Generant Imatges amb un Ordinador Quàntic

TREBALL DE RECERCA DE BATXILLERAT

IES MIQUEL TARRADELL

Autor:

Tomàs Ockier Poblet
2nd Batxillerat
ockier1@gmail.com

Tutor:

Tomàs Ockier Poblet

Institut Miquel Tarradell

26 d'octubre de 2021
Barcelona, Barcelona

Índex

Introducció

Desde hace más de un año, me he dedicado a estudiar computación cuántica durante mi tiempo libre. Buscaba investigar un campo relacionado con la mecánica cuántica, pero sin que sea muy complicado, que se pueda entender a un nivel teórico y que me entusiasme.

La Computación Cuántica encaja perfectamente con esos criterios. Es más sencilla que la mecánica cuántica debido a que no está basada en cálculo o ecuaciones diferenciales, se basa en la álgebra lineal, utilizando valores discretos, vectores y matrices. Además si se trabaja a un nivel teórico sencillo, no se tienen en consideración las interpretaciones físicas, lo cual simplifica mucho las cosas. Cuanto más me adentraba, más ganas tenía de seguir.

Mi parte favorita de este campo es el Quantum Machine Learning que consiste en diseñar y aplicar conceptos de Machine Learning a los ordenadores cuánticos, como por ejemplo implementar cuánticamente las famosas Redes Neuronales, que están detrás de la mayoría de inteligencias artificiales que vemos hoy en día [1].

QML es un campo de investigación joven y en crecimiento debido a que sus algoritmos son ideales para implementarlos con los ordenadores cuánticos actuales, los cuales no son muy potentes. Ejemplos de estas implementaciones serían [insertar aplicaciones aquí], etc.

De entre todos los tipos de algoritmos me he centrado en las Redes Neuronales Cuánticas, análogas cuánticas de las Redes Neuronales tan utilizadas hoy en día para hacer gran variedad de tareas. Me he interesado particularmente en ellas debido a que tenía experiencia en el pasado con las RNs clásicas y había visto que existen frameworks de software para trabajar con ellas como TensorFlow Quantum [2] que me podían ayudar.

Para adentrarme en el campo de QML, he tenido que adquirir conocimientos en álgebra lineal, cálculo y física. Dentro de QML en concreto me he dedicado a leer papers que me interesan y en un par de ocasiones intentar implementar los algoritmos detallados en esos papers. Puede parecer algo imposible en principio debido a que no tengo acceso directo a un ordenador cuántico, no obstante estos no son necesarios debido a que las operaciones cuánticas pueden ser simuladas en un ordenador corriente de escritorio (con ciertas limitaciones). Pero puedo tener acceso a ordenadores cuánticos ya que IBM permite acceder a los

suyos mediante IBM Quantum Experience [3], aunque nunca he dado uso de ello debido a que no lo veía necesario.

En este trabajo de investigación me he propuesto implementar mediante código uno de los algoritmos que he visto en un paper, una Red Adversaria Generativa Cuàntica (GAN, en inglés) [4] que genera imágenes a partir de un circuito cuántico [5]. Como objetivo tengo verificar una sugerencia que hacen los autores del paper: implementar una función no-lineal en una parte del algoritmo que podría mejorar el rendimiento de este. Mi hipótesis al igual que los autores (aunque ellos lo comentan muy brevemente) es que el algoritmo va a reducir ligeramente el número de interacciones que son necesarias para llegar a su punto óptimo. Es decir, el modelo con la función no-lineal va a necesitar menos operaciones que lo entren conseguir los mismos resultados que el modelo sin la función.

Part I

Marc Teòric

Capítol 1

Àlgebra lineal

Quan vaig començar a buscar informació sobre computació quàntica, en vaig ràpidament donar compte que necessitava molt més coneixement matemàtic, degut a que no entenia gairebé res dels llibres sobre computació quàntica. Arran aquell temps, una serie de vídeos sobre àlgebra lineal en va captar l'atenció, que es justament la branca de les matemàtiques sobre la qual es basa la computació quàntica. Els vídeos son les lliçons que dona el Professor Gilbert Strang al Institut Tecnològic de Massachusetts (MIT en anglès) [6, 7]. Una vegada havia vist gairebé tots els vídeos, ja tenia bastants conceptes apresos.

Aquelles lliçons es van ajudar a entendre les matemàtiques de *Quantum Computation and Quantum Information* [8] i *Quantum Computing: A Gentle Introduction*. A poc a poc, vaig anar aprenent els fundaments matemàtics de la computació quàntica i mecànica quàntica.

En aquesta secció aniré explicant els conceptes bàsics de l'àlgebra lienal, per formar els coneixements en matemàtiques necessaris per poder comprendre aquest treball.

1.1 Vectors i espais vectorials

Els objectes fonamentals de l'àlgebra lineal són els espais vectorials. Un espai vectorial es el conjunt de tots els vectors que tenen les mateixes dimensions. Per exemple $\mathbb{R}^3$ seria el espai vectorial de tots els vectors de 3 dimensions, aquests

vectors normalment s'utilitzen per representar punts en un espai tridimensional. En computació quàntica un tipus d'espais vectorials en concret són utilitzats: Els espais de Hilbert, en altres paraules, un espai vectorial amb un producte interior [9]. Els espais de Hilbert segueixen un conjunt de productes i compleixen unes certes normes, en aquest capítol presentaré una part d'aquestes normes i productes, la quantitat que és necessària. S'ha de tenir en compte que els espais de Hilbert són molt més complicats que el que es representa en aquest treball, també que d'aquí en endavant, quan mencioni espai vectorial hem referiré a un espai de Hilbert, d'ha no ser que s'especifiqui el contrari.

Els espais vectorial estan definits per les seves bases, un set de vectors $B = \{|v_1\rangle, \ldots, |v_n\rangle\}$ es una base vàlida per l'espai V, si cada vector $|v\rangle$ en l'espai es pot escriure com $|v\rangle = \sum_i a_i |v_i\rangle$ per $|v_i\rangle \in B$. Els vectors de la base B són linealment independent entre ells.

La notació estàndard pels conceptes de àlgebra lienal en mecànica quàntica es la notació de Dirac, en la qual es representa un vector com $|\psi\rangle$. On ψ es la etiqueta del vector. Un vector $|\psi\rangle$ amb n dimensions també pot ser representat com una matriu columna que te la forma:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{n-1} \\ z_n \end{bmatrix}$$

On els nombres complexes $(z_1, z_2, \ldots, z_{n-1}, z_n)$ són els seus elements. Un vector escrit com a $|\psi\rangle$ també s'anomena *ket*.

La adició d'un par de vectors en un espai de Hilbert es definida per [1]:

$$|\psi\rangle + |\varphi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{bmatrix}$$

[1] Els vectors d'aquesta definició tenen els seus elements representats per la seva etiqueta i un subscrit e.g. el vector $|\psi\rangle$ te un element qualsevol ψ_1 i el seu primer element es ψ_1. Aquesta notació es seguirà utilitzant al llarg del treball.

A més a més, hi ha una multiplicació per un escalar[2] definida per:

$$z\left|\psi\right\rangle = z\begin{bmatrix}\psi_1\\ \vdots\\ \psi_n\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}z\psi_1\\ \vdots\\ z\psi_n\end{bmatrix}$$

On z es un escalar i $|\psi\rangle$ un vector. Cal que notar que cada element del vector es multiplicar per el escalar.

Degut a que els espais de Hilbert son complexos tenen un conjugat complex definit per escalar com a: Per un escalar complex $z = a + bi$, el seu conjugat z^* es igual a $a - bi$.

Aquesta noció pot ampliar per a vectors i matrius, agafant el conjugat de totes els seus elements:

$$\left|\psi\right\rangle^* = \begin{bmatrix}\psi_1\\ \vdots\\ \psi_n\end{bmatrix} * = \begin{bmatrix}\psi_1^*\\ \vdots\\ \psi_n^*\end{bmatrix}$$

$$A^* = \begin{bmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1} & \cdots & a_m n\end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix}a_{11}^* & \cdots & a_{1n}^*\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1}^* & \cdots & a_m n^*\end{bmatrix}$$

Amb $|\psi\rangle$ sent un vector de dimensions n, i A sent una matriu de dimensions $m \times n$.

Un altre concepte important es la transposada, representada per el superíndex T que 'rota' un vector o una matriu. Un vector columna amb una dimensió $n \times 1$ es transforma amb un vector fila amb una dimensió $1 \times n$[3]:

$$\left|\psi\right\rangle^T = \begin{bmatrix}\psi_1\\ \vdots\\ \psi_n\end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix}\psi_1 & \dots & \psi_n\end{bmatrix}$$

El mateix és cert per les matrius, una matriu $m \times n$ transposada es converteix

[2] Un numero qualsevol en $\mathbb{R}$.

[3] En realitat els vectors columna son matrius amb dimensió $n, 1$ però he estat ometent el 1. Quan hem refereixo a les dimensions de un vector qualsevol, només diré un numero, no obstant, especificaré si és un vector columna o un vector fila.

en una matriu $n \times m$. Per exemple:

$$A^T = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 6 & 4 \\ 2 & 5 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 2 & 6 & 2 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

La composició d'un conjugat complex i la transposada s'anomena el conjugat Hermitià, la seva notació es una † superindexada. Per un vector $|\psi\rangle$ el seu conjugat Hermitià $|\psi\rangle^\dagger$ és:

$$|\psi\rangle^\dagger = (|\psi\rangle^*)^T = \begin{bmatrix} \psi_1^* & \dots & \psi_n^* \end{bmatrix} = \langle\psi|$$

El conjugat Hermitià compleix que $|\psi\rangle^\dagger = \langle\psi|$ i $\langle\psi|^\dagger = |\psi\rangle$.

El conjugat Hermitià d'un vector columna $|\psi\rangle$ s'anomena *bra* o vector dual. En la notació de Dirac un vector dual s'escriu com $\langle\psi|$.

1.2 Operadors lineals

Per poder operar amb vectors i fer operacions amb ells, s'utilitzen les matrius, que també son anomenades mapes lineal o operadors lineal[4], que són noms que descriuen millor com funcionen aquests objectes. La definició formal de un operador lineal pot ser bastant complicada, per aquesta raó, utilitzaré termes més informals al en aquesta secció.

Bàsicament, un operador lineal transforma un vector en un altre vector, aquests vectors poden o no ser de espais diferents [10]. Més formalment, per un vector $|v\rangle$ en un espai V i un vector $|w\rangle$ en un espai W, un operador lienal A entre els vectors, fa l'acció:

Bàsicament, un operador lineal transforma un vector en un altre vector, aquest vector poden o no ser de espais diferents [10]. Més formalment, per un vector $|v\rangle$ en un espai V i un vector $|w\rangle$ en un espai W, un operador lienal A entre els vectors, fa l'acció:

$$A\,|v\rangle = |w\rangle$$

4

En altres paraules, l'operador transforma un element del espai vectorial V en un vector del espai vectorial W. Els operadors lineals han de complir les següents propietats:

1. Addició de vectors:
   Donats els vectors $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$ en un mateix espai vectorial, i un operador lineal A:
   $$A(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = A|\psi\rangle + A|\varphi\rangle$$
2. Producte escalar:
   Donats els vectors $|\psi\rangle$, l'escalar z i l'operador lienal A, es certs que:
   $$A(z|\psi\rangle) = zA|\psi\rangle$$

Aquestes afirmacions han de ser certes per tots els vectors i tots els escalars en els espais on els operadors actuen. Cal notar que un operador lineal no te perquè ser una matriu necessàriament, per exemple, les derivades i les integrals son operadors lineals, això es pot provar fàcilment al veure que compleixen els criteris especificats posteriorment. No obstant, les derivades i les integrals usualment no s'apliquen a vectors, sinó a les funcions, però es possible aplicar-les a vectors [5].

Les matrius només son la representació matricial del operadors lienals [11].

1.1 Tipus d'operadors lineals

En la secció actual, exposaré els tipus bàsics d'operadors lineals que són indispensables en la teoria presentada en aquest capítol i la rest del treball.

1. **Operador zero**
   Qualsevol espai vectorial té un vector zero expressat en notació de Dirac com a 0, degut a que $|0\rangle$ es un altre concepte totalment diferent en CQ i IQ[6]. El vector zero es aquell vector que per qualsevol vector $|\psi\rangle$ i qualsevol escalar z, es compleix que: $|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle$ i $z0 = 0$.
   El operador zero també s'escriu com a 0 i es defineix com l'operador que tranforma qualsevol vector al vector zero: $0|\psi\rangle = 0$.

[5] No et preocupis, que es clar que les aplicaré a vectors :D.
[6] Computació Quàntica i Informació Quàntica.

2. **Matriu inversa**
   Un matriu quadrada[7] A és invertible si existeix una matriu A^{-1} de manera que $AA^{-1} = A^{-1}A$. $A^{-1} = I$ és la matriu inversa de A. La manera més ràpida de saber si una matriu es invertible es veient si el seu determinant no és zero. En altres paraules, és l'element neutre per la suma i l'element null per la multiplicació.

3. **Operador Identitat**
   Per a qualsevol espai vectorial V existeix un operador identitat I que es definit com $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$, aquest operador no fa cap canvi al vectors als quals opera. Cal notar també que per qualsevol matriu A i la seva inversa és veritat que $AA^{-1} = I$.

4. **Operador Unitari**
   Un operador unitari es qualsevol operador que no altera la norma dels vectors al quals es aplicat, per tant, una matriu es unitària si $AA^{\dagger} = I$ Per convertir qualsevol operador en unitari, es divideix les seves entrades entre la norma del operador.

5. **Operadors Hermitians**
   Un operador Hermitià o *self-adjoint operator* en anglès, es qualsevol operador que el seu conjugat Hermitià es ell mateix: $A = A^{\dagger}$
   Una altre cosa a tenir en compte es que existeix un operador únic A en un espai de Hilbert, de manera que per qualsevol vectors $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$, es compleix que:
   $$\langle\psi|\left(A|\varphi\rangle\right) = \left(A^{\dagger}\langle\psi|\right)|\varphi\rangle$$
   Aquest operador es conegut com el *adjoint* o conjugat Hermitià de A.

1.3 Producte interior i producte exterior

1.1 Producte interior

Un vector dual $\langle\psi|$ i un vector $|\varphi\rangle$ combinats formen el producte interior $\langle\psi|\varphi\rangle$, el qual efectua una operació que agafa els dos vectors com a input i produeix un

[7] Una matriu quadrada és una matriu amb dimensions $n \times n$, on $n \in \mathbb{N}$.

nombre complex com a output:

$$\langle a|b\rangle = a_1b_1 + a_2b_2 + ... + a_{n-1}b_{n-1} + a_nb_n = z$$

Amb $z, a_i, b_i \in \mathbb{C}$. Quan hem refereixo a un producte interior, normalment diré "el producte interior de dos vectors", quan en realitat es una operació entre un vector dual i un vector.

El equivalent d'aquest producte en un espai real de dos dimensions $\mathbb{R}^2$ es el producte escalar, que es expressat com a :

$$\langle a|b\rangle = \||a\rangle\|_2 \cdot \||b\rangle\|_2 \cos\theta \tag{1.1}$$

Amb $\|\cdot\|_2$ sent la norma ℓ^2 definida com a $\||\psi\rangle\|_2 = \sqrt{\psi_1^2 + \cdots + \psi_n^2}$ amb θ sent l'angle entre els vectors $|a\rangle$ i $|b\rangle$. Com he dit l'equació (1.1) és equivalent al producte interior, no obstant, segons el que he vist, no es usada àmpliament ja que interpretar θ com un angle entre vectors de dimensions altes no té molt de sentit. En contrast, he vist aquest producte presentat en la seva interpretació geomètrica[8] com el producte entre un vector fila i un vector columna:

$$\langle a|b\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \cdots a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Ja he definit la norma ℓ_2 com l'arrel quadrada de la suma del elements d'un vector al quadrat:

$$\||a\rangle\|_2 = \sqrt{\sum_i |a_i|^2}$$

No obstant, la definició més comú es basa en el producte interior. Com es pot veure el producte interior de un vector per ell mateix es la suma de les seves entrades al quadrat:

$$\langle a|a\rangle = a_1a_1 + \cdots + a_na_n = a_1^2 + \cdots + a_n^2 = \sum_i |a_i|^2$$

[8] Els detalls exactes de l'interpretació geomètrica estan fora del domini d'aquest treball, malgrat que m'agradaria molt parlar sobre el tema.

Per tant, la norma pot ser definida com l'arrel quadrada del producte interior d'un vector:

$$\| |a\rangle \|_2 = \sqrt{\langle a|a\rangle} \tag{1.2}$$

Quan la norma es aplicada a un vector bidimensional, es pot veure que es lo mateix que la longitud Euclidiana d'aquell vector, això es perquè realment son el mateixos conceptes, tot i això, la norma es el concepte de longitud però generalitzat a vectors de dimensions altes.

Pel el que jo entenc algunes propietats de la longitud d'un vector bidimensional no es mantenen amb la norma d'un vector que te més de 2 dimensions. En altres paraules, la norma es comporta en certes maneres com la distancia des de d'origen (que es la definició de la longitud), per tant, no són exactament lo mateix. A més d'això, hi han diferents tipus de normes que s'utilitzen en diversos escenaris. Aquesta es la raó per la qual en refereixo a la norma, com la norma ℓ^2. A aquesta norma també se li diu norma Euclidiana [12].

1.1.1 Propietats del producte interior

Les propietats bàsiques del producte interior són les següents:

1. És lineal en el segon argument $(z_1 \langle a| + z_2 \langle c|) |b\rangle = z_1 \langle a|b\rangle + z_2 \langle c|b\rangle$
2. Té simetria en el conjugat $\langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^*$
3. $\langle a|a\rangle$ es no-negativa i real, excepte en el cas de $\langle a|a\rangle = 0 \Leftrightarrow |a\rangle = 0$

1.2 Vectors ortonormals i ortogonals

A partir del concepte de norma sorgeixen els conceptes de un par de vectors ortonormals i un par de vectors ortogonals [9]. Mirant l'equació (1.2) podem veure que si el producte interior del vector és 1, la norma del mateix vector també és 1. Un vector que té norma 1, és un vector unitari. D'aquesta manera, si el producte interior d'un vector és 1, és un vector unitari.

[9] Una nota graciosa, la primera vegada que vaig trobar aquest dos conceptes els vaig confondre i pensava que eren la mateixa cosa, això hem va confondre moltíssim i no entenia gairebé res.

De vectors que no són zero son ortogonals si el seu producte interior és zero. Si aquests vectors són de bidimensionals, a partir de l'equació (1.1) podem veure que l'angle que fan entre ells és zero i per tant son perpendiculars entre ells:

Per $|a\rangle$ i $|b\rangle \neq 0$:

Si $\langle a|b\rangle = 0$ tenim que: $\||a\rangle\|_2 \cdot \||b\rangle\|_2 \cos\theta = 0$

Perquè $|a\rangle$ i $|b\rangle$ no son zero, les seves normes no són zero.

Per tant el terme que falta $\cos\theta$ és igual a zero.

D'aquesta manera, l'angle θ ha de ser $\frac{\pi}{2}$.

No obstant, pensar que la perpendicularitat i la ortogonalitat són els mateixos conceptes es un error, degut a que, el que siguin només es veritat per els vectors bidimensionals. Perquè com en el cas de la norma i la longitud, la ortogonalitat és el concepte de perpendicularitat generalitzat.

Quan barregem els conceptes de vector unitari i vectors ortogonals arribem a la ortonormalitat [9]. Un parell de vectors que no són zero, són ortogonals quan els dos són unitaris i també són ortogonals entre ells:

$$|a\rangle \text{ and } |b\rangle \text{ son ortonormals si: } \begin{cases} \langle a|b\rangle = 0 \\ \langle a|a\rangle = 1 \\ \langle b|b\rangle = 1 \end{cases}$$

Els vectors ortonormals són importants, àmpliament utilitzats tant en computació quàntica com en mecànica quàntica perquè serveixen per crear bases vectorials molt útils.

Una altre cosa que remarcar i no he dit es que al dir un par de vectors, aquest par també pot ser un set de vectors. Si un set té tots els vectors unitaris i ortogonals entre tots ells, és un set de vectors ortonormals. El set de vectors $B = \{|\beta_1\rangle, |\beta_2\rangle, ..., |\beta_{n-1}\rangle |\beta_n\rangle\}$ és ortonormal si $\langle\beta_i|\beta_j\rangle = \delta_{ij} \forall i, j$ [9] on δ_{ij} és el Kronecker delta, definit com: :

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

1.3 Producte exterior

El producte exterior és una funció (expressada com $|a\rangle\langle b|$, amb $|a\rangle$ i $|b\rangle$ sent vectors) que agafa dos vectors i produeix un operador lineal com output. Al contrari que el producte interior, no hi ha un producte equiparable en les matemàtiques ensenyades al institut, i és una mira difícil d'entendre perquè agafa dos vectors que poden ser d'un espai diferent com input. És definit com:

Per els vectors $|v\rangle$ i $|v'\rangle$ amb dimensions m i el vector $|w\rangle$ de dimensió n. El producte exterior és l'operador lineal A de dimensions $m \times n$ en l'espai $\mathrm{Mat}_{m\times n}$:

$$|v\rangle\langle w| = A \text{ with } A \in \mathrm{Mat}_{m\times n}.$$

Amb la seva acció definida per:

$$(|v\rangle\langle w|)\,|v'\rangle \equiv |w\rangle\langle v|v'\rangle = \langle v|v'\rangle\,|w\rangle \tag{1.3}$$

A partir de l'equació (1.3) l'utilitat i significat del producte es bastant complicada d'entendre, per tant exposaré la manera de computar-lo per clarificar com funciona. Per dos vectors $|a\rangle$ i $|b\rangle$ de dimensions m i n respectivament, el seu producte interior es computa multiplicant cada element de $|a\rangle$ per cada elment de $|b\rangle$ formant una matriu amb mida $m \times n$:

$$|a\rangle\langle b| = \begin{bmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 & \cdots & a_1b_n \\ a_2b_1 & a_2b_2 & \cdots & a_2b_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_mb_1 & a_mb_2 & \cdots & a_mb_n \end{bmatrix}$$

L'utilitat d'aquest producte és mostrara més endavant.

1.4 Producte tensorial

L'últim producte que mencionaré és el tensorial, representat per el símbol $\otimes$. Aquest producte s'utilitza per crear espais vectorials més grans combinant espais vectorials més petits. La definició formal és bastant complicada, per tant en

centraré en explicar la manera amb la qual es computa utilitzant la representació matricial d'aquest producte, anomenada el producte de Kronecker.

Per una $m \times n$ A, i una $p \times q$ matriu B, el seu producte de Kronecker [13] és la matriu de mida $pm \times qn$:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & \cdots & a_{11}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{11} & a_{1n}b_{12} & \cdots & a_{1n}b_{1q} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & \cdots & a_{11}b_{2q} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{21} & a_{1n}b_{22} & \cdots & a_{1n}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{11}b_{p1} & a_{11}b_{p2} & \cdots & a_{11}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{1n}b_{p1} & a_{1n}b_{p2} & \cdots & a_{1n}b_{pq} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}b_{11} & a_{m1}b_{12} & \cdots & a_{m1}b_{1q} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{11} & a_{mn}b_{12} & \cdots & a_{mn}b_{1q} \\ a_{m1}b_{21} & a_{m1}b_{22} & \cdots & a_{m1}b_{2q} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{21} & a_{mn}b_{22} & \cdots & a_{mn}b_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}b_{p1} & a_{m1}b_{p2} & \cdots & a_{m1}b_{pq} & \cdots & \cdots & a_{mn}b_{p1} & a_{mn}b_{p2} & \cdots & a_{mn}b_{pq} \end{bmatrix}$$

Cal tenir en compte que $a_{ij}B$ es una multiplicació escalar per una matriu, amb a_{ij} sent l'escalar i B sent la matriu.

Aquí hi ha un exemple més il·lustratiu amb dues matrius de mida 2×2, es pot veure que cada element de la primera matriu es multiplicat per la segona matriu:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} & 2 \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} \\ 3 \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} & 4 \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \times 0 & 1 \times 5 & 2 \times 0 & 2 \times 5 \\ 1 \times 6 & 1 \times 7 & 2 \times 6 & 2 \times 7 \\ 3 \times 0 & 3 \times 5 & 4 \times 0 & 4 \times 5 \\ 3 \times 6 & 3 \times 7 & 4 \times 6 & 4 \times 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 5 & 0 & 10 \\ 6 & 7 & 12 & 14 \\ 0 & 15 & 0 & 20 \\ 18 & 21 & 24 & 28 \end{bmatrix}$$

Una altre notació a tenir en compte és el símbol $\bigotimes$, utilitzat per representar el equivalent de la suma (expressada amb $\sum$), però en comptes de la adició el producte de Kronecker és utilitzat. En altres paraules, $\bigotimes$ representa el producte de Kronecker de un nombre finit de termes. Per clarificar, aquí hi ha un exemple amb una matriu identitat:

Amb $\mathbb{I}$ com la matriu $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ i n com una potencia de 2:

$$\mathbb{I}_n = \bigotimes^{\log_2 n} \mathbb{I}$$

Aquí està el cas per $n = 8$:

$$\mathbb{I}_8 = \bigotimes^{\log_2 8} \mathbb{I} = \bigotimes^{3} \mathbb{I} = \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

El producte de Kronecker també funciona amb vectors de la mateixa manera, però amb una multiplicació de escalar per vector.

Per els vectors $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$ de dimensions n i m respectivament:

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 |\varphi\rangle \\ \psi_2 |\varphi\rangle \\ \vdots \\ \psi_m |\varphi\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1\varphi_1 \\ \psi_1\varphi_2 \\ \vdots \\ \psi_1\varphi_m \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_n\varphi_1 \\ \psi_n\varphi_2 \\ \vdots \\ \psi_n\varphi_m \end{bmatrix}$$

S'ha de tenir en compte que el producte de Kronecker també es pot fer entre un vector i una matriu, o viceversa, no obstant, no és molt comú fer-ho.

page 34 of QC-intro, inner product for a space $V \otimes W$

1.1 Propietats del producte tensorial

Les propietats bàsiques del producte tensorial són les següents [14, 15]:

1. Associativitat:
   $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$
   $(zA) \otimes B = A \otimes (zB) = z(A \otimes B)$
   $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$
   $A \otimes 0 = 0 \otimes A = 0$
2. No-commutativitat [10]:
   $A \otimes B \neq B \otimes A$

1.5 Traça

La traça d'una matriu és tal sols la suma dels seus elements en la diagonal principal, la diagonal que va d'abaix a dalt i d'esquerra a dreta.

Aquí hi ha una matriu A amb la seva diagonal principal marcada:

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

I la seva traça, representada per $\mathrm{Tr}[A]$ és:

$$\mathrm{Tr}[A] = 1 + 1 + 1 = 3$$

Més formalment, la traça d'una matriu quadrada n-dimensional és:

$$\mathrm{Tr}[A] = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$$

[10] Una cosa guay es que $A \otimes B$ i $B \otimes A$ són permutativament equivalents: $\exists P, Q \Rightarrow A \otimes B = P(B \otimes A)Q$ on P i Q són matrius permutatives.

La traça d'una matriu té les propietats següents:

1. Operador lineal:
   Degut a que la traça és un mapa lienal, es compleix que:
   $\mathrm{Tr}[A+B] = \mathrm{Tr}[A] + \mathrm{Tr}[B]$ i $\mathrm{Tr}[zA] = z\,\mathrm{Tr}[A]$, per a totes les matrius quadrades A i B, i tots els escalars z.

2. Traça d'un producte tensorial:
   $\mathrm{Tr}[A \otimes B] = \mathrm{Tr}[A]\,\mathrm{Tr}[B]$

3. La transposada té la mateixa traça:
   $\mathrm{Tr}[A] = \mathrm{Tr}\left[A^T\right]$

4. La traça d'un producte és cíclica:
   Per una matriu A amb mida $m \times n$ i una matriu B de la mateixa mida:
   $\mathrm{Tr}[AB] = \mathrm{Tr}[BA]$

Una altre manera molt útil de computar la traça d'un operador és a través del procediment de Gram-Schmidt[11] i un producte exterior. Utilitzant Gram-Schmidt per representar el vector unitat $|\psi\rangle$ amb una base ortonormal $|i\rangle$ que inclou $|\psi\rangle$ com el seu primer element, es veritat que:

$$\mathrm{Tr}[A\,|\psi\rangle\,\langle\psi|] = \sum_i \langle i|\,A\,|\psi\rangle\,\langle\psi|i\rangle = \langle\psi|\,A\,|\psi\rangle$$

[11] Mirar A.1 per una definició del procediment de Gram-Schmidt.

Capítol 2

Computació quàntica

Després de bastant teoria matemàtica, ha arribat el temps de parlar sobre mecànica quàntica[1], en aquest capítol introduiré alguns conceptes bàsics sobre Informació Quàntica i Computació Quàntica (QI i QC).

Quantum mechanics is a mathematical framework or rather a set of theories used to describe and explain the physical properties of atoms, molecules, and subatomic particles. It is the framework of all quantum physics including quantum information science. The right way of presenting quantum computation is through the formal quantum mechanics postulates because, with them, the statements made in quantum computation do not seem to come from anywhere [16]. However, to not complicate this section more than it is, I will do my best to explain the concepts and math of quantum computing just on their own, without presenting more generalized concepts from quantum mechanics, unless it is totally necessary to do so.

2.1 Estats quàntics i superposicions

Per descriure com evolucionen els sistemes físics a través del temps, es necessita representar els sistemes d'alguna manera. En computació quàntica és representen per estats quàntics, els quals són algun tipus de distribucions de probabilitat per els possibles resultats d'una mesura on un sistema quàntic [17].

[1] No crec que aquesta frase doni molts ànims per continuar.

Imaginat que tens un boli, però que no saps de quin color és, no obstant, saps que pot ser vermell o blau. Per esbrinar de quin color és, pots provar a escriure amb el boli per veure el color de la pinta, o en altres paraules, fer una mesura. Saps que hi ha un 50% de probabilitat de que sigui vermell i un 50% de que sigui blau. En aquesta situació hipotètica tindries el teu sistema quàntic (el boli), una manera de mesurar-lo (escriure alguna cosa) i una llista amb els possibles resultats (50% vermell, 50% blau), només et falta una manera de representar-lo tot matemàticament, el estat quàntic. Per tant, per què no intentem guardar la informació que sabem del boli en un vector?

Si posem cada probabilitat de treure un resultat en un vector tenim que:

$$\begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

On la primera entrada és la possibilitat de que el boli sigui vermell i la segona entrada de que sigui blau, per fer-ho més senzill aquí està en colors:

$$\begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Cal remarcar que aquest vector està normalitzat amb la norma ℓ_1, definida com la suma de les entrades d'un vector[2], en altres paraules la norma ℓ_1 d'aquest vector és 1.

Llavors, hem d'escollir una operació matemàtica per poder extreure la informació del vector, com que el output ha de ser un número, podem provar a utilitzar un producte interior. Però primer s'ha de representar el vector com una combinació lineal de les seves bases:

$$0.5\,|0\rangle + 0.5\,|1\rangle = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

On $|0\rangle$ és el vector $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, i, $|1\rangle$ és el vector $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Per tant, per trobar la probabilitat, s'agafa el producte interior del vector amb la base corresponent a la probabilitat, com a continuació:

$$\langle 0|v\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix} = 0.5$$

[2]Amb $|a\rangle$ sent un vector, la norma ℓ_1, denotada per $\|\cdot\|_1$ és $\||a\rangle\|_1 = \sum_i a_i$.

$$\langle 1|v\rangle = \begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5\\0.5\end{bmatrix} = 0.5\begin{bmatrix}0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.5\\0.5\end{bmatrix} = 0.5$$

Aquest procediment és bastant senzill, com a un altre exemple, per representar un boli amb 6 colors possibles amb una possibilitat aleatòria d'escriure amb un color del 6 possibles, l'estat d'aquest boli és[3]:

$$|w\rangle = \begin{bmatrix}0.25\\0.3\\0.1\\0.1\\0.1\\0.05\end{bmatrix}$$

Ara veure la probabilitat de per exemple treure el color verd, utilitzant la tercera base, la que correspon al color verd:

$$\begin{bmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.25\\0.3\\0.1\\0.1\\0.1\\0.05\end{bmatrix} = 0.1$$

Deixant els bolis a una banda, ara els podem substituir per un sistema físic quàntic, com per exemple un fotó. Els fotons tenen certes propietats que poden ser mesurades, com la seva polarització[4]. Al mirar als fotons com ones en que oscil·len en el camps electromagnètic, la polarització és l'orientació geomètrica de l'ona. La polarització pot ser interpretada com un angle respecte a la direcció de propagació.

posar una figura aquí

Al definir les bases del estat de polarització com vertical i horitzontal, denotades per els vectors $|\rightarrow\rangle$ i $|\uparrow\rangle$, respectivament. Podem definir un estat de superposició entre les bases, representat com $|\nearrow\rangle$ [18]:

$$|\nearrow\rangle = \alpha\,|\rightarrow\rangle + \beta\,|\uparrow\rangle \tag{2.1}$$

[3] Le posat colors a els elements per claredat.

[4] Concretament, són una propietat que les ones transversals tenen, el tipus d'ona de les ones electromagnètiques, que són els fotons en realitat.

On α i β són números complexos. Un estat en superposició es simplement un estat on l'angle de polarització no és 0 ni $\frac{\pi}{2}$. No ens tenim que preocupar de la descripció matemàtica exacte de la polarització dels fotons al parlar de computació quàntica perquè el que importa és l'informació que porten aquests estat, no la física dels sistemes que representen. Aquesta informació s'ha d'agafar mitjançant mesures, com amb els bolis. Aquestes mesures en el cas de la polarització dels fotons seria passar-los per diversos filtres de polarització, els quals deixen passar el fotó o l'absorbeixen, tot això d'una manera probabilística, es a dir, dependent de quin sigui l'estat tenen certa possibilitat de ser absorbits o no.

Per clarificar, el filtre lo que fa es col·lapsar el fotó en els dos possibles estats de polarització, l'estat en el quan el filtre es orientat o l'estat perpendicular a aquest. Si col·lapsa en l'estat del filtre el fotó passa pel el filtre, en cas de col·lapsar en l'altre estat, es absorbit. La manera en la que els fotons col·lapsen és probabilística, si agafen un filtre que està orientat horitzontalment respecte al fotons que li arriben, un fotó orientat en horitzontalment té un 100% de poder passar, mentre que un fotó polaritzat verticalment té un 0% de probabilitat de poder passar. I si un fotó està polaritzat en un angle just entre vertical i horitzontal, es a dir a 45º, tindrà un 50% de possibilitats de passar i un 50% de no poder-hi.

Aquesta és la manera amb la qual els sistemes quàntics es comporten, a través de la probabilitat, on els estats que els representen tenen la informació sobre quines són aquestes possibilitats. No obstant, la, polarització dels fotons són un sistema físic concret, quan es parla de computació quàntica és millor treballar amb conceptes més generals per poder expressar tants algoritmes com sigui possible i poder implementar aquests algoritmes en tants ordinadors quàntics com sigui possible. Per saqueta raó, en la branca de la informació quàntica i la computació quàntica es treballa amb qubits, en comptes de diversos sistemes físics.

2.2 Qubits i operacions quàntiques

Ordinadors modern representen informació a través de cadenes de zeros i uns, anomenats bits. Tot, des de imatges a lletres o instruccions electròniques. Per exemple, la lletra t és representada per la cadena de bits 01110100, codificat a través de codi binari. Tot el que fas en un ordinador es codifica i representa en codi binari.

Degut a que estem molt acostumats a codi binari, en el camp de la computació quàntica també s'utilitza, no obstant, en comptes de bits s'utilitzen qubits. Un qubit es l'anàleg d'un bit, en altres paraules, és la unitat mínima d'informació utilitzada pels ordinadors quàntics. En els qubits podem aplicar propietats quàntiques com la superposició o l'entrellaçament[5]. Si un bit pot estar en l'estat 1 o en l'estat 1, un qubit pot estar en una combinació d'aquests estats, en un estat enmig del 1 o el 0. És una combinació lienal dels vectors que representen aquests estats, $|0\rangle$ i $|1\rangle$:

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle$$

On α i β són nombres complexos i $|\psi\rangle$ és un vector en un bidimensional espai de Hilbert[6]. Els vectors $|0\rangle$ i $|1\rangle$ són anomenats els vectors de la base computacionals, representats com:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

Per tant el vector $|\psi\rangle$ és:

$$|\psi\rangle = \alpha \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \beta \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}$$

Aquest vector és un estat quàntic vàlid per representar un qubit, anomenat *statevector* o vector d'estat. No obstant, hi ha un important factor a tenir en compte. El vector ha d'estar normalitzat amb la norma ℓ_2, per tant, els nombres α i β no poden ser qualsevol nombre, necessiten ser els coeficients que formin un vector amb una norma de 1.

$$\||\psi\rangle\| = 1$$

Llavors:

$$\begin{aligned}\|\psi\| &= \sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2} = 1\\ &\Rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\end{aligned}$$

Definir un qubit com una 'combinació lienal dels estats fundamentals' no és de molta ajuda, per això, elaboraré més sobre aquesta definició: Una cadena de n-bit pot només representar una única combinació d'uns i zeros, mentres que una cadena de n-qubits representa una combinació de totes les possibles combinaci-

[5] Ja he parlat de la primera amb la polarització del fotons, del entrellaçament parlaré més endavant.

[6] Un espai vectorial amb un producte interior.

ons. En el cas d'un qubit, aquest és una combinació del possible estats $|0\rangle$ i $|1\rangle$. Considera un qubit com una barreja dels estats possibles, amb cada coeficient de la combinació lineal sent el nombre que indica quant d'un estat forma part de la barreja.

Definir un qubit com una çombinació lienal dels estats fundamentals"no és de molta ajuda, per això, elaboraré més sobre aquesta definició: Una cadena de n-bit pot només representar una única combinació d'uns i zeros, mentres que una cadena de n-qubits representa una combinació de totes les possibles combinacions. En el cas d'un qubit, aquest és una combinació del possible estats $|0\rangle$ i $|1\rangle$. Considera un qubit com una barreja dels estats possibles, amb cada coeficient de la combinació lineal sent el nombre que indica quant d'un estat forma part de la barreja.

Una cosa molt interessant passa quan s'augmenta el nombre qubits, la 'quantitat d'informació' creix exponencialment. Per una cadena de n qubits la quantitat d'informació que té, en altres paraules la quantitat de números que representa és 2^n, on aquests números son els coeficients de la combinació lineal. Això es perquè quan afegeixes un qubit el nombre de combinacions possibles creix exponencialment, per tant es necessiten més coeficients per representar aquestes combinacions noves en la combinació lineal. El qubits necessiten molta més informació per poder representar-los[7], no com els bits que al ser només una combinació és necessita només saber quina combinació és. No passa res si això no s'entén perfectament, lo important és saber que es necessiten 2^n números complexos[8] per representar n-qubits i que es necessiten n números binaris per representar n-bits.

Per il·lustrar tot això, 2 qubits es representen amb el *statevector*:

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \alpha_1 |00\rangle + \alpha_2 |00\rangle + \alpha_3 |00\rangle + \alpha_4 |00\rangle \\
&= \alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

Cal remarcar que els vectors de la base computacional serien les columnes d'una matriu identitat amb dimensions $2^n \times 2^n$, on n és el nombre de qubits.

[7] Informació que es manifesta amb els coeficients de la combinació lineal

[8] Són complexos degut a que els coeficients de la combinació lienal són números complexos.

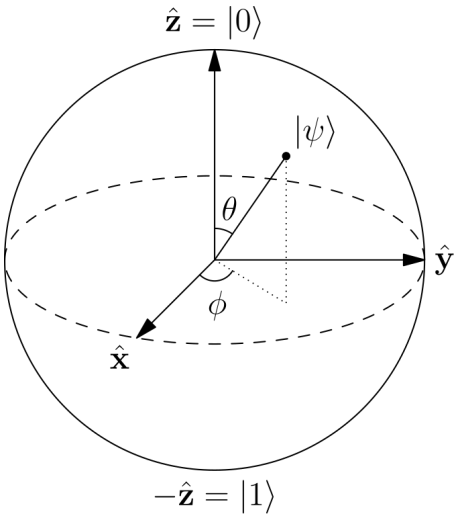


Figura 2.1: Esfera de Bloch, on es representa un estat arbitrari $|\psi\rangle$ amb els vectors $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ representat els eixos ortonormals de la esfera.

Per poder representar informació amb qubits simplement es codifica aquesta informació en els qubits, això es pot fer per exemple mitjançant codi binari: Els números 0, 1, 2 i 3 són els bits 00, 01, 10 i 11 respectivament, per tant es poden representar amb dos qubits en els estats $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$, respectivament.

2.1 Representació geomètrica d'un qubit

Una aspecte que sempre m'agradat del qubits és la seva representació geomètrica, la esfera de Bloch 2.1. Si agafem una esfera unitària[9] que té els seus pol nord i sur definits per els vectors $|0\rangle$ i $|1\rangle$, respectivament. Cada punt de la seva superfície és un estat quàntic vàlid on les seves bases computacionals són $|0\rangle$ i $|1\rangle$.

2.2 Operacions per a només un qubit

Una vegada es té la informació representada, estaria bé poder operar amb aquella informació, aquest es justament lo que fa que els ordinadors siguin ordinadors, poder operar amb la informació. En computació quàntica els qubits al poder ser

[9]Una esfera que té radi 1 i que per tant qualsevol punt en la seva superfície correspon a un vector en $\mathbb{R}^3$ unitari.

representats amb vectors que tenen els seus coeficients són operats per les anomenades portes lògiques quàntiques, que són matrius. Per exemple, si es vol passar de tindre un qubit en l'estat $|0\rangle$ al estat $|1\rangle$, s'utilitza la porta lògica X representada a continuació:

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

Podem veure com fa l'acció al multiplicar la matriu per el vector:

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

Que en notació de Dirac s'expressaria com:

$$X\,|0\rangle = |1\rangle$$

D'una manera més general:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \times \alpha & 1 \times \beta \\ 1 \times \alpha & 0 \times \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}$$

Es pot veure que aquesta matriu lo que fa és donar la volta als coeficients d'un vector, per tant:

$$X\,|0\rangle = |1\rangle \text{ i } X\,|1\rangle = |0\rangle$$

Aquesta porta lògica forma part d'un grup important, les matrius de Pauli. Hi han 3 d'aquestes la X, la Y i la Z, usualment representades per X, Y, Z o per $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Aquestes matrius són les següents:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \; Y = \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix} \; Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Aquestes matrius són molt important en la mecànica quàntica[10] i són utilitzades àmpliament per descompondre i com a portes lògiques quàntiques.

A partir d'elles podem elaborar matrius que facin una rotació de qualsevol

[10] Al ser Hermitianes són observables, concretament ho són dels que corresponen al spin d'una partícula amb spin $\frac{1}{2}$ bàsicament estan relacionades amb els operadors del moment angular.

angle en un del eixos de la representació geomètrica d'un qubit 2.1:

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}X = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \tag{2.2}$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}Y = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}Z = \begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix} \tag{2.4}$$

Per exemple la matriu $R_y(\cdot)$ (Eq.2.3) correspon a una rotació en el eix $\hat{\mathbf{y}}$ de la esfera de la figura 2.1.

Aquestes operacions poden resultar en superposicions si es fan rotacions amb certs angles. Però hi ha una porta lògica especial per poder fer una rotació que resulta en una superposició uniforme. Es a dir una superposició que tingui les mateixes probabilitats de resultar en $|0\rangle$ o $|1\rangle$[11]. Aquesta és la porta de Hadamard, denotada per H:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.5}$$

Podem comprovar que és una superposició uniforme al aplicar-la al estat $|0\rangle$:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

L'estat resultant és un estat especial que s'escriu com $|+\rangle$[12] La probabilitat de que un estat col·lapsi en una determinada base és el coeficient de la seva base elevat al quadrat. Com que l'estat és:

$$|+\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

Al elevar al quadrat qualsevol del coeficients es pot veure que dona $\frac{1}{2}$:

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$$

[11] Un 50% cada una.

[12] Un altre estat similar és $\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$, quan la matriu H s'aplica al estat $|1\rangle$.

Llavors tenim que la probabilitat per obtindre ambos estats és la mateixa, es a dir que si mesurem l'estat $|+\rangle$ hi ha la mateixa probabilitat de que surti $|0\rangle$ o $|1\rangle$. La porta lògica de Hadamard és molt important ja que s'utilitza per crear distribucions uniformes, ja sigui en un qubit o en diversos [13].

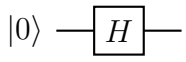
Altres operacions importants de només un qubit són les portes S i T:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \; T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

2.3 Circuit quàntics

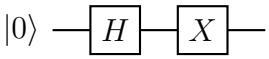
Aquestes operacions usualment es representen a través de circuits quàntics. Són representacions gràfiques que indiquen de quines operacions s'apliquen a quins qubits i en quin ordre[14].

La forma de representar una porta H aplica a un qubit és amb el circuit quàntic:



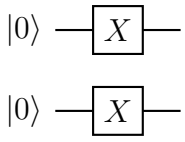
El qubit es representat per la línea que comença amb $|0\rangle$, amb $|0\rangle$ sent el seu estat inicial. Aquests diagrames es llegeixen d'esquerra a dreta, la mateixa forma en la qual s'apliquen les operacions.

Un qubit en el qual se li aplica una porta H i després una porta X, es representat com:

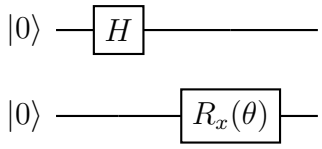


Múltiples qubits son simplement més línies, aquí estan representat dos qubits amb portes X aplicades a cada un:

[13] S'aplica aquesta operació a cada qubit del sistema.
[14] A mi em semblen semblats a les partitures musicals.



Amb múltiples qubits també hi han un ordre en el qual les portes s'han d'aplicar, un circuit en el qual es representa que s'aplica una porta Hadamard al primer, al principi, i una rotació[15] en l'eix x en el segon qubit a continuació, seria:



2.4 Operacions per a múltiples qubits

Lo realment interessant es quan s'apliquen portes a diversos qubits, perquè d'aquesta manera és pot arribar a tindre qubits entrellaçats. La porta més útil per entrellaçar qubits és la CNOT o *Controlled NOT*:

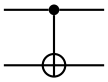
$$\mathrm{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.6}$$

És bàsicament una porta X[16] que està controlada per un altre qubit, si l'altre qubit és $|1\rangle$ s'aplica la porta X al altre qubit. Però si l'altre qubit està en superposició, per exemple en $|+\rangle$, aquesta superposició es passa també al qubit controlat, i al mesurar el qubit, la probabilitat de que s'apliqui la porta X és la probabilitat de mesurar l'estat $|1\rangle$. Es considera que aquests qubits estan entrellaçats, una mesura a un d'ells afecta a la mesura del altre. El qubit al qual se li aplica la porta X es diu *target* i el qubit sobre el qual depèn el *target* és el *control*.

Aquesta porta representa en un circuit s'escriu com:

[15] D'un angle θ.

[16] També anomenada porta NOT degut al paral·lelisme que es fa amb la porta lògica del ordinadors clàssics NOT [19] que simplement inverteix els bits d'1 a 0 (i viceversa), igual que X que inverteix els qubits $|1\rangle$ a $|0\rangle$ i viceversa.



On el qubit *control* és el primer i on el segon és el *target*, el qubit que té el símbol $\oplus$[17].

2.4.1 Entrellaçament quàntic

L'exemple més senzill d'un entrellaçament quàntic en la computació quàntica son els parells de Bell, que es creen al aplicar a dos qubits una porta H al primer i després una porta CNOT als dos creant l'estat:

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$$

Es pot veure que només hi han dos estats possibles $|00\rangle$ i $|11\rangle$ que tenen la mateixa probabilitat associada[18]. S'afecten l'un al altre en el sentit que quan es mesura només un dels qubits i dona per exemple $|1\rangle$, al mesurar l'altre també dona $|1\rangle$, d'aquesta manera acabant amb l'estat $|11\rangle$. En altres paraules, la mesura d'una part del sistema determina el resultat d'una mesura en una altre part del sistema.

Matemàticament un sistema quàntic, e.i. un conjunt de qubits, està entrellaçant quan aquest sistema no es pot descriure amb un producte tensorial de les parts. Per exemple estat $|00\rangle$ es pot escriure com $|0\rangle \otimes |0\rangle$, mentre que l'estat $\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}$, no. Per tant el primer no és sistema amb qubits entrellaçats i el segon si ho és.

A partir del entrellaçament i la superposició és com els ordinadors quàntics arribem a tenir avantatges en complexitat sobre els ordinadors clàssics, per més informació sobre els avantatges que presenten els algoritmes quàntics en certes tasques veure l'apèndix D.

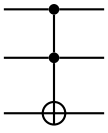
[17] A vegades escriure els circuits quàntics sense especificar l'estat inicial degut a que no és necessari.

[18] Això es pot veure al elevar al quadrat els coeficients del dos, que donen $\frac{1}{2}$.

2.4.2 Operacions controlades

A part de la porta CNOT existeixen diverses portes quàntiques controlades. Realment és pot controlar qualsevol porta, en altres paraules, si l'estat del qubit *control* és $|0\rangle$, s'aplica qualsevol porta al qubit *target*. Fins i tot podem haver-hi diversos qubits *control* i *target*.

Per exemple existeix la porta Toffoli[19]:



Que en la seva forma matricial és:

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

Aquesta porta aplica una porta X al últim qubit en cas de que els dos primers siguin $|0\rangle$.

Tornant a dos qubits, al veure la matriu per la porta CNOT, es pot apreciar que està comporta per una una matriu identitat i una porta X[20]:

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

[19] Inventada per Tommaso Toffoli XD

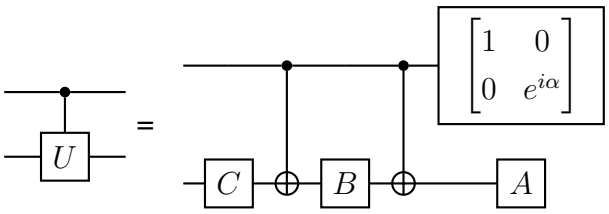
[20] La matriu identitat es troba a la cantonada superior esquerra, mentre que la porta X es troba al altre extrem.

També al veure la porta Z controlada (CZ), es pot apreciar el mateix patró:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Amb la matriu de la porta Z a la cantonada inferior dreta.

On obstant, una operació controlada de qualsevol unitària U es forma a través del següent circuit:



On U, α, A, B i C son tals que $U = e^{i\alpha}AXBXC$ i $ABC = I$.

2.3 Mesurament quàntic

Com ja s'ha esmentat a la secció 2.2 al elevar al quadrat el coeficient d'un estat base que forma part d'un estat, s'obté la probabilitat d'obtenir l'estat base quan es mesura.

Aquesta és la forma més simple de poder predir el mesurament d'un estat quàntic. Però hi han més coses a dir que son útils.

Els mesuraments quàntics són un conjunt d'operadors de mesura M_m, la probabilitat del estat m associat a un operador M_m, és:

$$\mathrm{prob}(m) = \langle\psi| M_m^\dagger M_m |\psi\rangle \tag{2.7}$$

On l'estat després de la mesura, és:

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi| M_m^\dagger M_m |\psi\rangle}}$$

Els operadors M_m han de complir que las suma de les seves probabilitats sigui u:

$$1 = \sum_m \text{prob}(m) = \sum_m \langle\psi| M_m^\dagger M_m |\psi\rangle$$

La diferencia entre aquesta manera de fer les mesures i elevar els coeficients al quadrat, és que l'equació 2.3 és una forma més general, on en comptes de mesurar en la base computacional, és pot mesurar en qualsevol base. A més a més, utilitzant aquest mètode no es necessari saber la composició[21] del estat que vols mesurar.

Per mesurar en la base computacional un *statevector* s'utilitzen operadors de mesura derivats de la base computacional amb productes exteriors. Per crear l'operador M_i associat a la base computacional $|i\rangle$ s'agafa el producte exterior de la base:

$$M_i = |i\rangle \langle i|$$

Per tant la probabilitat que la mesura del estat $|\psi\rangle$ resulti en $|0\rangle$, és:

$$\text{prob}(|0\rangle = \langle\psi|0\rangle \langle 0|^\dagger |0\rangle \langle 0|\psi\rangle$$

Per $|\psi\rangle = |0\rangle$ tenim que[22]:

$$\begin{aligned}\text{prob}(|0\rangle) &= \langle 0|0\rangle \langle 0|^\dagger |0\rangle \langle 0|0\rangle \\ &= \langle 0|0\rangle \langle 0|0\rangle \langle 0|0\rangle \\ &= \langle 0|0\rangle \langle 0|0\rangle \\ &= 1\end{aligned}$$

El resultat té sentit degut a que si mesurem $|0\rangle$ en la base $|0\rangle$, esperem que el resultat sigui 1.

2.4 Matriu de densitat

Una serie de qubits es pot representar tant per un vector com per una matriu, anomenats *statevector* i *density matrix*, respectivament [8]. En aquesta secció

[21] Els coeficients del estats base que descomponen el vector.

[22] Cal notar que $|0\rangle \langle 0|^\dagger =) |0\rangle \langle 0|$ i que $|0\rangle$ és un vector unitari.

aniré ràpidament sobre el concepte de la matriu de densitat i com les operacions que s'apliquen a un *statevector* poden ser aplicades a una *density matrix*. Després parlaré del mesuraments parcial d'un sistema, un concepte que es important per la part experimental del treball.

Una matriu densitat és la representació matemàtica d'un estat quàntic a partir de d'un matriu, es a dir, d'un operador. Aquesta representació serveix descriure sistemes quàntics que no són completament coneguts. Concretament aquests operadors són conjunts de estats quàntics, per un sistema que es descriu amb el estats $|\psi_i\rangle$ que tenen probabilitats p_i[23] la matriu densitat del sistema ρ [20]:

$$\rho = \sum_i p_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|$$

Cal matriu densitat pot ser simplement $|\psi\rangle \langle\psi|$ per un estat qualsevol $|\psi\rangle$, per exemple la matriu que representa $|0\rangle$ és:

$$\rho = |0\rangle \langle 0| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

L'evolució d'un estat ρ que descriu un sistema quàntic, al igual que amb els vectors, s'efectua a partir d'operadors unitaris[24], d'aquesta manera tenim que la evolució d'un operador densitat és:

$$\sum_i p_i U \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right| U^\dagger = U \rho U^\dagger$$

Al igual que es fan mesures en *statevectors*, les podem amb les *density matrices*. Per operadors de mesura M_m, tenim que la probabilitat de tindre l'estat m és:

$$\begin{aligned} \text{prob}(m) &= \left\langle\psi_i\right| M_m^\dagger M_m \left|\psi_i\right\rangle = \text{tr}\big(M_m^\dagger M_m \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\big) \\ &= \text{tr}\big(M_m^\dagger M_m \rho\big) \end{aligned}$$

També tenim que l'estat $|\psi_i\rangle$ després de la mesura m és [20]:

$$\left|\psi_i\right\rangle = \frac{M_m \left|\psi_i\right\rangle}{\sqrt{\left\langle\psi_i\right| M_m^\dagger M_m \left|\psi_i\right\rangle}} = \frac{M_m \left|\psi_i\right\rangle}{\sqrt{\text{tr}\Big(M_m^\dagger M_m \rho\Big)}} \tag{2.8}$$

[23] i és l'índex que relaciona un estat a un probabilitat.
[24] Recorda que han de preservar la norma del vector, i en el cas de les matrius la seva traça.

La equació 2.8 es pot reescriure en termes d'una matriu de densitat després d'una mesura:

$$\begin{aligned}\rho_m &= \sum_i p_i \frac{M_m \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right| M_m^\dagger}{\mathrm{tr}\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)} \\ &= \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{tr}\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)}\end{aligned}$$

Perquè això sigui cert els operadors de mesura M_m, ha'n de satisfer:

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$$

Per a tots els estats possibles m.

Per últim s'ha de recordar que les matrius densitat al igual que els vectors d'estat han de tenir certes característiques:

1. La traça de ρ ha d'equivaler 1.
2. ρ ha de ser un operador positiu[25].

2.1 Operador de densitat reduït

Una aplicació important dels operadors de densitat és la descripció d'estats parcials amb el operador de densitat reduït, i per tant la descripció dels mesuraments parcials.

Al tindre un sistema físic compost de dos sistemes A i B que es descriu per un operador de densitat ρ^{AB}, l'operador de densitat reduït del sistema A és:

$$\rho^A = \mathrm{tr}_B(\rho^{AB}) \tag{2.9}$$

On tr_B és la traça parcial sobre el sistema B, que es defineix per l'equació següent [21]:

$$\mathrm{tr}_B(\left|a_1\right\rangle \left\langle a_2\right| \otimes \left|b_1\right\rangle \left\langle b_2\right|) = \left|a_1\right\rangle \left\langle a_2\right| \mathrm{tr}(\left|b_1\right\rangle \left\langle b_2\right|)$$

[25] Un operador positiu A es aquell que $\left\langle\psi\right| A \left|\psi\right\rangle \geq 0, \forall \left|\psi\right\rangle$.

Amb $|a_1\rangle$ i $\langle a_2|$ sent estats vàlid pel sistema A, i $|b_1\rangle$ i $\langle b_2|$ sent-ho per B. El terme $\mathrm{tr}(|b_1\rangle\langle b_2|)$ s'omet quan els els vectors del producte exterior son iguals i formen un operador de densitat vàlid, el qual la traça ha de donar 1.

No obstant aquesta definició no es pot utilitzar quan no saps com representar l'operador ρ com a un producte vectorial, en el qual un dels termes és l'estat que es traça afora. En altres paraules, en la equació 2.9 si no es coneix ρ^A i ρ^B per $\rho^{AB} = \rho^A \otimes \rho^B$, aquesta equació no serveix de res.

Degut a això en el llibre de text *Quantum Computing: A Gentle Introduction* [22] els autors defineixen la traça parcial d'una altre manera més general, on només s'ha de saber les bases del sistemes A i B i un operador vàlid per el sistema AB. Per una matriu de densitat ρ^{AB} que representa el sistema $A \otimes B$, la traça parcial de ρ^{AB} sobre B és:

$$\mathrm{tr}_B\, \rho^{AB} = \sum_i \langle\beta_i|\, \rho^{AB}\, |\beta_i\rangle$$

On el conjunt β_i són les bases del sistema B. Les entrades de la matriu $\mathrm{tr}_B\, \rho^{AB}$ representades en termes de les bases $|\alpha_i\rangle$ i $|\beta_j\rangle$del sistemes A i B respectivament, són:

$$(\mathrm{tr}\, \rho^{AB})_{ij} = \sum_{k=0}^{M-1} \langle a_i|\, \langle\beta_k|\, \rho^{AB}\, |\alpha_j\rangle\, |\beta_k\rangle$$

Amb la matriu sent:

$$\mathrm{tr}\, \rho^{AB} = \sum_{i,j=0}^{N-1} \left(\sum_{k=0}^{M-1} \langle a_i|\, \langle\beta_k|\, \rho^{AB}\, |\alpha_j\rangle\, |\beta_k\rangle \right) |\alpha_i\rangle\, \langle\alpha_j|$$

On N és la dimensió del sistema A i M és la dimensió del sistema B.

Es pot comprovar que aquestes definicions són correctes degut a que en els dos llibres utilitzen les seves definicions per tractar el mateix cas i obtenen el mateix resultat [23, 24].

2.1.1 Mesurament parcial

Es pot arribar a treure una mesura parcial sobre un sistema de qubits amb la traça parcial i operadors de mesura. En el paper fet per Huang et.al. [5] es

descriu un estat ρ després d'un mesurament parcial Π_A sobre un sistema A del estat $|\psi\rangle$ com:

$$\rho = \frac{\mathrm{tr}_A(\Pi_A |\psi\rangle \langle\psi|)}{\mathrm{tr}\big(\Pi_A \otimes I_{2^N - 2^{N_A}} |\psi\rangle \langle\psi|\big)}$$

El sistema A està compost per N_A qubits per tant la resta del estat $|\psi\rangle$ té $N - N_A$, on N és el nombre total de qubits del estat $|\psi\rangle$. D'aquesta manera $\Pi_A \otimes I_{2^N - 2^{N_A}}$ té $2^N \times 2^N$ dimensions i pot ser multiplicat per la matriu $|\psi\rangle \langle\psi|$ que té les mateixes dimensions. No obstant sorgeix un problema amb el numerador de l'equació perquè Π_A no té les mateixes dimensions que $|\psi\rangle \langle\psi|$, encara no he pogut utilitzar aquesta equació adequadament. No sé com computar-la. Parlaré d'això més endavant en la part experimental d'aquest treball.

En el mateix paper es planteja la mateixa equació però per l'estat post-mesura expressat en forma de vector d'estat, molt semblat a l'equació 2.8. L'única diferencia es que en l'equació del paper no s'expressa el operador de mesura en la forma $M_m^\dagger M_m$, en canvi el autors ho expressen tan sols com Π_A, més concretament $I_{2^N - 2^{N_A}} \otimes \Pi_A$. Potser la forma plantejada per els autors té en compte el conjugat hermitià, però no estic segur. L'equació esmentada en el paper es la següent:

$$|\psi_m\rangle = \frac{I_{2^N - 2^{N_A}} \otimes \Pi_A |\psi\rangle}{\sqrt{\mathrm{tr}\big(I_{2^N - 2^{N_A}} \otimes \Pi_A |\psi\rangle \langle\psi|\big)}}$$

Al igual que l'equació per les matrius de densitat parlaré d'aquesta contradicció en la part experimental.

2.5 Ordinadors quàntics

Tota aquesta teoria és aplicada a través de qubits físics que s'ubiquen al ordenadors quàntics. Hi han diversos tipus d'ordinadors quàntics, degut a que els qubits poden ser diversos sistemes. Poden ser fotons, chips de silici superconductors o ions atrapats per imants. No elaboraré més sobre aquest tema degut a que no és el tema central d'aquest treball, m'he centrat molt més en la teoria.

Però si vull generar imatges amb un ordinador quàntic, no necessito un? No, perquè puc simular l'evolució dels estats quàntics amb un ordinador, pensa que tot ser expressat amb àlgebra lienal. No obstant, quan s'intenta simular un sistema quàntic de molt qubits[26] un ordinador de sobretaula tardaria molt de temps

[26] Més de 50 per exemple.

i realment no és viable. Per més informació sobre algoritmes quàntics i com s'executen en ordinadors i en simuladors, es pot llegir l'apèndix D.

Capítol 3

Intel·ligència artificial

Segurament has sentit parlar de l'intel·ligènica artificial o de les xarxes neuronals, són conceptes que semblen abstractes però jo penso que son bastant intuïtius, intentaré que tú et sentis de la mateixa manera al final d'aquest capítol.

Intel·ligència artificial és un mot una mica ambigu, que és refereix a qualsevol algoritme que entra dintre del camps del *machine learning* o aprenentatge automàtic[1]. Aquests algoritmes simplement s'alteren a ells mateixos per fer millor la tasca que s'ha li ha designat, no importa quin és el objectiu o com ho aconseguix, lo que importa és si aprèn automàticament. Cal notar que els canvis que s'efectuen sobre si mateixos no han de ser predeterminats, si l'algoritme té una llista de les instruccions que va executant segon la situació no seria ven bé una intel·ligència o un algoritme de *machine learning*.

La manera que tenen aquests algoritmes d'alterar-se a si mateixos usualment es canviant els paràmetres de les operacions dels quals estan compostos. Per exemple, en una regressió lineal, s'ajusten els paràmetres de la recta que s'ajusta a les dades per veure la tendència de les dades. Fig 3.1.

Hi han diversos mètodes per ajustar els paràmetres, el més comú es ajustar-los segons la derivada d'una funció anomenada funció de pèrdua o *loss function*, usualment representada per la lletra $\mathcal{L}$. Aquesta funció representa els objectius del programa i pot ser minimitzada o maximitzada, per exemple, en una regressió

[1] No obstant, col·loquialment s'utilitza per denominar a qualsevol algoritme o robot que és intel·ligent o sembla que és intel·ligent.

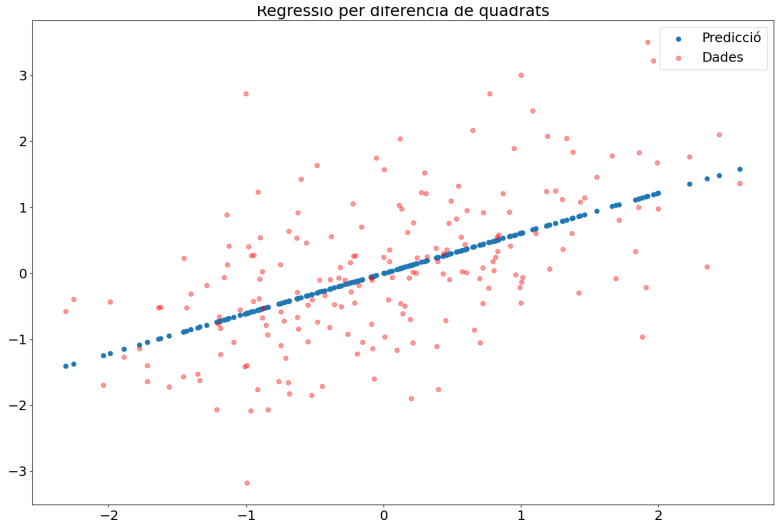


Figura 3.1: Exemple d'una regressió lineal de dades generades al atzar. Veure el codi a E.1.0.1.

lienal es vol reduir la distancia entre els *data points* o dades i la línia que prediu la tendència, Fig. 3.1.

Degut a que es poden realitzar molts tipus de funcions de pèrdua, ja sigui per la forma de la funció en si o per els paràmetres de la funció. Per conseqüència, el programes de *machine learning* són extremadament versàtils, la màxima expressió d'això es pot veure en les xarxes neuronals o *neural networks*. Aquests algoritmes són els més potents, complexos i polivalents. Precisament utilitzo un d'aquests per generar les imatges. Són àmpliament utilitzats pel reconeixement d'imatges, traducció i sintetització de textos, conducció automàtica, algoritmes de recomanació i es clar, generació d'imatges [citation].

3.1 Xarxes neuronals

Aquests tipus d'algoritmes que entren dintre de la categoria de *machine learning* no tenen un nombre que fa recordar a les xarxes de neuronals que formen part del nostre sistema nerviós central per casualitat, estan directament inspirades en els nostres cervells. Són uns programes que consisteixen en la connexió de diverses operacions anomenades neurones, que conjuntament formen una xarxa, la qual s'organitza a partir de capes. Segons la variació del tipus de neurona i la estructura que aquestes formen podem tindre algoritmes destinats a fer diferents tasques. Això juntament amb els diversos tipus de funció de pèrdua contribueix

a la versatilitat de les xarxes neuronals. Aquests models d'intel·ligencia artificial constitueixen el camp del *deep learning* o aprenentatge profund. S'anomenen d'aquesta forma per referenciar la profunditat d'aquests algoritmes, es a dir el nombre de capes que tenen.

Una neurona consisteix simplement en una suma ponderada, una altra suma i una funció no lineal que s'aplica al resultat. Les neurones tenen com input i output vectors. Per tant, una neurona es pot definit com:

$$\sigma\left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b\right) = \sigma\left(w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n + b\right)$$

Per σ sent una funció no lienal i n sent la mida del vector. Després estan el paràmetres, w_i i b, anomenats *weights* i *bias*. Aquests paràmetres tenen una utilitat pot clara, per això tenim que parlar en termes d'importància. En altres paraules, com afecta cada paràmetre a una part de la xarxa i també com afecta aquest al output de la xarxa. Després de deixar clara l'equació s'ha d'il·lustrar la interconnectivitat que tenen les neurones entre si.

Una neurona pot tindre diversos inputs que venen de diverses neurones, el mateix passa amb els outputs. Depèn de com es connectin entre si o de quina operació addicional fan les neurones, aquestes formen diversos tipus de capes. A partir de les tipus de capes i el nombre d'aquestes es com s'especifica l'arquitectura d'una xarxa neuronal. Tornant a l'utilitat del paràmetres, un *weight* especifica com de forta es la relació entre una neurona en una capa i una altre neurona en una capa veïna. I un *bias* especifica com d'important és una neurona, degut a que aquest número afecta al resultat de la suma de la neurona, fent que aquesta sigui més alta.

Usualment l'arquitectura es divideix en tres parts la capa d'input, les capes ocultes i la capa d'output. La quantitat de neurones que hi han a la capa d'inputs es la que defineix la mida del vector que es dona com input a la xarxa, degut a que cada element del vector es dona a cada neurona amb la capa. El mateix passa amb la capa d'outputs, cada output de cada neurona de la capa acaba sent un element en el vector que surt de la xarxa. Per tant el número de neurones que té cadascuna d'aquestes dues capes, especifica la mida del vectors d'input i d'output de la xarxa respectivament. Per exemple si es vol donar com input a una xarxa una imatge de 16 per 16 píxels[2] calen 256 neurones en la capa d'inputs, una per cada pixel.

[2]Una imatge en blanc i negre.

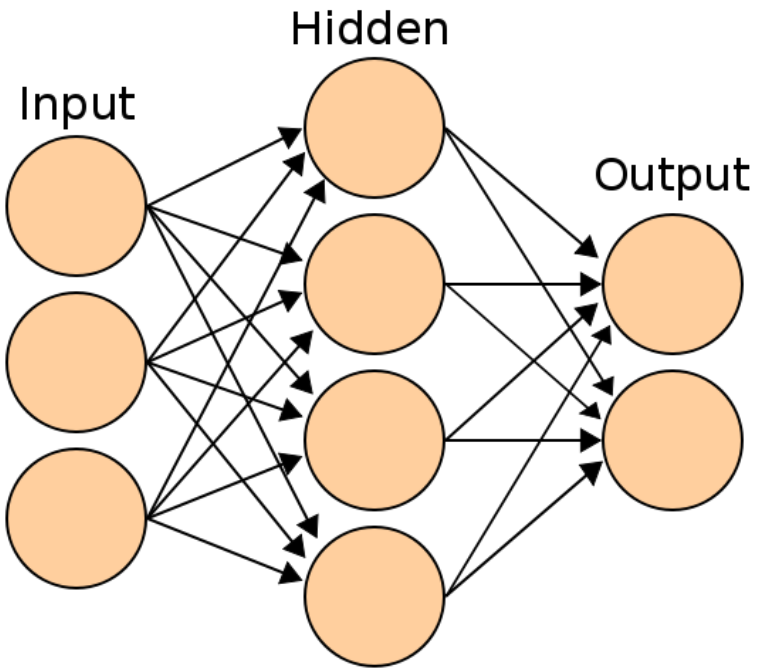


Figura 3.2: Usualment les xarxes neuronals es representen d'aquesta forma, amb fletxes i boles. Les boles representarien cada neurona i les fletxes mostren com estan connectades. La *hidden layer* d'aquesta representació es pot veure que és una *fully connected layer* degut a com està connectada a les altres capes, rebent cada neurona el output de cada neurona anterior.

En canvi, les *hidden layers*, es a dir les capes ocultes, no tenen una mida determinades, el mateix passa amb el nombre d'aquestes que té la xarxa. Depenen de cada cas, la quantitat de neurones que tenen aquestes capes i també el nombre d'aquestes, varia. Això, juntament amb el diversos tipus de capa és el que dona la versatilitat d'aquests algoritmes, com ja he comentat.

Entre els diferents tipus de capes que ponen tindre les xarxes neuronals, el més comú i simple d'aquestes és una *fully connected layer*, o una capa completament connectada, veure la figura 3.2. Les neurones que formen aquesta capa estan connectades a totes les neurones de la capa anterior i així mateix a totes les neurones de la capa següent. La forma que tenen aquestes capes de variar es mitjançant la mida que tenen, es a dir, la quantitat de neurones que tenen. No obstant, també poden variar en la funció d'activació que tenen, que ha de ser una funció no lineal. A continuació estan les funcions d'activació més utilitzades:

1. **Sigmoid:**
$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$
Una sigmoide de tota la vida.

2. **ReLU:** *Rectified Linear Unit (ReLU)*
$$f(x) = \max(x, 0)$$
Per tant és una funció que dona zero si x es més petita que zero i x de lo contrari. Hi han diverses versions d'aquesta funció, per exemple, parametritzada $f(x) = \max(x, ax)$, on a és un paràmetre i la *Leaky ReLU* on dona x en cas de $x > 0$ i $0.01x$ en cas contrari.

3. **Tangent hiperbòlica:**
$$\tanh(x) = \frac{e^{x} - e^{-x}}{e^{x} + e^{-z}}$$
Una tangent hiperbòlica de tota la vida[3].

4. **Softmax:** Aquesta funció té com a input un vector de mida n, on les seus elements són $(z_1, z_2, \cdots z_n)$:
$$f(|z\rangle_i) = \frac{e^{|z\rangle_i}}{\sum_{j=1}^{n} e^{|z\rangle_j}}$$
S'utilitza a la última capa perquè el output sigui un vector que es pugui interpretar com probabilitats degut a que la suma dels elements dona 1 i cada element estarà en l'interval $[0, 1]$.

5. **Funció lineal:**
$$f(x) = x$$
Ja se que m'he referit a les funcions d'activació com funcions no lienals, però al ser aquestes xarxes tan versàtils i modulables pot fer una mica el que vulguis[4], i aquesta funció es utilitzada per alguns algoritmes.

Aquestes funcions teòricament es poden col·locar en qualsevol tipus de capa, però en la practica hi han certes 'normes', per exemple la funció *softmax* només s'aplica la capa d'output. Hi han diversos tipus de capes a destacar, sobretot les

[3] Però en realitat no se el que realment significa, se que hi han unes versions hiperbòliques de les funcions trigonomètriques, suposo que són el mateix per per un espai hiperbòlic.

[4] Mentre funcioni.

capes convolucionals que s'utilitzen alhora de treballar amb imatges, però parlaré d'elles durant aquest treball.

3.2 Descens del gradient

Una vegada he parlar de les xarxes neuronals, he de comentar com aquestes van evolucionant en el temps, es a dir com es van actualitzen a si mateixes per complir la tasca que s'ha li's ha encomanat. Ja he comentat que existeix una funció anomenada la *loss function*, la qual es deriva per actualitzar els paràmetres de la xarxa. En aquesta secció parlaré més en profunditat d'aquest mecanisme que s'anomena el descens (o ascens) del gradient.

Es comença amb la funció de pèrdua, que esmenta els objectius de la xarxa. Es a dir, els punts màxims i mínims d'aquesta funció representen els punts òptims de la xarxa, els punts als quals es vol arribar. Per exemple, si es volen classificar imatges de gats i gossos, s'assignen dos etiquetes a les imatges, 1 als gats i 0 als gossos. A partir de la funció de pèrdua *Binary Cross Entropy* o *Log Loss*, que serveix per problemes de classificació de dues classes com el nostre problema:

$$\mathcal{L} = -t\log(y) - (1-t)\log(1-y) \tag{3.1}$$

Per t_i sent la etiqueta real que ha de tenir l'imatge i y_i sent la etiqueta que el model dona a l'imatge. Per tant si l'etiqueta real és 1, l'equació acaba sent:

$$\mathcal{L}_1 = -\log(y)$$

I el cas contrari per $t = 0$:

$$\mathcal{L}_0 = -\log(1-y)$$

Si donen com input l'imatge d'un gat i el programa es dona com output 0.92 tenim que la pèrdua és de:

$$\mathcal{L} = -t\log(y) - (1-t)\log(1-y) = -\log(0.92) \simeq 0.0834$$

En canvi, si el programa es dona un output de 0.15 la pèrdua seria:

$$\mathcal{L} = -t\log(y) - (1-t)\log(1-y) = -\log(0.15) \simeq 1.897$$

Es pot veure que si l'etiqueta que posa el model s'allunya més de l'etiqueta real la pèrdua és més gran. El mateix es pot veure per les imatges del gossos o en altres paraules les imatges que haurien de tenir etiqueta zero:

$$\mathcal{L} = -0 \cdot \log(0.89) - (1-0) \cdot \log(1-0.89) = -\log(1-0.89) \simeq 2.207$$
$$\mathcal{L} = -0 \cdot \log(0.08) - (1-0) \cdot \log(1-0.08) = -\log(1-0.08) \simeq 0.0834$$

Per tant quan més pròximes estén les prediccions (els outputs del model) a les etiquetes del programa, menor serà la pèrdua, llavors al minimitzar la funció es trobarà el punt òptim on totes les prediccions seran iguals a les etiquetes o ho seran pràcticament.

A aquests punts òptims s'arriba actualitzant els paràmetres a través de la derivada, concretament a través del gradient. El gradient d'una funció és un vector[5] on els elements són la derivada parcial respecte a cada paràmetre (per aclarir, un element per paràmetre). El gradient d'una funció $f(\theta)$ es representa com $\nabla f(\theta)$, i es pot escriure en forma de vector com:

$$\nabla f(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \theta_1} \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_{n-1}} \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_n} \end{bmatrix}$$

No fa falta fixar-se en lo que és exactament un gradient, l'únic que importa es que cada paràmetre de la xarxa neuronal[6] s'ha d'actualitzar acorde amb la derivada.

Al fer la derivada de la funció de pèrdua es pot veure immediatament que s'ha d'aplicar la regla de la cadena, ja que s'ha de fer la derivada del output de la xarxa neuronal degut a que depèn del paràmetre. Al ser les xarxes neuronals funcions molt complexes, s'utilitza una tècnica concreta per efectuar la derivada de la xarxa neuronal, el *backpropagation*.

[5] O més bé un camp vectorial.
[6] Cada *weight* i cada *bias*.

3.1 Backpropagation

Al aplicar la regla de la cadena 'de fora cap a dins' s'ha de començar a derivar per l'última capa i acabar per la primera, d'aquí ve el nom *backpropagation* perquè es propaga l'error en direcció contraria. Mentre que quan es dona un input a xarxa, s'anomena forward propagation o *forward pass*.

No entreré en profunditat sobre la *backpropagation* en aquesta secció, només en limitaré a esmentar la manera en la qual es calcula.

L'activació d'una neurona j en l'última capa L de la xarxa es defineix com:

$$a_j^L = \sigma\left(\sum_{j=0}^{n_{L-1}} w_{jk}^L a_k^{L-1} + b_j^L\right)$$

On a_k^{L-1} és l'activació d'una neurona k en la capa anterior $L-1$, i on el *weight* w_{jk}^L és el paràmetre que expressa en que mesura es connecta la neurona j a la neurona k. Com ja he dit, expressa com de forta és aquesta connexió. Utilitzant aquesta definició ja es poden fer les derivades. La suma es fa al llarg de n_{L-1} que és el nombre de neurones que té la capa $L-1$.

No obstant, convé definir el terme z_j^L per procedir a fer les derivades. Simplement és l'equació d'una neurona però sense la funció d'activació:

$$z_j^L = \sum_{j=0}^{n_L-1} w_{jk}^L a_k^{L-1} + b_j^L$$

L'objectiu és obtenir la derivada de la *loss function* respecte a un *weight* qualsevol i un *bias* qualsevol. Per tant, s'han obtenir les següents derivades parcials:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{jk}^L} \text{ i } \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b_j^L}$$

Començaré amb la derivada del *weight*, a aplicar la regla de cadena obtenim que:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{jk}^L} = \frac{\partial z_k^L}{\partial w_{jk}^L}\frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L} \tag{3.2}$$

L'última derivada, 'la que està més afora' és simplement la derivada de la funció de pèrdua respecte al output de la xarxa. En el cas de la funció de pèrdua

Squared Error, és[7]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L} = \frac{\partial}{\partial a_j^L}\left(a_j^L - y\right)^2 = 2(a_j^L - y)$$

On y és la predicció desitjada del model. A continuació, la derivada del resultat de la neurona a_j^L respecte a z_j^L, que és la derivada la funció d'activació.

$$\frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L} = \sigma'(z_j^L)$$

Per últim tenim la derivada de z_j^L respecte al *weight*:

$$\frac{\partial z_j^L}{\partial w_{jk}^L} = a_k^{L-1}$$

La derivada és la neurona anterior, cal recordar que el *weight* lo que fa es establir la connexió entre dues neurones, les neurones j i k. Per tant l'equació 3.2 es pot escriure com[8]:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{jk}^L} = \frac{\partial z_k^L}{\partial w_{jk}^L}\frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L} = a_k^{L-1}\sigma'(z_j^L)\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L}$$

No obstant falta un detall, la derivada d'una neurona que passa el resultat a diverses neurones, respecte a la *loss function*. És a dir:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^{L-1}} = \sum_{j=0}^{n_{L-1}} \frac{\partial z_j^L}{\partial a_k^{L-1}}\frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L}$$

La suma representa que aquesta neurona té un output que es propaga cap a endavant i afecta a les neurones que estan més endavant. A partir d'aquestes derivades ja es pot desenvolupar el vectors gradient, que es un vector en el qual estan totes les derivades de la *loss function* respecte a tots els paràmetres. Més concretament la mitjana d'aquestes derivades, perquè es vol actualitzar els paràmetres per poder minimitzar la pèrdua en totes les dades disponibles. En altres paraules, si es vol que una xarxa reconegui imatges de gats, se li té que ensenyar moltes imatges de gats. Si només se li ensenya una, només aprendrà a reconèixer aquella imatge.

Tota aquesta teoria es veurà implementada en la part pràctica en forma de

[7] No aplico la regla de la cadena en aquesta derivació perquè ja es té en compte en l'equació 3.2

[8] Deixo l'ultima derivada $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L}$ sense reescriure perquè aquest terme pot variar depenent de la funció de pèrdua que s'utilitza.

codi, degut a que m'he vista amb la necessitat de tenir una xarxa neuronal programada des de zero.

3.3 Generative adversial networks

Com ja he dit hi han molts tipus de xarxes neuronals, no obstant, en aquest treball només em centraré en un tipus en específic, les xarxes generatives adversatives o *generative adversial networks (GAN)* en anglès.

Aquestes xarxes, com el seu nom diu, s'utilitzen per generar dades, usualment s'apliquen a imatges. Es troben al darrera de projectes com *This person does not exist* [25, 26], una pàgina web que et genera una cara d'una persona que no existeix, degut a que es una cara generada artificialment a partir d'aquest tipus de models.

Aquests tipus de models van ser introduïts per primera vegada al 2014 per Ian Goodfellow [4], des de llavors s'han convertit en un dels models de *deep learning* més sòlids i utilitzats.

Aquests algoritmes consisteixen en dos models (xarxes) diferents, un generador i un discriminador, amb objectius oposats que s'enfrenen entres si. Per aquesta raó tenen la paraula adversatives en el nom. El generador i discriminador es poden entendre com uns falsificador de bitllets i uns policies que els volen atrapar, respectivament. Els policies es tornen millors al seu treball, podent distingir millor entre els bitllets falsificats i els reals. Els falsificadors responen a això millorant les seves tècniques de falsificació, per tant els policies han de millor encara més. Es un cicle en el qual aquestes forces antagonistes es fan millorar l'una al altra. El mateix passa amb el generador i el discriminador. El discriminadors aprèn a distingir entre les imatges reals i les imatges falses que fabrica el generador, mentre que el generador aprèn a enganyar al discriminador.

Si s'especifiquen bé els objectius de cada model, arribem a *zero sum game*[9] de teoria de joc. La manera en la que es soluciona es al arribar a un equilibri de Nash [5], on el discriminador no sap diferenciar entre les imatges reals i les falses[10]

En el paper original [4] s'esmenta un pseudocodi per aquests models:

[9] Un *zero sum game* es simplement un joc entre dos jugadors en que per guanyar un l'altre ha de perdre e.g. joc d'estirar la corda entre dos equips.

[10] Que el discriminador no sàpiga diferenciar no implica arribar a un equilibri de Nash, aquest concepte es definit d'una altra forma.

Algorithm 1 Pseudocodi per una xarxa generativa adversativa

for número de interacions **do**

for k pasos **do**

Treure minibatch de m mostres de soroll $\{z_i, \cdots, z_m\}$ de la distribució de soroll $p_g(z)$

Treure minibatch de m mostres d'exemples $\{x_i, \cdots, x_m\}$ de la distribució d'exemples $p_{\text{data}}(x)$

Actualitzar el discriminador ascendint el seu gradient:

$$\nabla_\theta \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} [\log D(x_i) + \log(1 - D(G(z_i)))]$$

end for

Treure minibatch de m mostres de soroll $\{z_i, \cdots, z_m\}$ de la distribució de soroll $p_g(z)$

Actualitzar el generador descendent el seu gradient:

$$\nabla_\theta \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} \log(1_D(G(z_i)))$$

end for

Capítol 4

Generació d'imatges amb un ordinador quàntic

Part II

Part Experimental

Part III

Conclusions

Appendices

Apèndix A

Més àlgebra lineal

Ja he escrit bastants pàgines sobre àlgebra lineal, però aparentment no eren les suficients perquè estic content amb el treball[1], així que aquí hi ha més àlgebra lineal.

A.1 Procediment de Gram–Schmidt

El procediment de Gram-Schmidt és un mètode utilitzat per produir bases per a espais vectorials [9]. Per un espai V amb producte interior de d dimensions amb el set de vectors $|v_1\rangle, \cdots, |v_d\rangle$, podem definir una nova base de vectors ortonormals $\{|u\rangle\}$. El primer element d'aquest set és $|u_1\rangle = |v_1\rangle / \||v_1\rangle\|$, amb el següent element $|v_{k+1}\rangle$ sent:

$$|u_{k+1}\rangle = \frac{|v_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k} \langle u_i|v_{k+1}\rangle |u_i\rangle}{\left\||v_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k} \langle u_i|v_{k+1}\rangle |u_i\rangle\right\|}$$

Per k en el interval $1 \leq k \leq d-1$.

Si seguim per k en $1 \leq k \leq d-1$, obtenim el set de vectors $|u_1\rangle, \cdots, |u_d\rangle$ que es una base vàlida per l'espai ortonormal per l'estai V. Els vectors creats han de tindre el mateix span[2] que el dels vectors que originalment eren la base per V:

$$\text{span}(\{|v\rangle\}) = \text{span}(\{|v\rangle\}) = V$$

[1] Hi han moltes coses guays i interessants que vull explicar.

[2] L'span d'un set de vectors són totes les combinacions lineals possibles amb aquests vectors.

Cal notar que l'span de del set base és la definició del espai. En altres paraules, cada vector en V pot ser representat per una combinació del vectors base.

La prova de que és una base ortonormal és bastant simple: Podem veure immediatament que els elements de $\{|u\rangle\}$ són vectors unitaris perquè estan normalitzats (els vectors $|v_{k+1}\rangle - \sum_{i=1}^{k} \langle u_i|v_{k+1}\rangle |u_i\rangle$ estan dividits per la seva norma). També podem veure que són ortogonals els uns als altres mirant que el producte interior entre els doni 0:

Per $k = 1$:

$$|u_2\rangle = \frac{|v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle |u_1\rangle}{\||v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle |u_1\rangle\|}$$

Per tant el producte interior amb $|v_1\rangle$ és:

$$\begin{aligned}
\langle u_1|u_2\rangle &= \langle u_1| \left(\frac{|v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle |u_1\rangle}{\||v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle |u_1\rangle\|} \right) \\
&= \frac{\langle u_1|v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle \langle u_1|u_1\rangle}{\||v_2\rangle - \langle u_1|v_2\rangle |u_1\rangle\|} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Per inducció podem veure que per $j \leq d$, amb d sent la dimensió del espai vectorial:

$$\begin{aligned}
\langle u_j|u_{n+1}\rangle &= \langle u_j| \left(\frac{|v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle |u_i\rangle}{\||v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle |u_i\rangle\|} \right) \\
&= \frac{\langle u_j|v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle \langle u_j|u_i\rangle}{\||v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle |u_i\rangle\|} \\
&= \frac{\langle u_j|v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle \delta_{ij}}{\||v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle |u_i\rangle\|} \\
&= \frac{\langle u_j|v_{n+1}\rangle - \langle u_j|v_{n+1}\rangle}{\||v_{n+1}\rangle - \sum_{i=1}^{n} \langle u_i|v_{n+1}\rangle |u_i\rangle\|} \\
&= 0
\end{aligned}$$

Tot això no és veu molt clar al principi però cal recordar que el producte interior de dos vectors ortonormals és zero, i que el producte interior entre el mateix vector unitari és un.

A.2 Curs ràpid de la notació de Dirac

A la taula següent hi ha un resum de conceptes matemàtics de l'àlgebra lineal importants expressats en la notació de Dirac[3] [27]

Notació	Descripció
z	Nombre complex
z^*	Conjugat complex d'un nombre complex z. $(a+bi)^* = (a-bi)$
$\|\psi\rangle$	Vector amb una etiqueta ψ. Conegut com *ket*
$\|\psi\rangle^T$	Transposada d'un vector $\|\psi\rangle$
$\|\psi\rangle^\dagger$	Conjugat Hermitià d'un vector. $\|\psi\rangle^\dagger = (\|\psi\rangle^T)^*$
$\langle\psi\|$	Vector dual a $\|\psi\rangle$. $\|\psi\rangle = \langle\psi\|^\dagger$ i $\langle\psi\| = \|\psi\rangle^\dagger$. Conegut com *bra*
$\langle\varphi\|\psi\rangle$	Producte interior dels vectors $\langle\varphi\|$ i $\|\psi\rangle$
$\|\varphi\rangle\langle\psi\|$	Producte exterior del vectors $\langle\varphi\|$ i $\|\psi\rangle$
$\|\psi\rangle \otimes \|\varphi\rangle$	Producte tensorial del vectors $\|\varphi\rangle$ i $\|\psi\rangle$
0	Vector zero i operador zero
$\mathbb{I}_n$	Matriu identitat de dimensions $n \times n$
$\mathbb{C}_n$	Espai vectorial complex de dimensió n
$\mathbb{C}_1$ o $\mathbb{C}$	Espai del nombres complexos

A.3 Més on la traça parcial

[3] La notació utilitzada per un espai vectorial complex i l'espai dels nombres complex no són de la notació de Dirac estàndard, però les poso per explicar el que signifiquen.

Apèndix B

Quantum Computation vs Quantum Mechanics

On the introduction I mentioned that one of the reasons for with I started learning and researching quantum computing is because it is easy, on this appendix I am going to present why this is the case with a practical example.

On quantum mechanics the more general way to represent quantum state, like the orbitals of an atom of hydrogen, are wavefunctions, not statevectors. Wavefunctions are extremely useful, however, working with them adds a hole new level of complexity because they are continuous functions that depend on time. Compare them with vectors, which are discrete packets of information that evolve through discrete amounts of time.

B.1 Normalizing

Because the probabilistic interpretation of both statevectors and wavefunctions, these two objects have to be normalize upon measurement, thus making the total sum of probabilities 1. How to normalize these objects is a perfect example to illustrate the difference in complexity that I see between quantum mechanics and quantum computation.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

Figura B.1: **Schrödinger's Equation**. Where $\hbar$ is $h/2\pi$, and V is the potential energy function.

For a wavefunction Ψ that represents a particle, the probability of finding the particle in a point x is $|\Psi(x,t)|^2$. Then, the wavefunction has to be normalized like the following:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \; = 1 \tag{B.1}$$

Since the wavefunctions evolves over time with the Schrödinger equation, see Fig.B.1, any solution this equation has to be normalized. Luckily, if the wavefunction is normalized at time $t = 0$ it stays this way, in other words, the Schrödinger equations preserves the normalization of the wavefunction [28].

We can prove that the equation, preserves B.1, starting from the trivial equality:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \; = \frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx$$

By the product rule we have that[1]:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi$$

Now the Schrödinger equation says that

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi$$

then by taking the complex conjugate we have that

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*$$

so

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right]$$

finally we can evaluate the integral from the start:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \; = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

[1] A partir d'ara escriuré $\Psi(x,t)$ simplement com Ψ per no fer les equacions tan enrevessades.

Because $\Psi(x,t)$ has to go to zero when x goes to either infinity, is true that:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \; = 0$$

Thus the integral is constant and went Ψ is normalized at $t = 0$, it stays that way for any t (positive of course).

falta la prueba para la normalización de un statevector

Apèndix C

Polarització d'un fotó

En l'equació 2.1 he exclusit el concepte de fase, que determina el tipus de polarització que té un fotó. Hi han 3 tipus:

1. **Linear:** Un fotó té polarització lineal quan els angles de la fase α_x, α_y en els estats base $|x\rangle, |y\rangle$ són iguals:

$$\begin{aligned} |\nearrow\rangle &= \cos(\theta)e^{i\alpha_x}|x\rangle + \cos(\theta)e^{i\alpha_y}|y\rangle \\ &= [\cos(\theta)|x\rangle + \sin(\theta)|y\rangle]e^{i\alpha} \end{aligned}$$

   On $\alpha = \alpha_x = \alpha_y$.

2. **Circular:** Quan els angles α_x, α_y son separats per exactament $\frac{\pi}{2}$ i la amplitud per les dos bases és la mateixa:

$$\begin{aligned} |\nearrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\cos(\theta)e^{i\alpha_x}|x\rangle \pm i\frac{1}{\sqrt{2}}\sin(\theta)e^{i\alpha_y}|y\rangle \\ &= [\cos(\theta)e^{i\alpha_x}|x\rangle \pm i\sin(\theta)e^{i\alpha_y}|y\rangle]\frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

   On el signe $\pm$ indica la diferencia entre la diferencia entre la polarització circular cap a la dreta o la esquerra, amb $+$ i $-$, respectivament.

3. **El·líptica:** On els angles α_x, α_y son diferents per una quantitat arbitraria[1]:

$$|\nearrow\rangle = \cos(\theta)e^{i\alpha_x}|x\rangle + \sin(\theta)e^{i\alpha_y}|y\rangle$$

   Aquest és el cas més general.

[1] Però que no sigui la quantitat que dona a terme la polarització circular.

Apèndix D

Complexitat i algoritmes quàntics

En ciència de la computació existeix el concepte de *Big-O Notation*, una forma d'expressar lo eficients que són els algoritmes per fer certes tasques, en altres paraules la complexitat dels algoritmes. Bàsicament es una forma de classificar-los segon la rapidesa que tenen en ver la tasca que els correspon, aquesta rapidesa no és mesura en segons, degut a que aquesta mètrica pot variar d'ordinador a ordinador per les diferencies en hardware que aquest poden tindre. En canvi es mesure en nombre d'operacions o temps directament, però sense unitats.

La *Big-O Notation* consisteixes en definir el temps màxim que necessita un algoritme, es denota com $O(\cdot)$ on l'argument usualment depèn de n que és la mida del input al algoritme, per exemple un algoritme de cerca ha de cercar a través de n coses. Com a un exemple més concret tenim que un l'algoritme de cerca de cadenes binaries corre en un temps $O(\log_2 n)$, on n és el nombre de cadenes entre les quals ha de cercar. Recorda que la notació $O(\cdot)$ és el màxim, es a dir es *upper bounded*, això significa que $\log_2 n$ és la quantitat de temps més gran en la que es troba la cadena, també es possible que es trobi-s'hi a la primera comprovació que es va[1], llavors l'algoritme acabaria en un temps $O(1)$. Simplement és una manera de mirar lo eficients que són els algoritmes en relació a la mida del input que tenen.

Amb aquesta notació tenim una manera de comparar la eficiència que tenen els algoritmes quàntics amb la del clàssics que tenen la mateixa funció.

[1] Que la primera cadena que es cerca, és la que s'ha de trobar.

D.1 Algoritme de Grover

Al 1996, Lov Grover va presentar un algoritme quàntic per cercar en dades desordenades [29] (e.g. cercar el número de telèfon d'una persona en una llista desordenada). Per aquest problema un algoritme clàssic té una complexitat de $O(N)$ cerques[2], mentre que l'algoritme de Grover té una complexitat de $O(\sqrt{N})$, sent substancialment més eficient. En les paraules de Grover [29] (adaptades), un ordinador clàssic per tindre un probabilitat de $\frac{1}{2}$ de trobar el número de telèfon d'una persona en una llista desordenada necessita mirar a un mínim de $\frac{N}{2}$ números, mentre que amb el seu s'obté el número de telèfon en només $O(\sqrt{N})$ passos[3].

L'algoritme funciona de la següent manera:

[2] Una cerca és quan es verifica si un element de la llista és l'element que es cerca.

[3] Per passos entenc que es refereix al nombre de vegades que es mira al oracle, es a dir el nombre que de vegades que es verifica si s'ha trobar el que es cerca.

Apèndix E

Codi

En l'apèndix actual presentaré el codi que he utilitzat al llarg del treball. Està organitzat segons el moment en el qual he referenciat el codi en el text.

E.1 Part I

E.1 Capítol 3

E.1.0.1 Regressió lienal Codi per efectuar una regressió lineal a dades que es generen al atzar en el mateix arxiu, l'utilitzo per poder generar una gràfic per il·lustrar un exemple de regressió lienal. Aquest troç de codi l'he tret d'un repositori de GitHub[1]

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
import matplotlib

font = {'family' : 'Helvetica',
  'size'   : 18}

matplotlib.rc('font', **font)

# generate the data
np.random.seed(222)
```

[1] text

```
12  X = np.random.normal(0,1, (200, 1))
13  w_target = np.random.normal(0,1, (1,1))
14  # data + white noise
15  y = X@w_target + np.random.normal(0, 1, (200,1))
16
17  # least squares
18  w_estimate = np.linalg.inv(X.T@X)@X.T@y
19  y_estimate = X@w_estimate
20
21  # plot the data
22  plt.figure(figsize=(15,10))
23  plt.scatter(X.flat, y_estimate.flat, label="Prediccio")
24  plt.scatter(X.flat, y.flat, color='red', alpha=0.4, label="Dades"
     )
25  plt.tight_layout()
26  plt.title("Regressio per diferencia de quadrats")
27  plt.legend()
28  plt.savefig("least_squares.png")
29  plt.show()
```

Listing E.1: Regressió lineal

Bibliografia

[1] Maria Schuld, Ilya Sinayskiy, and Francesco Petruccione. The quest for a quantum neural network. *Quantum Information Processing*, 13:2567–2586, 2014. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[2] Michael Broughton, Guillaume Verdon, Trevor McCourt, Antonio J. Martinez, Jae Hyeon Yoo, Sergei V. Isakov, Philip Massey, Ramin Halavati, Murphy Yuezhen Niu, Alexander Zlokapa, Evan Peters, Owen Lockwood, Andrea Skolik, Sofiene Jerbi, Vedran Dunjko, Martin Leib, Michael Streif, David Von Dollen, Hongxiang Chen, Shuxiang Cao, Roeland Wiersema, Hsin-Yuan Huang, Jarrod R. McClean, Ryan Babbush, Sergio Boixo, Dave Bacon, Alan K. Ho, Hartmut Neven, and Masoud Mohseni. Tensorflow quantum: A software framework for quantum machine learning. 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[3] IBM. Ibm quantum experience, 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[4] Ian J. Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, and Yoshua Bengio. Generative adversarial networks. 2014. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[5] He-Liang Huang, Yuxuan Du, Ming Gong, Youwei Zhao, Yulin Wu, Chaoyue Wang, Shaowei Li, Futian Liang, Jin Lin, Yu Xu, and et al. Experimental quantum generative adversarial networks for image generation. *Physical Review Applied*, 16(2), 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[6] Gilbert Strang. Linear algebra mit ocw, 2011. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[7] Gilbert Strang. Matrix methods in data analysis, signal processing, and machine learning mit ocw, 2018. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[8] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[9] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 66. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[10] Sheldon Axler. *Linear Algebra Done Right*, chapter 3, pages 37–58. Springer, 2 edition, 1997.

[11] Sheldon Axler. *Linear Algebra Done Right*, chapter 3, pages 48–52. Springer, 2 edition, 1997.

[12] Wolfram MathWorld. L2-norm, 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[13] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 74. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[14] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 73. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[15] Wikipedia. Tensor product, 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Link].

[16] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 80–96. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[17] Asher Peres. *Quantum Theory: Concepts and Methods*, chapter 2, pages 24–29. Kluwer Academic Publishers, 2002.

[18] Eleanor Rieffel and Wolfgang Polak. *Quantum Computing: A Gentle Introduction*, chapter 2, pages 12–13. MIT Press, 1 edition, 2011.

[19] Wikipedia. Inverter (logic gate), 2021. [Online; accedit en 04/10/2021: Link].

[20] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 99. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[21] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 105. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[22] Eleanor Rieffel and Wolfgang Polak. *Quantum Computing: A Gentle Introduction*. MIT Press, 1 edition, 2011.

[23] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 105–106. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[24] Eleanor Rieffel and Wolfgang Polak. *Quantum Computing: A Gentle Introduction*, chapter 10, pages 212–213. MIT Press, 1 edition, 2011.

[25] Tero Karras, Samuli Laine, Miika Aittala, Janne Hellsten, Jaakko Lehtinen, and Timo Aila. Analyzing and improving the image quality of stylegan. 2020. [Online; accedit en 26/10/2021: Link].

[26] lucidrains. This person does not exist, 2021. [Online; accedit en 26/10/2021: Link].

[27] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, page 62. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[28] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*, chapter 1, pages 11–12. Prentice Hall, 1995.

[29] Lov K Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 212–219, 1996. [Online; accedit en 05/10/2021: Link].