
| $x = y$ | $P(x + y - 2xy)$ |

Fonte: (GLOVER; KOCHENBERGER; YU, 2018)

As penalidades expostas na Tabela 5 não são únicas. Fato óbvio, considerando a necessidade de adequação do modelo pela escolha da constante P . Para um problema particular, essa escolha é feita a partir do conhecimento prévio do domínio de busca, e da relevância da respectiva restrição na função custo original. Se sabemos que uma restrição deve ser satisfeita, escolhemos um valor de P grande o suficiente para garantir um impacto relevante na função custo irrestrita.

5.1.2 Formulação do problema simétrico como um QUBO

Para demonstrarmos a formulação do sTSP como um QUBO partiremos inicialmente do exemplo proposto no capítulo 4.2.1. Fazendo uma mudança dos índices nas variáveis de decisão o problema pode ser reescrito como:

$$(x_{12}, x_{13}, x_{14}, x_{23}, x_{24}, x_{34}) \longrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$$

Minimizar: $z = d_1x_1 + d_2x_2 + d_3x_3 + d_4x_4 + d_5x_5 + d_6x_6$

Sujeita a: $x_1 + x_2 + x_3 = 2$

$$x_1 + x_4 + x_5 = 2$$

$$x_2 + x_4 + x_6 = 2$$

$$x_3 + x_5 + x_6 = 2$$

$$x_1 + x_2 \geq 1$$

$$x_1 + x_3 \geq 1$$

$$x_2 + x_3 \geq 1$$

$$x_4 + x_5 \geq 1$$

$$x_i \in \{0, 1\}$$

Agora, utilizando o procedimento de *Glover*, vamos lidar com as restrições impostas à função custo.

- Primeiro lidamos com as igualdades utilizando: $x + y = 1 \rightarrow P(1 - x - y + 2xy)$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 2 \rightarrow P(4 - 3x_1 - 3x_2 - 3x_3 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3)$$

$$x_1 + x_4 + x_5 = 2 \rightarrow P(4 - 3x_1 - 3x_4 - 3x_5 + 2x_1x_4 + 2x_1x_5 + 2x_4x_5)$$

$$x_2 + x_4 + x_6 = 2 \rightarrow P(4 - 3x_2 - 3x_4 - 3x_6 + 2x_2x_4 + 2x_2x_6 + 2x_4x_6)$$

$$x_3 + x_5 + x_6 = 2 \rightarrow P(4 - 3x_3 - 3x_5 - 3x_6 + 2x_3x_5 + 2x_3x_6 + 2x_5x_6)$$

- Agora lidamos com as desigualdades utilizando: $x + y \geq 1 \rightarrow P(1 - x - y + xy)$

$$x_1 + x_2 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_2 + x_1x_2)$$

$$x_1 + x_3 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_3 + x_1x_3)$$

$$x_2 + x_3 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_2 - x_3 + x_2x_3)$$

$$x_4 + x_5 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_4 - x_5 + x_4x_5)$$

Assim, a forma irrestrita do problema se restringe em minimizar a seguinte função custo:

$$\begin{aligned} z = & d_1x_1 + d_2x_2 + d_3x_3 + d_4x_4 + d_5x_5 + d_6x_6 + P(4 - 3x_1 - 3x_2 - 3x_3 + \\ & 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3) + P(4 - 3x_1 - 3x_4 - 3x_5 + 2x_1x_4 + 2x_1x_5 + 2x_4x_5) + \\ & P(4 - 3x_2 - 3x_4 - 3x_6 + 2x_2x_4 + 2x_2x_6 + 2x_4x_6) + P(4 - 3x_3 - 3x_5 - 3x_6 + \\ & 2x_3x_5 + 2x_3x_6 + 2x_5x_6) + P(1 - x_1 - x_2 + x_1x_2) + P(1 - x_1 - x_3 + x_1x_3) + \\ & P(1 - x_2 - x_3 + x_2x_3) + P(1 - x_4 - x_5 + x_4x_5) \end{aligned} \tag{61}$$

5.1.3 Formulação do problema não simétrico como um QUBO

Partimos do exemplo proposto no 4.3.1 para formular o aTSP como um QUBO. Novamente, temos a seguinte mudança de índices nas variáveis de decisão:

$$(x_{12}, x_{13}, x_{14}, x_{21}, x_{23}, x_{24}, x_{31}, x_{32}, x_{34}, x_{41}, x_{42}, x_{43}) \longrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9, x_{10}, x_{11}, x_{12})$$

Dessa maneira, o problema se traduz em:

$$\begin{aligned} \text{Minimizar: } \quad z &= \sum_{i=1}^{12} d_i x_i \\ \text{Sujeita a: } \quad x_4 + x_7 + x_{10} &= 1 \\ x_1 + x_8 + x_{11} &= 1 \\ x_2 + x_5 + x_{12} &= 1 \\ x_3 + x_6 + x_9 &= 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 &= 1 \\ x_4 + x_5 + x_6 &= 1 \\ x_7 + x_8 + x_9 &= 1 \\ x_{10} + x_{11} + x_{12} &= 1 \\ x_2 + x_3 + x_5 + x_6 &\geq 1 \\ x_1 + x_2 + x_{11} + x_{12} &\geq 1 \\ x_1 + x_3 + x_8 + x_9 &\geq 1 \\ x_4 + x_6 + x_7 + x_9 &\geq 1 \\ x_4 + x_5 + x_{10} + x_{12} &\geq 1 \\ x_{10} + x_{11} + x_7 + x_8 &\geq 1 \\ x_i &\in \{0, 1\} \end{aligned}$$

Utilizando tais restrições o problema pode ser reescrito¹ como minimizar a seguinte

¹As contas para tal transformação podem ser encontradas no Apêndice A

função custo:

$$\begin{aligned}
 z = & d_1x_1 + d_2x_2 + d_3x_3 + d_4x_4 + d_5x_5 + d_6x_6 + d_7x_7 + d_8x_8 + d_9x_9 + d_{10}x_{10} \\
 & + d_{11}x_{11} + d_{12}x_{12} + P(1 - x_4 - x_7 - x_{10} + 2x_4x_7 + 2x_4x_{10} + 2x_7x_{10}) \\
 & + P(1 - x_1 - x_8 - x_{11} + 2x_1x_8 + 2x_1x_{11} + 2x_8x_{11}) + P(1 - x_2 - x_5 - x_{12} \\
 & + 2x_2x_5 + 2x_2x_{12} + 2x_5x_{12}) + P(1 - x_3 - x_6 - x_9 + 2x_3x_6 + 2x_3x_9 + 2x_6x_9) \\
 & + P(1 - x_1 - x_2 - x_3 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3) + P(1 - x_4 - x_5 - x_6 \\
 & + 2x_4x_5 + 2x_4x_6 + 2x_5x_6) + P(1 - x_7 - x_8 - x_9 + 2x_7x_8 + 2x_7x_9 + 2x_8x_9) \\
 & + P(1 - x_{10} - x_{11} - x_{12} + 2x_{10}x_{11} + 2x_{10}x_{12} + 2x_{11}x_{12}) \\
 & + P(1 - x_2 - x_3 - x_5 - x_6 + x_2x_3 + x_2x_5 + x_2x_6 + x_3x_5 + x_3x_6 + x_5x_6) \\
 & + P(1 - x_1 - x_2 - x_{11} - x_{12} + x_1x_2 + x_1x_{11} + x_1x_{12} + x_2x_{11} + x_2x_{12} + x_{11}x_{12}) \\
 & + P(1 - x_1 - x_3 - x_8 - x_9 + x_1x_3 + x_1x_8 + x_1x_9 + x_3x_8 + x_3x_9 + x_8x_9) \\
 & + P(1 - x_4 - x_6 - x_7 - x_9 + x_4x_6 + x_4x_7 + x_4x_9 + x_6x_7 + x_6x_9 + x_7x_9) \\
 & + P(1 - x_4 - x_5 - x_{10} - x_{12} + x_4x_5 + x_4x_{10} + x_4x_{12} + x_5x_{10} + x_5x_{12} + x_{10}x_{12}) \\
 & + P(1 - x_{10} - x_{11} - x_7 - x_8 + x_{10}x_{11} + x_{10}x_7 + x_{10}x_8 + x_{11}x_7 + x_{11}x_8 + x_7x_8) \quad (62)
 \end{aligned}$$

A equação (61) é uma generalização para todas as formas do aTSP com $n = 4$. Para especificar o problema, precisamos construir a matriz distância d_{ij} e encontrar qual constante P melhor adéqua o modelo.

5.2 HAMILTONIANO DE ISING E SUA RELAÇÃO COM O QUBO

Muitos sistemas físicos e químicos podem ser representados por um grafo onde os vértices são moléculas sujeitas a interações locais. O modelo matemático mais simples de tal arranjo é conhecido como *Modelo de Ising* (proposto por *Ernest Ising* em 1925).

No presente trabalho, analisaremos a formulação que consiste em variáveis discretas, de valores -1 ou 1, representando o *momento de dipolo magnético nuclear*². Os spins são arranjados nos vértices dos grafos, onde ocorre a interação local, representada pelas respectivas arestas conectando cada vértice. Assumimos que o estado de energia do sistema, depende apenas da configuração dos spins no grafo. Sendo estabelecido, que para sistemas termodinamicamente isolados a energia total será minimizada.

Na presença de um campo magnético externo B , a descrição matemática associada ao nosso problema é a seguinte: Encontrar uma expressão analítica para a função

²Momento magnético dos núcleos atômicos, também conhecido como *spin*.

de partição

$$Q = \sum \exp(-E/kT) \quad (63)$$

onde,

$$E = - \sum_{i,j} U \sigma_i \sigma_j + \mu B \sum_i \sigma_i \quad (64)$$

sendo k a *Constante de Boltzmann*, E a energia total do sistema, $\sigma_{i,j}$ as variáveis de spin e μ o momento magnético (BRUSH, 1967). Essa é a formulação clássica do problema em termos da função de partição, tal qual utilizamos para encontrar as variáveis termodinâmicas de interesse do sistema. Usualmente, utilizamos o modelo de Ising a partir de um *Hamiltoniano de Ising* que possui semelhanças com o modelo apresentado.

Consideramos um grafo $G = (N, A)$, onde para cada vértice $i \in N$ existe uma variável binária σ_i representando o spin tal que $\sigma_i \in \{-1, 1\}$. Para cada vértice adjacente $(i, j) \in A$ em que $i, j \in N$, existe uma variável J_{ij} representando o acoplamento entre os spins atômicos. Na presença de um campo magnético externo h_i , atuando sob o vértice i , a energia total de uma configuração específica é dada pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_i h_i \sigma_i \quad (65)$$

A notação $\langle ij \rangle$ é utilizada para especificar que os vértices i e j são vizinhos. Para cada valor de energia, a configuração do sistema pode ser encontrada através da função de partição (equação 63).

5.2.1 QUBO para Ising

Como dito anteriormente, estamos interessados em escrever problemas do tipo QUBO na formulação de Ising, que é mais adequada para a computação quântica. Vimos que a formulação geral de um QUBO é dada pela equação 60, onde as variáveis x_i possuem valores $x_i = 0$ ou $x_i = 1$ (i.e. dada a função custo $E(x)$ o valor mínimo/máximo será dado por uma configuração de variáveis binárias x_i com valores de 0 ou 1). Porém queremos encontrar uma forma de reescrever $E(x)$ em termos de variáveis que representam os spins atômicos, assim como no modelo de Ising, i.e., $x_i \in \{-1, 1\}$. Para fazer isto, (LUCAS, 2014) introduziu a seguinte mudança de variáveis:

$$x_i \longrightarrow \frac{(1 - \sigma_i^z)}{2} \quad (66)$$

onde σ_i^z é o operador Pauli-Z relacionado a variável i . Assim, se x for a configuração correspondente ao menor valor de energia da função $E(x)$, o estado $|x\rangle$ será um auto-estado do operador Hamiltoniano H , correspondente ao estado fundamental de energia do sistema.

Utilizando a notação explicitada na equação 10, podemos reescrever a equação 66 em termos de produtos tensoriais de portas $\sigma^z = Z$, por exemplo,

$$x_5 \longrightarrow \frac{1}{2}(I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes (I - Z) \otimes I), \quad \text{para } N = 6. \quad (67)$$

Dessa forma, conseguimos escrever as equações 61 e 62 no formalismo de Ising. A título de exemplo, a forma explícita do Hamiltoniano de Ising que representa a codificação da função custo do sTSP pode ser encontrada no APÊNDICE B.

5.3 COMENTÁRIOS

Vimos que o método de *Glover*, o qual é baseado em teorias bem conhecidas de otimização, é uma ferramenta útil em situações em que um problema restrito deve ser traduzido de alguma maneira em um problema irrestrito especialmente na computação quântica, onde podemos utilizar a forma irrestrita da função custo para mapear um Hamiltoniano de Ising. Voltando as diferentes formulações citadas no capítulo anterior, vimos que ao utilizar o método de *Glover* o número de restrições é um fator limitante tão relevante quanto o número de variáveis, uma vez que formulações com muitas restrições levam a funções custos irrestritas com muitas variáveis de escolha.

Como visto no capítulo 3, podemos utilizar o VQE e o QAOA para encontrar a configuração que minimiza a energia de um sistema descrito por um Hamiltoniano de Ising. Assim sendo, no próximo capítulo estudaremos a performance de tais algoritmos ao resolver o TSP a partir da formulação apresentada.

6 RESOLVENDO O TSP UTILIZANDO ALGORITMOS HÍBRIDOS: EXPERIMENTOS E RESULTADOS

Neste capítulo serão apresentados os resultados da aplicação dos algoritmos híbridos estudados com relação as instâncias propostas do problema do caixeiro viajante. Os experimentos foram realizados na plataforma *Open Source SDK* da *QISKIT*, onde é possível trabalhar com simuladores e computadores quânticos reais. No presente trabalho, utilizamos o *Aer Simulator*.

6.1 INSTÂNCIAS SIMÉTRICAS: COMPARANDO VQE E QAOA

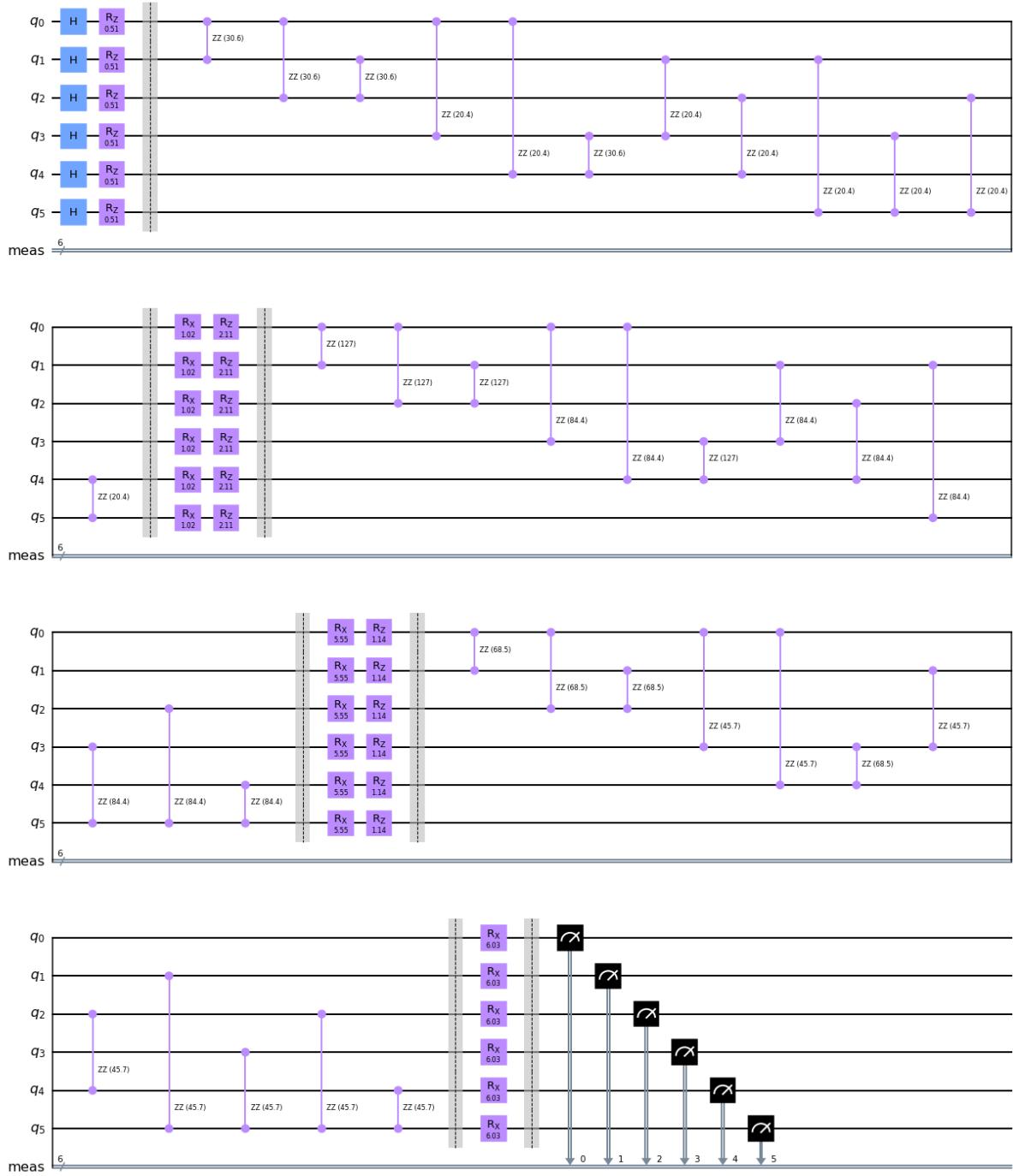
Os experimentos para o sTSP foram realizados sob as seguintes matrizes distâncias:

$$D_1 = \begin{bmatrix} 0 & 12 & 14 & 17 \\ 12 & 0 & 15 & 18 \\ 14 & 15 & 0 & 29 \\ 17 & 18 & 29 & 0 \end{bmatrix}. \quad D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 10 & 15 & 20 \\ 10 & 0 & 35 & 25 \\ 15 & 35 & 0 & 30 \\ 20 & 25 & 30 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ambas as instâncias foram testadas no VQE e QAOA. Para o QAOA, uma implementação do algoritmo com p constante, apresentado no capítulo 3.3, foi feita e testada. Para essa variação do algoritmo, utilizamos o método de *Glover* a fim de escrever o problema como um Hamiltoniano de Ising, como estudado no capítulo anterior. Uma vez que encontramos os Hamiltonianos, codificamos no circuito os respectivos operadores de mistura e operadores *gamma*. Isso pode ser feito através de rotações específicas dos qubits que caracterizam o circuito, e o método de otimização escolhido foi o *Sequential Least Squares Programming* (utilizado através da classe *minimize* da biblioteca *Scipy*). A Figura 11 apresenta o circuito final obtido (e as Figuras 12 e 13 os respectivos resultados). Os histogramas apresentam a distribuição de probabilidade para as possíveis configurações medidas na simulação. No eixo inferior, vemos os estados e no eixo lateral suas respectivas probabilidades.

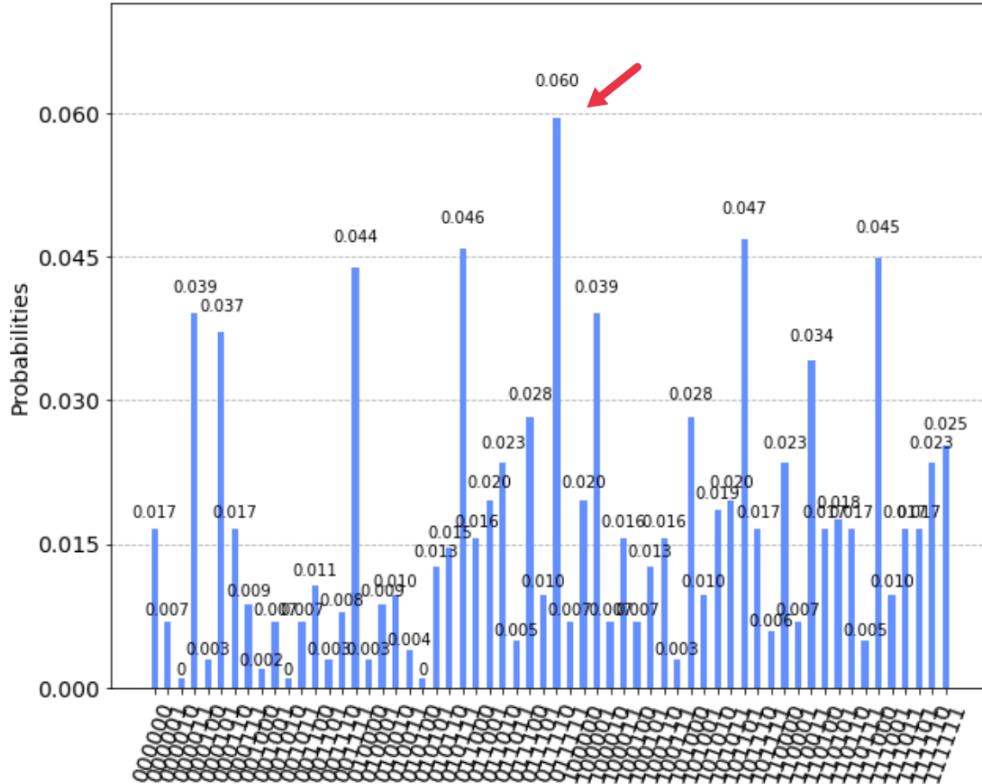
Para os experimentos realizados com o VQE, utilizamos a classe implementada pelo time de desenvolvimento da plataforma *QISKIT*, sendo *TwoLocal* o Ansatz de escolha, apresentado na figura 14 (a figura 15 traz os resultados obtidos). Adicionalmente, para estudarmos o impacto do Ansatz na performance do algoritmo, um segundo circuito variacional foi implementado e testado, sendo este apresentado na Figura 16 e seus respectivos resultados nas Figuras 17 e 18.

Figura 11: Circuito final QAOA. A configuração de portas lógicas é a mesma para ambas as instâncias, mudando apenas os ângulos de rotação aplicados.



Fonte: De autoria própria.

Figura 12: Resultados obtidos utilizando o QAOA para instância ts_{01} . Podemos notar que o estado com maior probabilidade foi 011110 (indicado em vermelho), com valor da função custo avaliado em 64, que corresponde a configuração que minimiza a função objetivo da instância.



Fonte: De autoria própria.

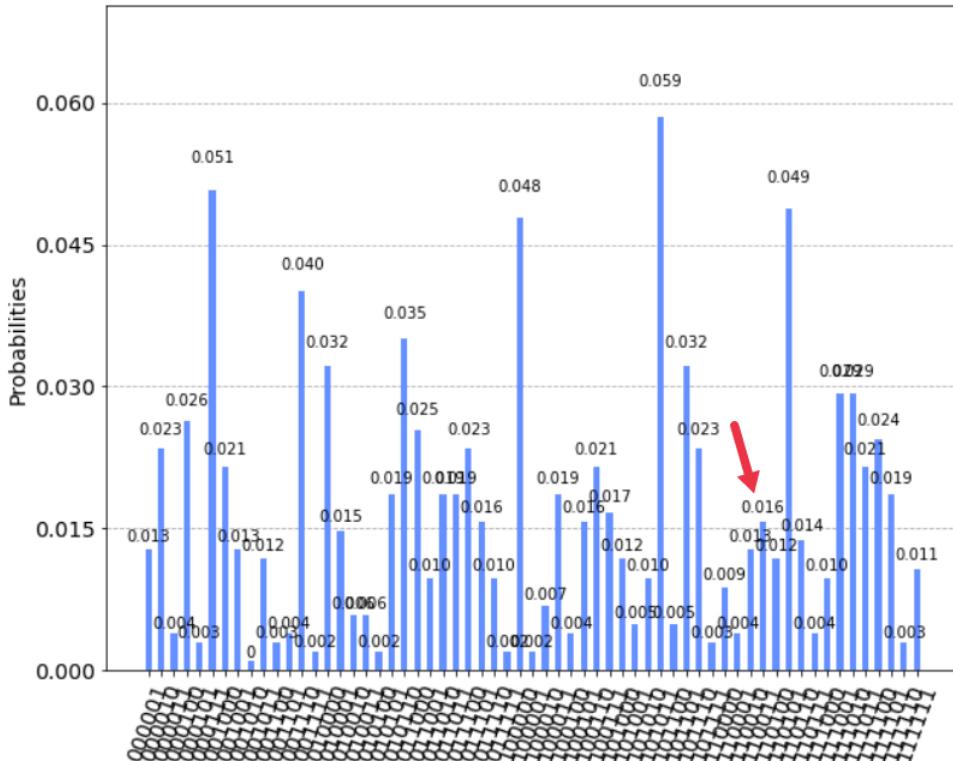
6.2 UTILIZANDO VQE PARA A INSTÂNCIA NÃO SIMÉTRICA

Para o aTSP realizamos experimentos apenas com a seguinte matriz de distâncias:

$$D_3 = \begin{bmatrix} 0 & 10 & 15 & 20 \\ 12 & 0 & 35 & 25 \\ 7 & 36 & 0 & 30 \\ 20 & 4 & 30 & 0 \end{bmatrix}.$$

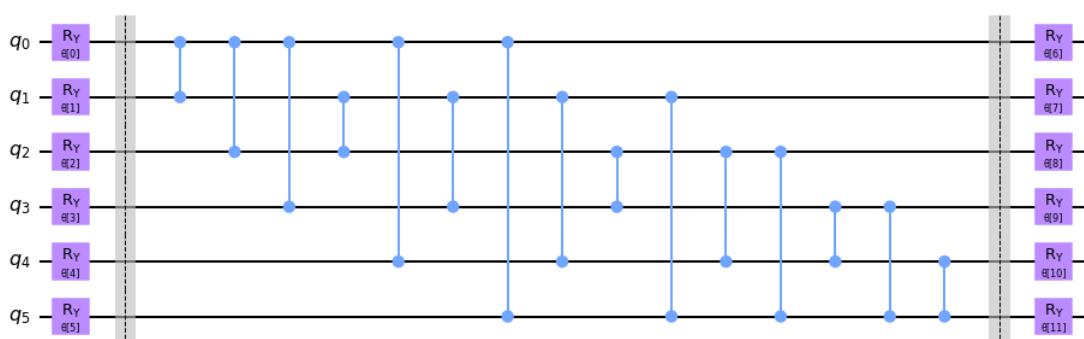
Levando em conta os resultados apresentados para o caso simétrico, assim como o aumento do número de qubits necessários para a simulação, optamos nesse experimento utilizar apenas o VQE, sendo o *TwoLocal* o Ansatz de escolha, uma vez que ele apresentou melhores resultados nas simulações apresentadas anteriormente. A forma do Ansatz é ilustrado na Figura 19. O resultado encontrado é apresentado na Figura 20, a performance do procedimento foi satisfatória sendo que o valor exato foi determinado com probabilidade igual a um.

Figura 13: Resultados obtidos utilizando o QAOA para instância ts_{02} . Nessa instância, observamos um histograma com uma distribuição mais esparsa, e o estado correspondente a resposta correta do problema, 110011 (indicada em vermelho), com baixo valor de probabilidade, apesar da função custo chegar ao seu valor mínimo (no caso o valor 80).



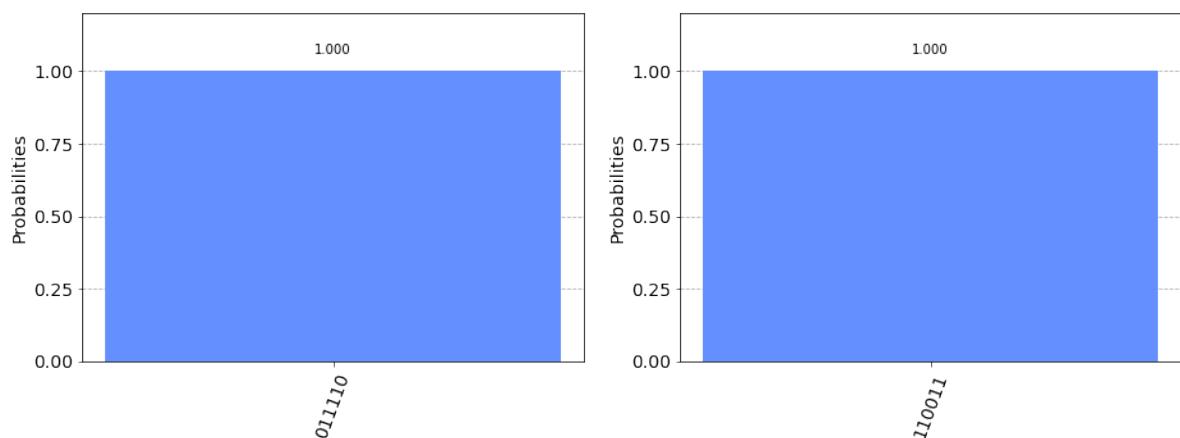
Fonte: De autoria própria.

Figura 14: Ansatz *TwoLocal* utilizado para as instâncias simétricas do TSP. Os elementos R_y são portas de rotação em torno do eixo y para os respectivos qubits. Já os elementos em azul são portas R_z controladas, que realizam uma rotação em torno do eixo z no qubit alvo caso o qubit de controle esteja no estado 1.



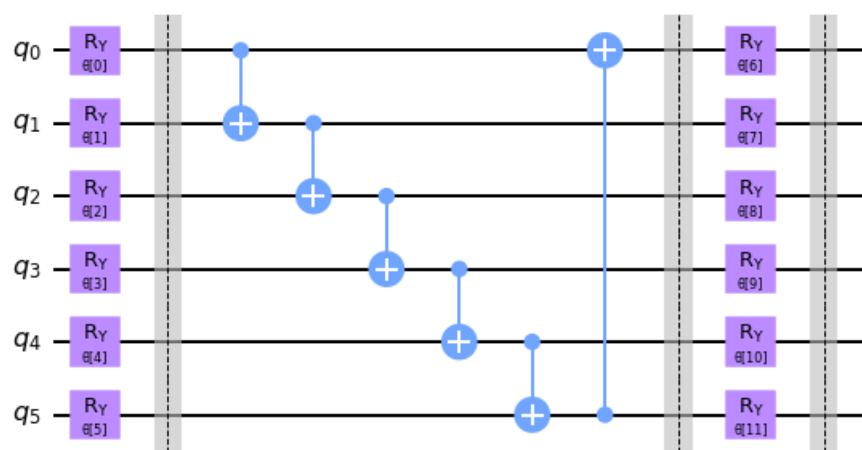
Fonte: De autoria própria.

Figura 15: Resultados obtidos com VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas. Esquerda: Histograma para instância ts_{01} . Direita: Histograma para instância ts_{02} . Em ambos os experimentos a rotina encontrou o autovalor correspondente ao estado fundamental igual ao valor mínimo da função custo correspondente à instância.



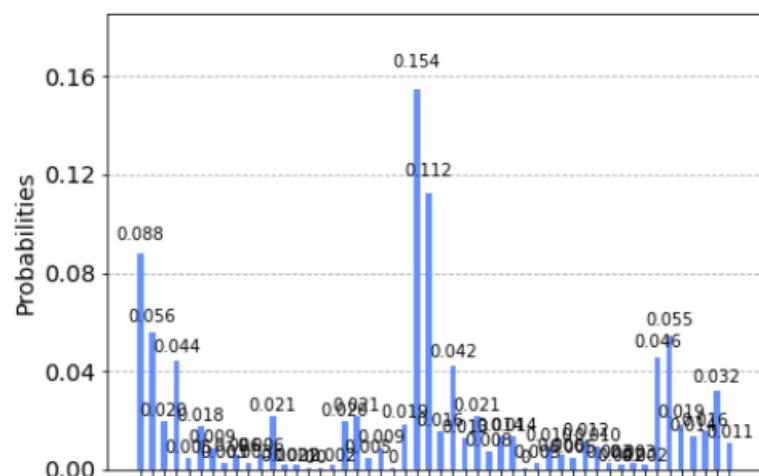
Fonte: De autoria própria.

Figura 16: Ansatz variado.



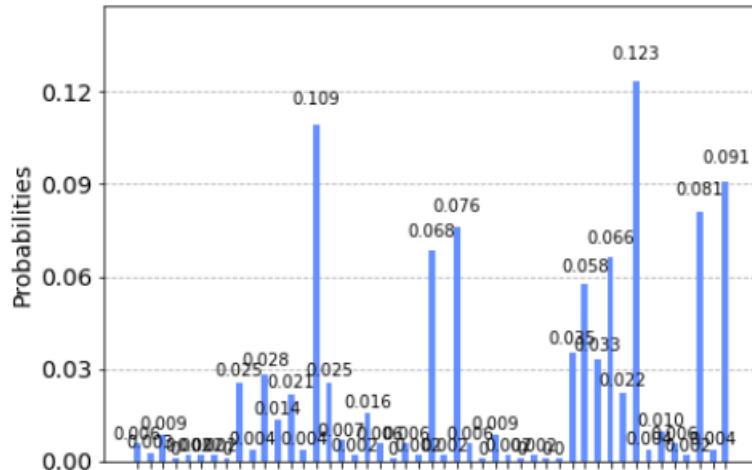
Fonte: De autoria própria.

Figura 17: Figura ilustrando os resultados do VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas utilizando o Ansatz variado. Histograma com a resposta do VQE para a instância ts_{01} . Aqui foram omitidas as strings pois o objetivo era apenas ilustrar os resultados esparsos.



Fonte: De autoria própria.

Figura 18: Figura ilustrando os resultados do VQE, no simulador, para as duas instâncias simétricas utilizando o Ansatz variado. Histograma com a resposta para ts_{02} . Aqui também foram omitidas as strings pois o objetivo era apenas ilustrar os resultados esparsos.



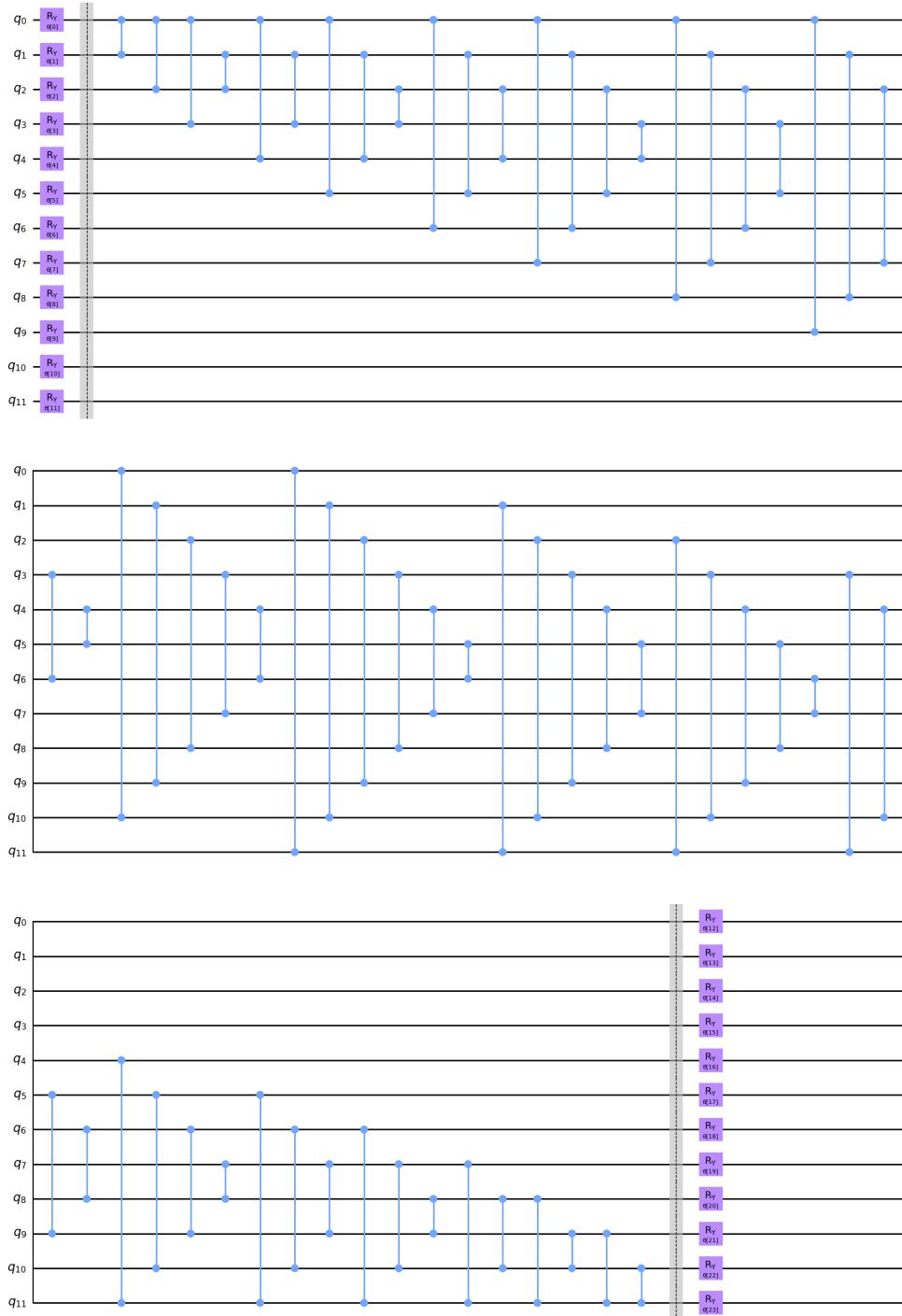
Fonte: De autoria própria.

6.3 COMENTÁRIOS

Os problemas e instâncias avaliados possuem dimensões consistentes com nosso propósito de prova de conceito e avaliação de viabilidade. Com relação aos problemas simétricos, o VQE apresentou uma performance notável, por outro lado, o QAOA apresentou resultados não satisfatórios. Como explicado anteriormente, o QAOA possuirá um desempenho superior para casos em que a constante p for grande (i.e. casos em que o Ansatz possui muitas camadas). Porém isso representa circuitos com maior profundidade, e consequentemente circuitos que requerem um tempo maior de coerência. No problema do *MAXCUT* apresentado no capítulo 3.3.4, a resposta é obtida de forma satisfatória para $p = 1$, como mostrado por (FARHI; GOLDSTONE; GUTMANN, 2014). Em nosso experimento, tomamos $p = 3$, e de fato para a instância ts_{01} mesmo se fizéssemos medidas esparsas conseguíramos obter o valor ótimo. No entanto, para a instância ts_{02} , precisaríamos de uma amostra densa para obter o resultado correto. Se o padrão for repetido para instâncias maiores do que as estabelecidas no problema, pode ser desvantajoso utilizar o QAOA em comparação com o VQE.

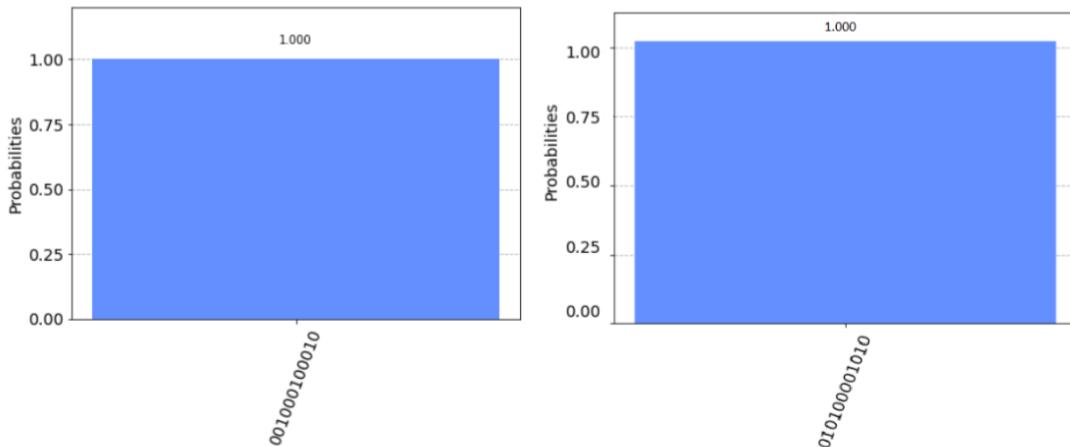
O VQE, utilizado com o Ansatz *Two Local* em duas versões com 24 e 48 parâmetros, apresentou um desempenho instável (sem convergir para determinados valores iniciais que são gerados de forma aleatória) para o caso assimétrico. Futuras investi-

Figura 19: Ansatz two-local, da Qiskit, para a instância ts03. Percebe-se que a estrutura possui profundidade severa, resultando assim em uma convergência robusta para o resultado exato.



Fonte: De autoria própria.

Figura 20: Resultado obtido aplicando o VQE, no simulador, para a instância não simétrica ts_{03} . Neste experimento, a rotina encontrou o autovalor correspondente ao estado fundamental igual ao valor mínimo da função custo correspondente à instância. No entanto, o resultado ilustrado no histograma abaixo corresponde ao estado obtido que não é o exato (esquerda). Para uma configuração com 48 parâmetros o tour mínimo também foi atingido com o histograma (a direita) contendo o estado correto (apresentado na Tabela 4).



Fonte: De autoria própria.

gações precisam determinar se a natureza da instabilidade para poucos parâmetros está ligada ao número maior de variáveis do problema, ao desempenho do otimizador adotado ou devido a algum outro atributo desconhecido da caixa preta do VQE adotada para este fim.

Por fim, cabe comentar a importância do Ansatz no processo de convergência do algoritmo. Para as instâncias simétricas, a escolha do Two Local apresentou uma performance superior à versão variada mesmo ambas possuindo um número idêntico de parâmetros. Esse resultado pode ser observado nas figuras 16 e 17, onde a distribuição do histograma obtido pelo VQE é esparsa, e o estado final obtido não foi o correto. Outro fator importante é o estado inicial dado como input no algoritmo de otimização, tanto para o VQE quanto para o QAOA. Como a função objetivo é uma função multi-dimensional e multimodal, escolher um bom ponto de partida é uma tarefa relevante para a convergência do algoritmo.

7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

No presente trabalho, analisamos um método matemático com o intuito de formular o problema do caixeiro viajante de maneira a tornar possível a sua resolução com a utilização de computadores quânticos. Através do método de Glover, transformamos as duas formulações escolhidas - o problema de Programação Linear Inteira e o de Programação Quadrática Binária Irrestrita - para finalmente escrever-las como um Hamiltoniano de Ising, a ponto de utilizarmos algoritmos variacionais em busca de uma solução viável. Tivemos por objetivo o teste de conceito do método apresentado, e a comparação da performance de dois algoritmos variacionais aplicados ao método, o VQE e o QAOA.

As instâncias do problema escolhidas possuem dimensão reduzida, com apenas quatro cidades. Mesmo para esses casos simples, no cenário não simétrico é possível perceber que o número de variáveis escala exponencialmente. O caso simétrico porém, é menos crítico, mas ainda assim possui uma complexidade considerável considerando o aumento do número de cidades. Este é um dos problemas NP-Hard mais famosos, o que impõe desafios severos em grandes dimensões para algoritmos clássicos existentes. A utilização de computadores quânticos na busca de soluções para tais problemas se apresenta como uma possível alternativa no futuro.

O primeiro gargalo referente a aplicações em problemas de larga escala apareceu na formulação de Programação Linear Inteira binária. Uma vez estabelecido o problema, converte-lo para a forma do Hamiltoniano de Ising pode ser uma tarefa simples. Porém a escolha da formulação se mostra importante, porque como já comentado anteriormente, formulações com grande número de restrições levam a Hamiltonianos de Ising com mais variáveis, demandando um número maior de qubits para lidar com o problema. No caso do QAOA, um gargalo é a forma como criamos o operador unitário a partir do hamiltoniano. Além disso, não está claro como o aumento do número de variáveis irá impactar na performance dos algoritmos, levando em conta que para situações reais com centenas de variáveis não será possível realizar um número exponencial de medidas para verificar as strings.

Concluímos que do ponto de vista de prova de conceito, o uso destes algoritmos apresenta resultados apreciáveis, muitas vezes exatos, assim como métodos clássicos como o Simplex. Do ponto de vista da escalabilidade do problema, o VQE parece ser mais adequado, por ter apresentado melhores resultados. Porém, como demonstrado em (ZHOU et al., 2020), ainda não se comprehende totalmente como será o desempenho do QAOA em cenários com um número realmente profundo de camadas.

Em trabalhos futuros, iremos dar um passo a frente na direção de escalar o problema avaliando estes gargalos e suas consequências.

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.
- BORN, Max. Quantenmechanik der Stoßvorgänge. **Zeitschrift für Physik**, Göttingen, 1926.
- BRUSH, Stephen G. History of the Lenz-Ising model. **Reviews of modern physics**, [S.I.], v.39, n.4, p.883, 1967.
- CEREZO, M. et al. Variational Quantum Algorithm. **Nature Communications**, London, v.3, n.1, p.625–644, 2021.
- COOK, William J. **In pursuit of the traveling salesman**: mathematics at the limits of computation. [S.I.]: Princeton university press, 2015.
- DANTZIG, George; FULKERSON, Ray; JOHNSON, Selmer. Solution of a large-scale traveling-salesman problem. **Journal of the operations research society of America**, [S.I.], v.2, n.4, p.393–410, 1954.
- FARHI, E.; GOLDSTONE, J.; GUTMANN, S. A Quantum Approximate Optimization Algorithm. **Arxiv**: <https://arxiv.org/abs/1411.4028>, Arxiv, 2014.
- FARHI, Edward; GOLDSTONE, Jeffrey; GUTMANN, Sam; SIPSER, Michael. **Quantum Computation by Adiabatic Evolution**. [S.I.]: arXiv, 2000. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/quant-ph/0001106>>.
- FEYNMAN, R. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, New York, 1982.
- GAREY, Michael R; JOHNSON, David S. **Computers and intractability**. [S.I.]: free-man San Francisco, 1979. v.174.
- 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.
- GRIFFITHS, David J; SCHROETER, Darrell F. **Introduction to quantum mechanics**. New Jersey: Cambridge university press, 2018.

- HARROW, Aram W; HASSIDIM, Avinatan; LLOYD, Seth. Quantum algorithm for linear systems of equations. **Physical review letters**, [S.I.], v.103, n.15, p.150502, 2009.
- JOHNSON, Mark W et al. Quantum annealing with manufactured spins. **Nature**, [S.I.], v.473, n.7346, p.194–198, 2011.
- KITAEV, A. Yu. **Quantum measurements and the Abelian Stabilizer Problem**. [S.I.]: arXiv, 1995. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/quant-ph/9511026>>.
- LADD, T. D. et al. Quantum computers. **Nature**, [S.I.], v.464, n.7285, p.45–53, mar 2010.
- LLOYD, Seth. Universal quantum simulators. **Science**, [S.I.], v.273, n.5278, p.1073–1078, 1996.
- LUCAS, Andrew. Ising Formulations of many NP Problems. **Frontiers in Physics**, Frontiers Media, 2014.
- MATAI, Rajesh; SINGH, Surya Prakash; MITTAL, Murari Lal. Traveling salesman problem: an overview of applications, formulations, and solution approaches. **Traveling salesman problem, theory and applications**, [S.I.], v.1, 2010.
- MCMAHON, David. **Quantum computing explained**. 1.ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2007.
- 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.
- OLIVEIRA, Ivan et al. **NMR quantum information processing**. [S.I.]: Elsevier, 2011.
- PARK, James L. The concept of transition in quantum mechanics. **Foundations of physics**, Pullman, Washington, 1970.
- PERUZZO, Alberto et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. **Nature Communications**, London, 2014.
- PISHRO-NIK, Hossein. **Introduction to probability, statistics, and random processes**. [S.I.: s.n.], 2016.
- PRESKILL, John. Lecture Note for Physics: Quantum Information and Computation. **Calif. Inst. Technol.()**, [S.I.], 1998.

- PRESKILL, John. Quantum computing and the entanglement frontier. **arXiv preprint arXiv:1203.5813**, [S.I.], 2012.
- PRESKILL, John. Quantum computing in the NISQ era and beyond. **Quantum**, [S.I.], v.2, p.79, 2018.
- SAKURAI, Jun John; COMMINS, Eugene D. **Modern quantum mechanics, revised edition**. [S.I.]: American Association of Physics Teachers, 1995.
- SHOR, Peter W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: 35TH ANNUAL SYMPOSIUM ON FOUNDATIONS OF COMPUTER SCIENCE, 1994. **Proceedings...** [S.I.: s.n.], 1994. p.124–134.
- SIPSER, Michael. Introduction to the Theory of Computation. **ACM Sigact News**, [S.I.], v.27, n.1, p.27–29, 1996.
- TOCCI, Ronald J. **Sistemas Digitais Princípios e Aplicações**. 5.ed. Rio de Janeiro: PHB, 1994.
- ZHOU, Leo et al. Quantum Approximate Optimization Algorithm: Performance, Mechanism, and Implementation on Near-Term Devices. **Physical Review X**, [S.I.], v.10, n.2, jun 2020.

APÊNDICE A – CÁLCULOS PARA O ATSP

Para utilizar o procedimento de *Glover*, adicionamos à função objetivo penalidades equivalentes às respectivas restrições. Atuamos da seguinte forma:

- Primeiro lidamos com as igualdades utilizando: $x + y = 1 \rightarrow P(1 - x - y + 2xy)$

$$x_4 + x_7 + x_{10} = 1 \rightarrow P(1 - x_4 - x_7 - x_{10} + 2x_4x_7 + 2x_4x_{10} + 2x_7x_{10})$$

$$x_1 + x_8 + x_{11} = 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_8 - x_{11} + 2x_1x_8 + 2x_1x_{11} + 2x_8x_{11})$$

$$x_2 + x_5 + x_{12} = 1 \rightarrow P(1 - x_2 - x_5 - x_{12} + 2x_2x_5 + 2x_2x_{12} + 2x_5x_{12})$$

$$x_3 + x_6 + x_9 = 1 \rightarrow P(1 - x_3 - x_6 - x_9 + 2x_3x_6 + 2x_3x_9 + 2x_6x_9)$$

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_2 - x_3 + 2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3)$$

$$x_4 + x_5 + x_6 = 1 \rightarrow P(1 - x_4 - x_5 - x_6 + 2x_4x_5 + 2x_4x_6 + 2x_5x_6)$$

$$x_7 + x_8 + x_9 = 1 \rightarrow P(1 - x_7 - x_8 - x_9 + 2x_7x_8 + 2x_7x_9 + 2x_8x_9)$$

$$x_{10} + x_{11} + x_{12} = 1 \rightarrow P(1 - x_{10} - x_{11} - x_{12} + 2x_{10}x_{11} + 2x_{10}x_{12} + 2x_{11}x_{12})$$

- Depois lidamos com as desigualdades utilizando: $x + y \geq 1 \rightarrow P(1 - x - y + xy)$

$$x_2 + x_3 + x_5 + x_6 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_2 - x_3 - x_5 - x_6 + x_2x_3 + x_2x_5 + x_2x_6 + x_3x_5 + x_3x_6 + x_5x_6)$$

$$x_1 + x_2 + x_{11} + x_{12} \geq 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_2 - x_{11} - x_{12} + x_1x_2 + x_1x_{11} + x_1x_{12} + x_2x_{11} + x_2x_{12} + x_{11}x_{12})$$

$$x_1 + x_3 + x_8 + x_9 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_1 - x_3 - x_8 - x_9 + x_1x_3 + x_1x_8 + x_1x_9 + x_3x_8 + x_3x_9 + x_8x_9)$$

$$x_4 + x_6 + x_7 + x_9 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_4 - x_6 - x_7 - x_9 + x_4x_6 + x_4x_7 + x_4x_9 + x_6x_7 + x_6x_9 + x_7x_9)$$

$$x_4 + x_5 + x_{10} + x_{12} \geq 1 \rightarrow P(1 - x_4 - x_5 - x_{10} - x_{12} + x_4x_5 + x_4x_{10} + x_4x_{12} + x_5x_{10} + x_5x_{12} + x_{10}x_{12})$$

$$x_{10} + x_{11} + x_7 + x_8 \geq 1 \rightarrow P(1 - x_{10} - x_{11} - x_7 - x_8 + x_{10}x_{11} + x_{10}x_7 + x_{10}x_8 + x_{11}x_7 + x_{11}x_8 + x_7x_8)$$

Assim, a função custo pode ser reescrita como a equação 62.

APÊNDICE B – HAMILTONIANO DE ISING PARA O STSP

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{sTSP} = & \frac{d_1}{2}((I - Z) \otimes I^{\otimes 5}) + \frac{d_2}{2}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) + \frac{d_3}{2}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) + \\
& \frac{d_4}{2}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) + \frac{d_5}{2}(I^{\otimes 4} \otimes (I - Z) \otimes I) + \frac{d_6}{2}(I^{\otimes 5} \otimes (I - Z)) + \\
& P\left(-\frac{3}{2}((I - Z) \otimes I^{\otimes 5}) - \frac{3}{2}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) - \frac{3}{2}(I^{\otimes 2}(I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) + \right. \\
& \left.\frac{2}{4}((I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) + \frac{2}{4}((I - Z) \otimes I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) + \right. \\
& \left.\frac{2}{4}(I \otimes (I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3})\right) + P\left(-\frac{3}{2}((I - Z) \otimes I^{\otimes 5}) - \right. \\
& \left.\frac{3}{2}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) - \frac{3}{2}(I^{\otimes 4} \otimes (I - Z) \otimes I)\right) + \\
& \frac{2}{4}((I - Z) \otimes I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) + \frac{2}{4}((I - Z) \otimes I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes I) + \\
& \frac{2}{4}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I) + P\left(-\frac{3}{2}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) - \right. \\
& \left.\frac{3}{2}(I^{\otimes 3}(I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) - \frac{3}{2}(I^{\otimes 5} \otimes (I - Z)) + \frac{2}{4}(I \otimes (I - Z) \otimes I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) + \right. \\
& \left.\frac{2}{4}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3} \otimes (I - Z)) + \frac{2}{4}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes I \otimes (I - Z))\right) + \\
& P\left(-\frac{3}{2}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) - \frac{3}{2}(I^{\otimes 4} \otimes (I - Z) \otimes I) - \frac{3}{2}(I^{\otimes 5} \otimes (I - Z)) + \right. \\
& \left.\frac{2}{4}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I \otimes (I - Z) \otimes I) + \frac{2}{4}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2} \otimes (I - Z)) + \right. \\
& \left.\frac{2}{4}(I^{\otimes 4} \otimes (I - Z) \otimes (I - Z))\right) + P\left(-\frac{1}{2}((I - Z) \otimes I^{\otimes 5}) - \frac{1}{2}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) + \right. \\
& \left.\frac{1}{4}((I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4})\right) + P\left(-\frac{1}{2}((I - Z) \otimes I^{\otimes 5}) - \frac{1}{2}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) + \right. \\
& \left.\frac{1}{4}((I - Z) \otimes I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3})\right) + P\left(-\frac{1}{2}(I \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 4}) - \right. \\
& \left.\frac{1}{2}(I^{\otimes 2} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3}) + \frac{1}{4}(I \otimes (I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 3})\right) + \\
& P\left(-\frac{1}{2}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes I^{\otimes 2}) - \frac{1}{2}(I^{\otimes 4} \otimes (I - Z) \otimes I)\right) + \\
& \frac{1}{4}(I^{\otimes 3} \otimes (I - Z) \otimes (I - Z) \otimes I) + 20P(I^{\otimes 6}).
\end{aligned}$$