Generant Imatges amb un Ordinador Quàntic

TREBALL DE RECERCA DE BATXILLERAT

IES [REDACTED]

Autor:
tominabo
2n Batxillerat

Tutor:
[REDACTED]

Institut [REDACTED]

9 de gener de 2022
Barcelona, Barcelona

Índex

Abstract

Quantum Machine Learning is one of the most promising applications of Quantum Computing. In this work, I present a Quantum Generative Adversarial Network (qGAN) for generating gray-scale bar images. Through the Fréchet Distance score, I evaluate the effectiveness of a partial measurement on the simulated quantum circuit that generates the images. This score shows that the measurement improves qGAN performance by avoiding an oscillation on the resemblance between the generated and the real images, that is, an alternation of good and poor quality generated images that occurs through optimization of the qGAN.

El Aprendizaje Automático Cuántico es una de las aplicaciones más prometedoras de la Computación Cuántica. En este trabajo, presento una Red Generacional Adversaria Cuántica (qGAN en inglés) para generar imagenes de barras en una escala de grises. A través de la puntuación de la Distance de Fréchet, evalúo la efectividad de una medida parcial en el circuito cuántico que genera las imagenes. Esta puntuación muestra que esta medida mejora el rendimiento de la qGAN al evitar una oscilación en el parecido entre las imagenes generadas y las reales, es decir, una alternancia entre imagenes generades de buena y mala calidad que se da a cabo a través de toda la optimización de la qGAN.

Nota al tribunal

Aquest document ha estat pensat per llegir-lo en un PDF, tot el text que està marcat en blau és hipertext que apunta a un enllaç web o a una altra part del treball. No obstant això, tots els documents referenciats no són accessibles immediatament, però si es vol accedir a un d'aquests només fa falta preguntar-me. Si el lector vol accedir als enllaços web ho pot fer a partir del PDF, que el trobarà a: https://github.com/tomiock/qGAN

També vull demanar disculpes perquè hi ha algunes paraules que estan escrites en anglès al llarg del treball. Tot el que hi ha en aquest document ho he après en anglès (com es pot veure en tots els recursos de la bibliografia) i a vegades m'és molt difícil traduir el nombre dels conceptes que he après. A més a més aquest document està redactat en LaTeX una espècie de llenguatge de programació que s'utilitza per redactar documents que continguin expressions matemàtiques complexes. A causa de que la implementació del català en aquest programa no és excel·lent hi ha paraules soltes en anglès en la bibliografia i altres llocs.

Part I

Introducció

Des de fa més de dos anys, m'he dedicat a estudiar computació quàntica durant el meu temps lliure. Buscava investigar un camp relacionat amb la mecànica quàntica, però sense que sigui molt complicat, un camp que pugui entendre a un nivell teòric i que m'entusiasmi.

La Computació Quàntica encaixa perfectament amb aquests criteris. És més senzilla que la mecànica quàntica pel fet que no està basada en càlcul o equacions diferencials; en canvi, es basa en l'àlgebra lineal, utilitzant valors discrets, vectors i matrius. A més a més, si es treballa a un nivell teòric senzill, no s'han de tenir en consideració les interpretacions físiques, aquest factor simplifica molt les coses.

La meva part favorita d'aquest camp és el *Quantum Machine Learning* (QML) que consisteix a dissenyar i aplicar conceptes de *Machine Learning* als ordinadors quàntics, com per exemple implementar en circuits quàntics les famoses xarxes neuronals, que estan darrere de la majoria d'intel·ligències artificials que veiem avui dia [1].

QML és un camp de recerca jove i en creixement, ja que els algoritmes d'aquest camp són ideals per a implementar-los amb els ordinadors quàntics actuals, els quals no són molt potents.

D'entre tots els tipus d'algorismes que existeixen dintre de QML m'he centrat en les xarxes neuronals quàntiques, anàlogues quàntiques de les xarxes neuronals tan utilitzades avui dia per a fer una gran varietat de tasques. M'he interessat particularment en elles pel fet que tenia experiència en el passat amb les xarxes neuronals clàssiques i havia vist que existeixen *frameworks* de programació per a treballar amb elles com *TensorFlow Quantum* [2] que em podien ajudar.

Per a endinsar-me en el camp de QML, vaig haver d'adquirir coneixements en àlgebra lineal, càlcul i física. Una vegada havia vist aquests conceptes em vaig dedicar a llegir papers que m'interessen i en un parell d'ocasions fins i tot vaig intentar implementar aquests algoritmes en *Python*. Pot semblar una cosa impossible, ja que, no tinc accés directe a un ordinador quàntic, no obstant

això, aquests no són necessaris perquè les operacions quàntiques poden ser simulades en un ordinador corrent d'escriptori. Però puc tenir accés a ordinadors quàntics, ja que IBM permet accedir als seus mitjançant *IBM Quantum Experience* [3], encara que mai he donat ús d'això degut a que no ho veia necessari.

En aquest treball de recerca m'he proposat implementar mitjançant codi un dels algorismes que he vist en un paper, una Xarxa Adversària Generativa Cuàntica (GAN, en anglès) [4] que genera imatges a partir d'un circuit quàntic [5].

Com a pregunta a investigar m'he proposat verificar la utilitat d'una funció no lineal que implementen els autors en els circuits quàntics que generen les imatges. Segons els autors aquesta funció millora el rendiment del model, és a dir, que les imatges són generades amb una major eficiència [5].

Part II

Marc Teòric

Capítol 1

Àlgebra lineal

Quan vaig començar a buscar informació sobre computació quàntica, en vaig ràpidament vaig adonarme'n que necessitava més coneixements matemàtics, com que no entenia gairebé res dels llibres sobre computació quàntica. Vaig tindre la que sort que durant aquell temps em van captar l'atenció una sèrie de vídeos sobre àlgebra lineal, que és justament la branca de les matemàtiques sobre la qual es basa la computació quàntica. Aquests vídeos són les lliçons que dona el professor Gilbert Strang a l'Institut Tecnològic de Massachusetts (MIT en anglès) [6, 7]. Una vegada havia vist gairebé tots els vídeos, ja tenia bastants conceptes apresos.

Aquelles lliçons em van ajudar a entendre les matemàtiques de *Quantum Computation and Quantum Information* [8] i *Quantum Computing: A Gentle Introduction* [32]. A poc a poc, vaig anar aprenent els fonaments matemàtics de la computació quàntica i mecànica quàntica.

En aquesta secció aniré explicant els conceptes bàsics de l'àlgebra lineal amb la finalitat de 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 és el conjunt de tots els vectors amb les mateixes dimensions i amb

certes propietats en comú. Per exemple $\mathbb{R}^3$ seria l'espai vectorial de tots els vectors de 3 dimensions els quals normalment s'utilitzen per representar punts en un espai tridimensional. En computació quàntica es fan servir uns espais vectorials anomenats espais de Hilbert, que són aquells en els que hi ha definit un producte interior [9]. En els espais de Hilbert es defineixen un conjunt d'operacions amb certes propietats, les quals explicaré a continuació. S'ha de tenir en compte que els espais de Hilbert són molt més complicats que el que es representa en aquest treball, i que d'aquí en endavant, quan mencioni espai vectorial, em referiré a un espai de Hilbert.

Els espais vectorials estan definits per les seves bases, i.e. un conjunt de vectors independents $B = \{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$. Posat d'una altra manera: el conjunt B és una base pel 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 $|v_i\rangle \in B$.

La notació estàndard per l'àlgebra lineal en mecànica quàntica és la notació de Dirac, en la qual es representa un vector com $|\psi\rangle$ (on ψ és la etiqueta del vector). Un vector $|\psi\rangle$ amb n dimensions també pot ser representat com una matriu columna que té la forma:

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

Pels seus elements $\{z_1, z_2, \cdots, z_{n-1}, z_n\} \in \mathbb{C}$. Els vectors escrits com $|\psi\rangle$ s'anomenen *ket*.

En els espais de Hilbert es defineix una addició de vectors[1]:

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

I una multiplicació escalar:

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

Per a un escalar z i dos vectors $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$.

A més a més, hi ha definit un conjugat complex: Per $z = a + bi$, el seu conjugat z^* és igual a $a - bi$.

Aquesta noció es pot ampliar també a les matrius:

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

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

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

Un altre concepte important és la transposada, representada pel superíndex T que «rota» un vector o una matriu. Un vector columna amb una dimensió $n \times 1$

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

es transforma a un vector fila amb una dimensió $1 \times n$[2]:

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

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

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

La composició d'un conjugat complex i la transposada s'anomena el conjugat Hermitià, la seva notació és 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 Aplicacions lineals

Per poder operar amb vectors i fer operacions amb ells, s'utilitzen les matrius, que també son anomenades aplicacions lineal o transformacions lineals; noms que descriuen millor com funcionen aquests objectes. La definició formal d'una aplicació lineal pot ser bastant complicada, per aquesta raó, faré servir termes més informals en aquesta secció.

[2]En realitat els vectors columna son matrius amb dimensió $n, 1$, però he estat ometent el 1. Quan em refereixo a les dimensions d'un vector qualsevol, només diré un nombre, no obstant això, especificaré si és un vector columna o un vector fila.

Bàsicament, una aplicació lineal transforma un vector en un altre vector, que poden o no ser d'espais diferents [10]. Millor dit: per un vector $|v\rangle$ en un espai V i un vector $|w\rangle$ en un espai W, una aplicació lineal A entre els vectors, fa l'acció:

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

En altres paraules, aquesta aplicació transforma un element del espai vectorial V en un element de l'espai vectorial W. Les aplicacions 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 una aplicació 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 la transformació lineal A, és cert 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 les aplicacions actuen. Cal notar que una aplicació lineal no té perquè ser una matriu necessàriament, per exemple, les derivades i les integrals son aplicacions lineals. Això es pot provar fàcilment al veure que compleixen els criteris especificats posteriorment. Tanmateix, les derivades i les integrals usualment no s'apliquen a vectors, sinó a les funcions, però és possible aplicar-les a vectors.

Les matrius serien la representació matricial de les aplicacions lineals [11].

1.2.1 Tipus d'aplicacions lineals

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

1. **Operador zero**

   Qualsevol espai vectorial té un vector zero expressat en notació de Dirac com a 0, pel fet que $|0\rangle$ és un altre concepte totalment diferent en CQ i IQ[3]. També es pot escriure com a 0. Es aquell vector que per qualsevol vector $|\psi\rangle$ i qualsevol escalar z, es compleix que:

   (a) És l'element neutre: $|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle$

   (b) I l'element nul pel producte escalar: $z0 = 0$.

2. **Matriu inversa**

   Una matriu quadrada[4] A és invertible si existeix una matriu A^{-1} de manera que $AA^{-1} = A^{-1}A = I$, on A^{-1} seria la matriu inversa de A. La manera més ràpida de saber si una matriu és invertible és verificant si el seu determinant no és zero.

3. **Matriu Identitat**

   Per a qualsevol espai vectorial V existeix una matriu I que és definida a partir de $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$, aquesta matriu no fa cap canvi als vectors als quals opera, ni tampoc a les matrius amb les quals es multiplica.

4. **Matrius Hermitianes**

   Una matriu Hermitiana compleix que:

   $$\langle\psi|\left(A|\varphi\rangle\right) = \left(A^{\dagger}\langle\psi|\right)|\varphi\rangle$$

   On $|\psi\rangle$ i $|\varphi\rangle$, són dos vectors de l'espai en el qual actua A. Aquestes matrius o operadors en mecànica quàntica són molt important, ja que són els observables d'un sistema quàntic. Per exemple l'operador del moviment lineal d'un electró és un operador hermitià.

5. **Matriu Unitària**

   Una matriu unitària és qualsevol matriu que no altera la norma[5] o longi-

[3] Computació Quàntica i Informació Quàntica.

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

[5] El concepte generalitzat de la longitud d'un vector. Usualment, parlaré de la norma ℓ_2, esmentada com $\|\cdot\|_2$, i definida com a $\||\psi\rangle\| = \sqrt{\psi_1^2 + \cdots + \psi_n^2}$.

tud dels vectors als quals és aplicada, per tant, una matriu és unitària si $A^\dagger A = I$ Per convertir qualsevol matriu en unitària, es divideixen els seus components entre la norma de la mateixa matriu.

1.3 Producte interior i producte exterior

1.3.1 Producte interior

Un vector dual $\langle a|$ i un vector $|b\rangle$ 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 nombre complex com a output [12]:

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

Amb $z, a_i, b_i \in \mathbb{C}$. Cal notar que els vectors $|a\rangle$ i $|b\rangle$ han de tenir la mateixa mida.

Aquest producte per dos vectors en $\mathbb{R}^2$ també es pot escriure com a:

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

Amb $\|\cdot\|_2$ sent la norma ℓ^2 i 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 això, segons el que he vist aquesta equació no es usada àmpliament, ja que interpretar θ com un angle entre vectors de dimensions altes no té molt de sentit.

Usualment, aquest producte es presentat en la seva interpretació geomètrica[6] com el producte entre un vector fila i un vector columna:

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

[6]Els detalls exactes de la interpretació geomètrica es troben fora del domini d'aquest treball, malgrat que m'agradaria molt parlar sobre el tema.

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

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

Tanmateix, la definició més comuna es basa en el producte interior. Com es pot veure el producte interior d'un vector per ell mateix és la suma dels seus components al quadrat:

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

Per tant, la norma pot ser definida com l'arrel quadrada del producte interior d'un vector [13]:

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

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

Segons el que he vist, algunes propietats de la longitud d'un vector bidimensional no es mantenen amb la norma d'un vector que té més de 2 dimensions. En altres paraules, la norma es comporta en certes maneres com la distancia des de l'origen (que és la definició de la longitud), però són exactament el mateix. A més d'això, hi ha diferents tipus de normes que s'utilitzen en diversos escenaris. Aquesta és la raó per la qual em refereixo a la norma; com la norma ℓ^2. A aquesta norma també se li diu norma Euclidiana [14].

1.3.1.1 Propietats del producte interior

Les propietats bàsiques del producte interior són les següents [15]:

1. És lineal en el segon argument $\langle a| \left(z_1 |b\rangle + z_2 |c\rangle\right) = z_1 \langle a|b\rangle + z_2 \langle a|c\rangle$
2. $\langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^*$
3. $\langle a|a\rangle$ és no negatiu i real, excepte en el cas de $\langle a|a\rangle = 0 \iff |a\rangle = 0$

1.3.2 Vectors ortonormals i ortogonals

A partir del concepte de norma sorgeixen els conceptes d'un parell de vectors ortonormals i un parell de vectors ortogonals. 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.

Dos vectors diferents de zero són ortogonals si el seu producte interior és zero. Si aquests vectors són bidimensionals, a partir de l'equació (1.1) podem veure que el cosinus de l'angle que fan entre ells és zero, són 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 són zero, les seves normes tampoc ho són.

Per tant el terme que falta $\cos\theta$ ha de ser igual a zero.

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

No obstant això, pensar que la perpendicularitat i l'ortogonalitat són els mateixos conceptes és un error, això només és veritat pels vectors bidimensionals. Perquè com en el cas de la norma i la longitud, l'ortogonalitat és el concepte de perpendicularitat però generalitzat [13].

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

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

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

Una altra cosa que remarcar és que al dir un parell de vectors, aquest parell també pot ser un conjunt de vectors. Si un conjunt està compost de vectors unitaris, i aquests són ortogonals entre ells, és un conjunt de vectors ortonormals. El conjunt 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:

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

1.3.3 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 a l'institut, i és una mica difícil d'entendre perquè agafa dos vectors que poden ser d'un espai diferent com input. És definit com:

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

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

Amb la seva acció definida per [12]:

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

A partir de l'equació (1.3) la utilitat i significat del producte són bastant complicats 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 element de $|b\rangle$ formant una matriu amb mida $m \times n$:

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

La utilitat d'aquest producte es mostrarà més endavant.

1.4 Producte tensorial

L'últim producte que mencionaré és el tensorial, representat pel 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, em centraré a explicar la manera amb la qual es computa, fent ús de la representació matricial d'aquest producte, anomenada el producte de Kronecker.

Per una matriu $m \times n$, A, i una $p \times q$ matriu B, el seu producte de Kronecker [16] 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 $a_{ij}B$ és 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 és multiplicat per la segona matriu:

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

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

El producte de Kronecker també funciona de la mateixa manera amb vectors:

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

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

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 això, no és molt comú fer-ho.

Si a una matriu A s'he li treu el producte tensorial de si mateixa n-vegades es pot escriure com a $A^{\otimes n}$, per exemple: $\psi^{\otimes 2} = \psi \otimes \psi$.

1.4.1 Propietats del producte tensorial

Les propietats bàsiques del producte tensorial són les següents[7] [17, 18]:

1. Associativitat:

   $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$

   $(zA) \otimes B = A \otimes (zB) = z(A \otimes B)$

   $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C)$

[7] Una cosa a notar és 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.

1.5 Traça

La traça d'una matriu és tal sols la suma dels seus elements en la diagonal principal, la diagonal que va de dalt a baix i d'esquerra a dreta. Cal notar que la matriu ha de ser quadrada.

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:

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

La traça d'una matriu té les propietats següents [19]:

1. És una aplicació lineal:
   Degut a que la traça és un aplicació lineal, 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 altra manera molt útil d'avaluar la traça d'un operador és a través del procediment de Gram-Schmidt i el producte exterior. Utilitzant Gram-Schmidt per representar el vector unitat $|\psi\rangle$ en una base ortonormal $|i\rangle$ que inclou $|\psi\rangle$ com el seu primer element, es compleix que [19]:

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

Capítol 2

Computació quàntica

Després de la teoria matemàtica, ha arribat el moment de parlar sobre mecànica quàntica; en aquest capítol introduiré alguns conceptes bàsics sobre Informació Quàntica i Computació Quàntica (IQ i CQ).

La mecànica quàntica és un marc matemàtic o conjunt de teories utilitzades per poder explicar les propietats físiques dels àtoms, molècules i partícules subatòmiques. És un marc que engloba tota la física quàntica, incloent-hi la teoria d'informació quàntica. La manera correcta de definir la computació quàntica és a través dels postulats de la mecànica quàntica, perquè amb aquests, les afirmacions que es fan en computació quàntica no semblen venir d'enlloc [20]. No obstant això, per no complicar més aquesta secció, faré el millor possible per poder explicar els conceptes de la computació quàntica sense entrar en els conceptes més generals de la mecànica quàntica, a no ser que sigui estrictament necessari.

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 els

sistemes es representen per estats quàntics, els quals són un tipus de distribucions de probabilitat que representen els possibles resultats d'una mesura en un sistema quàntic [21].

Imagina't que tens un bolígraf, però que no saps de quin color és, tanmateix, saps que pot ser vermell o blau. Per esbrinar el color, pots provar d'escriure per veure el color de la tinta, o en altres paraules, fer una mesura del sistema. Saps que hi ha un 50% de probabilitat que sigui vermell i un 50% que sigui blau. En aquesta situació hipotètica tindries el teu sistema quàntic (el bolígraf), una manera de mesurar-lo (escriure) i una llista amb els possibles resultats (50% vermell, 50% blau), només et falta una manera de representar-lo tot matemàticament, l'estat quàntic. Per tant, per què no intentem guardar la informació que sabem del bolígraf 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 que el bolígraf sigui vermell i la segona entrada 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 dels components d'un vector[1], en altres paraules la norma ℓ_1 d'aquest vector és 1.

Ara hem d'escollir una operació matemàtica per poder extreure la informació del vector, com que l'output ha de ser un nombre, podem provar d'utilitzar un producte interior. Però primer s'ha de representar el vector com una combinació

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

lineal de les seves bases:

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

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

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

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

Aquest procediment és bastant senzill com es pot veure. Per tindre un exemple una mica més complicat, per representar un bolígraf amb 6 colors possibles amb una possibilitat aleatòria d'escriure amb un color dels 6 possibles, l'estat d'aquest bolígraf podria ser[2]:

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

Ara per poder veure la probabilitat de per exemple que el bolígraf sigui de color verd, podem utilitzar la tercera base del vector, la qual correspon al color verd:

[2] L'he posat colors als elements per claredat.

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

Deixant els bolígrafs a una banda, 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[3]. Al mirar als fotons com ones que oscil·len en els camps electromagnètics, la polarització és l'orientació geomètrica de l'ona. La polarització pot ser interpretada com un angle respecte a la direcció de propagació.

Al definir les bases de l'estat de polarització com vertical i horitzontal, denotades pels vectors $|\rightarrow\rangle$ i $|\uparrow\rangle$, respectivament. Podem definir un estat de superposició entre les bases, representat com $|\nearrow\rangle$ [22]:

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

On α i β són números complexos. Un estat en superposició és simplement un estat on l'angle de polarització no és 0 ni $\frac{\pi}{2}$. No ens hem de preocupar de la descripció matemàtica exacta de la polarització dels fotons al parlar de computació quàntica perquè el que importa és la informació que porten aquests estats, no la física dels sistemes que representen.

Aquesta informació s'ha d'agafar mitjançant mesures, com amb els bolígrafs. Aquestes mesures en el cas de la polarització dels fotons seria passar els fotons per diversos filtres de polarització, els quals deixen passar el fotó o l'absorbeixen, tot això d'una manera probabilística, és a dir, depenent de quin sigui l'estat tenen certa possibilitat de ser absorbits o no.

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

Per clarificar, el filtre el que fa és col·lapsar el fotó en els dos possibles estats de polarització, l'estat en el qual el filtre és orientat o l'estat perpendicular a aquest. Si col·lapsa en l'estat del filtre el fotó passa pel filtre, en cas de col·lapsar en l'altre estat, el fotó és absorbit. La manera en la qual els fotons col·lapsen és probabilística, si agafem un filtre que està orientat horitzontalment respecte als fotons que li arriben, un fotó orientat horitzontalment té un 100% de possibilitats 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, és a dir a $\frac{\pi}{4}$, 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. Els estats que els representen simplement tenen la informació sobre quines són aquestes possibilitats. No obstant això, 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 aquesta 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

Els ordinadors moderns representen la informació a través de cadenes de zeros i uns, anomenades bits; des d'imatges a lletres o instruccions electròniques. Per exemple, la lletra t és representada per la cadena de bits 01110100, codificada a través de codi binari. Tot el que fas en un ordinador es codifica i representa en codi binari.

Gràcies al fet que estem molt acostumats al codi binari, en el camp de la computació quàntica també s'utilitza, no obstant això, en comptes de bits s'utilitzen qubits. Un qubit és 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[4]. Si un bit pot estar en l'estat 0 o en l'estat 1, un qubit pot estar en una combinació d'aquests estats, en un estat enmig del 1 i del 0. Un qubit és una combinació lineal dels vectors que representen aquests estats [23], $|0\rangle$ 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 espai de Hilbert bidimensional.

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 això, 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 nombres qualsevols, necessiten ser els coeficients que formin un vector amb una norma de 1:

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

Llavors:

$$\|\psi\| = \sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2} = 1$$
$$\Rightarrow |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

[4] Ja he parlat de la primera amb la polarització dels fotons, de l'entrellaçament parlaré més endavant.

Definir un qubit com una «combinació lineal dels estats fonamentals» no és de molta ajuda, per això, elaboraré més sobre aquesta definició: Una cadena de n-bits només pot representar una única combinació d'uns i zeros, mentre que una cadena de n-qubits representa una combinació concreta 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 nombres que representa és 2^n, on aquests nombres són els coeficients que corresponen a les combinacions lineals . Això és 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[5], no com els bits que al ser només una combinació es necessita només saber quina combinació és. No passa res si això no s'entén perfectament, el que és important és saber que es necessiten 2^n nombres complexos[6] per representar n-qubits i que es necessiten n números binaris per representar n-bits [24].

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

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \alpha_1 |00\rangle + \alpha_2 |01\rangle + \alpha_3 |10\rangle + \alpha_4 |11\rangle \\
&= \alpha_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \alpha_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

[5] Informació que es manifesta amb els coeficients de la combinació lineal
[6] Són complexos, ja que els coeficients de la combinació lineal són nombres complexos.

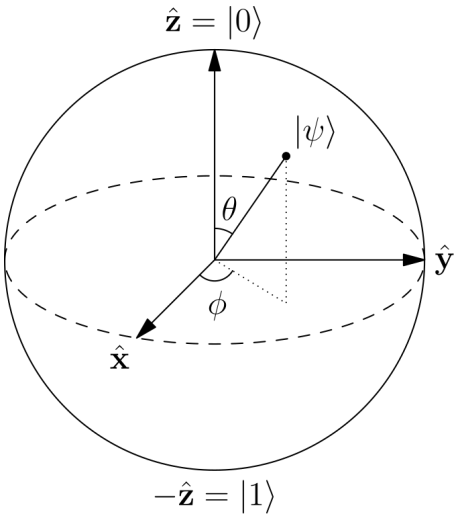


FIGURA 2.1: Esfera de Bloch, on es representa un estat arbitrari $|\psi\rangle$ amb els vectors $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}$ representat els eixos ortonormals de la esfera de radi 1.

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.

2.2.1 Representació geomètrica d'un qubit

Un aspecte que sempre m'ha agradat del qubits és la seva representació geomètrica, l'esfera de Bloch 2.1 [25]. Si agafem una esfera unitària[7] que té els seus pols nord i sur definits pels 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 $|1\rangle$.

2.2.2 Operacions per a només un qubit

Una vegada la informació és representada amb els qubits, estaria bé poder operar amb aquesta informació. Operar amb la informació és justament el que fa que els ordinadors siguin ordinadors, poder operar amb la informació. En computació

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

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

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

Podem veure com es fa aquesta l'acció al multiplicar la matriu pel 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 el 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 de matrius molt important , les matrius de Pauli, compost per 3 matrius: 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 importants en la mecànica quàntica[8] i són utilit-

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

zades àmpliament per descompondre portes lògiques quàntiques [26].

A partir d'elles podem elaborar matrius que facin una rotació d'un angle θ [26] qualsevol en un dels eixos de la representació geomètrica d'un qubit 2.1:

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

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

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

Per exemple la matriu $R_y(\cdot)$ (Eq.2.3) correspon a una rotació en l'eix $\hat{\mathbf{y}}$ de l'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. És a dir una superposició que tingui les mateixes probabilitats de resultar en $|0\rangle$ o $|1\rangle$. 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 a l'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 $|+\rangle$[9]. La probabilitat que un estat col·lapsi en una determinada base és el coeficient de la seva base elevat

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

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 dels coeficients es pot veure que dona $\frac{1}{2}$:

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

Llavors tenim que la probabilitat per obtenir els dos estats és la mateixa, és a dir que si mesurem l'estat $|+\rangle$ hi ha la mateixa probabilitat que surti $|0\rangle$ o $|1\rangle$. La porta lògica de Hadamard és molt important, ja que s'utilitza per crear distribucions uniformes, sigui en un qubit o en diversos[10].

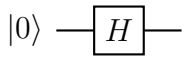
Altres operacions importants de només un qubit són les portes S i T:

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

2.2.3 Circuit quàntics

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

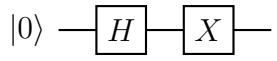
La forma de representar una porta H aplicada a un qubit és amb el circuit quàntic:



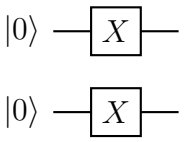
El qubit és representat per la línia que comença amb $|0\rangle$, amb $|0\rangle$ sent el seu estat inicial. Aquests diagrames es llegeixen d'esquerra a dreta, la mateixa forma en la qual s'apliquen les operacions.

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

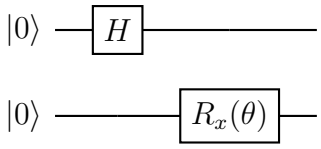
[10] S'aplica aquesta operació a cada qubit del sistema.



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



Amb els circuits quàntics també s'expressa l'ordre en el qual s'apliquen les portes, de esquerra a dreta. Un circuit de dos qubits, en el qual s'aplica una porta H en l'eix x en el segon qubit, seria:



Es pot veure que hi ha un ordre específic per aplicar aquestes portes, primer s'aplica la H i després la rotació.

2.2.4 Operacions per a múltiples qubits

El realment interessant és l'aplicació d'una porta a diversos qubits, perquè d'aquesta manera es pot arribar a tindre qubits entrellaçats. La porta més útil per entrellaçar qubits és la CNOT o *Controlled NOT*:

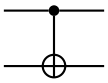
$$\mathrm{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.6}$$

Aquesta porta s'aplica a dos qubits, que anomenaré c i t. És bàsicament una porta X que està controlada pel qubit c: si c és $|1\rangle$, s'aplica la porta X al qubit t. El cas contrari, amb el qubit c sent l'estat $|0\rangle$, en el qubit t no s'aplicaria cap porta.

Però si el qubit c està en superposició, aquesta superposició passa també al qubit t, i al mesurar-lo, la probabilitat de què s'hagi aplicat la porta X al qubit t és la mateixa probabilitat de què c estigui en l'estat $|1\rangle$. Els qubits d'alguna manera han passat a compartir la superposició. Es considera que aquests qubits estan entrellaçats, una mesura a un d'ells afecta a la mesura de l'altre.

El qubit al qual se li aplica la porta X es diu *target* (que en l'explicació anterior seria el qubit t) i el qubit sobre el qual depèn el *target* és el *control* (que seria el qubit c).

Aquesta porta representada en un circuit s'escriu com:



On el qubit *control* és el primer i el segon és el *target*, el qubit que té el símbol $\oplus$[11].

2.2.4.1 Entrellaçament quàntic

L'exemple més senzill d'un entrellaçament quàntic en la computació quàntica són 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 [27]:

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

Es pot veure que només hi ha dos estats possibles $|00\rangle$ i $|11\rangle$ que tenen la mateixa probabilitat associada[12]. S'afecten l'un a l'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 altra part del sistema.

Matemàticament, un sistema quàntic, i.e. un conjunt de qubits, està entrellaçant quan aquest sistema no es pot descriure amb un producte tensorial de

[11] A vegades escriuré els circuits quàntics sense especificar l'estat inicial, ja que no és necessari.

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

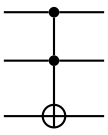
les parts. Per exemple estat $|00\rangle$ es pot escriure com $|0\rangle \otimes |0\rangle$, mentre que l'estat $\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}$, no. Per tant, el primer no és sistema amb qubits entrellaçats i el segon sí ho és.

A partir de l'entrellaçament i la superposició és com els ordinadors quàntics arriben a tenir avantatges en complexitat sobre els ordinadors clàssics, per a més informació sobre els avantatges que presenten els algoritmes quàntics en certes tasques i el concepte de complexitat algorítmica veure l'annex D.

2.2.4.2 Operacions controlades

A part de la porta CNOT existeixen diverses portes quàntiques controlades. Realment es 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 podnm haver-hi diversos qubits *control* i *target* [28].

Per exemple existeix la porta Toffoli:



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 a l'últim qubit en cas que els dos primers siguin $|0\rangle$.

Tornant a dos qubits, al veure la matriu per la porta CNOT, es pot apreciar que està composta per una matriu identitat i una porta X[13]:

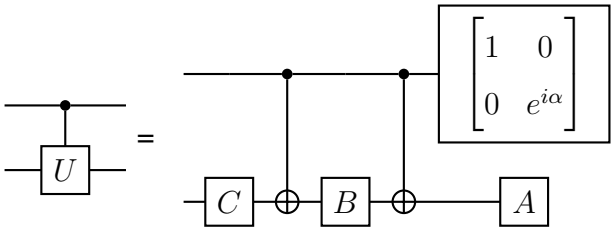
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

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. Aquesta porta en un circuit quàntic es representa de la següent manera:

Una operació controlada de qualsevol matriu unitària U es pot formar a través del següent circuit [28]:



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

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

2.3 Mesurament quàntic

Com ja s'ha esmentat a la secció 2.2.2 a l'elevar al quadrat el coeficient d'un estat base que forma part d'un estat, s'obté la probabilitat d'obtenir aquest estat base quan es mesura.

Aquesta és la forma més simple de poder predir el mesurament d'un estat quàntic. Però hi ha altres mètodes que a vegades resulten més útils.

Els mesuraments quàntics també es ponen pensar com un conjunt d'operadors de mesura M_m, on la probabilitat d'obtenir l'estat m associat a un operador M_m al mesurar un $|\psi\rangle$ és [29]:

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

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 1:

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

La diferència entre aquesta manera de fer les mesures i elevar els coeficients al quadrat, és que l'equació 2.7 és una forma més general, on en comptes de mesurar en la base computacional, es pot mesurar en qualsevol base.

Per mesurar en la base computacional d'un *statevector* s'utilitzen operadors de mesura derivats de la base computacional fets a partir de productes exteriors. Per crear l'operador de mesura 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 de l'estat $|\psi\rangle$ resulti en $|0\rangle$, és:

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

Per $|\psi\rangle = |0\rangle$ tenim que[14]:

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

El resultat té sentit, ja que si mesurem $|0\rangle$ en la base $|0\rangle$, la probabilitat de trobar l'estat hauria de ser 1.

2.4 Matriu de densitat

Una sèrie de qubits es pot representar tant per un vector com per una matriu, anomenats vector d'estat i matriu de densitat, respectivament [8]. En aquesta secció explicaré ràpidament sobre el concepte de matriu de densitat i com les operacions que s'apliquen a un vector d'estat poden ser aplicades a aquesta matriu. Després parlaré dels mesuraments parcials d'un sistema, un concepte que és important per la part experimental del treball.

Una matriu de densitat és la representació matemàtica d'un estat quàntic a partir d'una matriu. Aquest concepte en anglès s'anomena *density operator/matrix*. Aquesta representació serveix per descriure sistemes quàntics que no són completament coneguts. Concretament, aquestes matrius són conjunts d'estats quàntics: Per un sistema que es descriu com un conjunt d'estats $\{|\psi_i\rangle\}$ amb cada

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

element del conjunt tenint una probabilitat associada de p_i. La matriu densitat ρ del d'aquest sistema és [30]:

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

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

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

L'evolució d'un operador de densitat que descriu un sistema quàntic, igual que amb els vectors, s'efectua a partir de matrius unitàries. Un estat ρ evoluciona partir d'una matriu unitària U de la següent manera:

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

Igual que es fan mesures en els *statevectors*, les podem fer en els operadors de densitat. Per un operador de mesura M_m, tenim que la probabilitat de tindre l'estat m al mesurar un vector $\left|\psi\right\rangle$ o una matriu de densitat ρ, és:

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

També tenim que l'estat $\left|\psi\right\rangle$ després de la mesura m és [30]:

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

L'equació 2.8 es pot reescriure en termes d'una matriu de densitat després

d'una mesura m:

$$\rho_m = \sum_i p_i \frac{M_m |\psi\rangle \langle\psi| M_m^\dagger}{\mathrm{tr}\Big(M_m^\dagger M_m \rho\Big)} = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{tr}\Big(M_m^\dagger M_m \rho\Big)}$$

Perquè això sigui cert els operadors de mesura M_m, han 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 igual que els vectors d'estat han de tenir certes característiques:

1. La traça de ρ ha d'equivaldre a 1.
2. ρ ha de ser un operador positiu[15].

2.4.1 Matriu de densitat reduïda

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

Per un sistema físic compost per dos sistemes A i B que es descriu per una matriu de densitat ρ^{AB}, la matriu de densitat reduïda 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 [31]:

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

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

Amb $|a_1\rangle$ i $\langle a_2|$ sent estats vàlids 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 vectors del producte exterior són iguals i formen un operador de densitat vàlid, el qual té una traça de 1.

No obstant aquesta definició no es pot utilitzar quan no saps com representar la matriu de densitat ρ com a un producte tensorial, en el qual un dels termes és l'estat que es traça a fora. En altres paraules, en l'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.

A causa d'això en el llibre de text *Quantum Computing: A Gentle Introduction* [32] els autors defineixen la traça parcial d'una altra manera més general, on només s'ha de saber les bases dels sistemes A i B i un operador vàlid pel 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 $\{|\beta_i\rangle\}$ 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 $|\beta_j\rangle$ dels 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 ja que en els dos llibres utilitzen les seves definicions per tractar el mateix cas i obtenen el mateix resultat [33, 34].

2.4.1.1 Mesurament parcial

Es pot arribar a treure una mesura parcial[16] 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 que pertany a l'estat $|\psi\rangle$ com:

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

Essent Π_A un mesurament parcial definit com[17] a $\Pi_A = (|0\rangle \langle 0|)^{\otimes N_A}$, on N_A és el nombre de qubits sobre els quals es treu el mesurament parcial.

El sistema A al estar composts N_A qubits, per tant, la resta de l'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[18] que $|\psi\rangle \langle\psi|$, encara no he pogut utilitzar aquesta equació adequadament. No sé com computar-la. Aquest problema l'adreçaré en la part experimental del treball.

En el mateix article es planteja una altra equació, per l'estat post-mesura expressat en forma de vector d'estat, molt semblant a l'equació 2.8. L'única diferencia és que en l'equació de l'article no s'expressa l'operador de mesura en la forma $M_m^\dagger M_m$, en canvi, els autors ho expressen tan sols com $I_{2^N - 2^{N_A}} \otimes \Pi_A$. Potser la forma plantejada pels autors té en compte el conjugat hermitià, però no estic segur. L'equació esmentada en l'article és 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 amb l'altra equació, no sé com computar-la[19].

[16] És a dir, una mesura a només una part dels qubits que conformen un sistema.

[17] No estic completament segur d'això ja que els autors no defineixen aquest operador per aquesta equació en concret, però en un altre equació si que ho fan.

[18] En aquesta afirmació no tinc cap dubte, ja que no és necessita la definició de Π_A per poder afirmar-ho.

[19] Un cop entregat el treball me pogut veure que si que la puc computar, no obstant això, no

2.5 Ordinadors quàntics

Tota aquesta teoria és aplicada a través de qubits físics que s'ubiquen als ordinadors quàntics. Hi ha diversos tipus d'ordinadors quàntics, a causa del fet que els qubits poden ser diversos sistemes. Poden ser fotons, xips de silici superconductors o ions atrapats per imants. No elaboraré més sobre aquest tema, ja 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 necessàriament, perquè puc simular l'evolució dels estats quàntics amb un ordinador, al cap i a la fi, és només àlgebra lineal, són operacions que es poden fer perfectament en un ordinador. No obstant això, quan s'intenta simular un sistema quàntic de molt qubits[20] un ordinador de sobretaula tardaria molt de temps i realment no és viable.

és pertinent fer canvis en la part experimental o les conclusions del treball amb aquesta nova informació.

[20] Més de 50 per exemple.

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 són bastant intuïtius i els intentaré explicar de la millor manera possible.

Intel·ligència artificial és un mot una mica ambigu, que es refereix a qualsevol algoritme que entra dintre del camp del *machine learning* o aprenentatge automàtic[1]. Aquests algoritmes simplement s'alteren a ells mateixos per fer millor la tasca que s'ha els ha designat, no importa quin és l'objectiu o com ho aconsegueix, el 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 una intel·ligència artificial o un algoritme de *machine learning* [35].

La manera que tenen aquests algoritmes d'alterar-se a si mateixos és canviant els paràmetres de les operacions dels quals estan compostos. Per exemple, en una regressió lineal, s'actualitzen els paràmetres de la recta que representa la tendència de les dades, com es pot veure a la figura 3.1.

Hi ha diversos mètodes per ajustar els paràmetres, el més comú és 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

[1] Tanmateix, col·loquialment s'utilitza per denominar a qualsevol algoritme o robot que és intel·ligent o sembla que és intel·ligent.

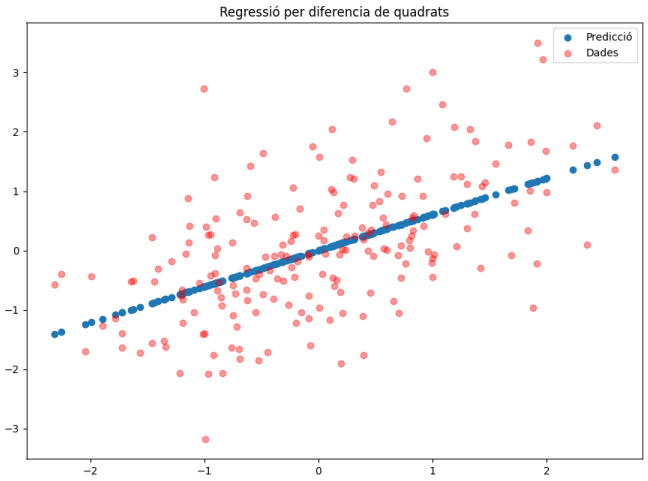


FIGURA 3.1: Exemple d'una regressió lineal de dades generades a l'atzar. Veure el codi a E.1.1.0.1.

del programa i pot ser minimitzada o maximitzada, per exemple, en una regressió lineal es vol reduir la distància entre els punts de dades i la línia que prediu la tendència.

Degut a que es poden realitzar molts tipus de funcions de pèrdua, ja sigui per la forma de la funció en si o pels paràmetres de la funció, 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, dintre de l'aprenentatge automàtic. Precisament utilitzo un d'aquests algoritmes d'aquests per generar les imatges. Reconeixement d'imatges, la traducció i sintetització de textos, la conducció automàtica, els algoritmes de recomanació, i és clar, la generació d'imatges.

3.1 Xarxes neuronals

Aquests tipus d'algoritmes no tenen un nombre que fa recordar a les xarxes de neuronals dels nostres cervells 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 l'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·ligència artificial constitueixen el camp del *deep learning* o aprenentatge profund. S'anomenen d'aquesta forma per referenciar la gran profunditat d'aquests algoritmes, és a dir el gran nombre de capes que tenen [36].

Una neurona consisteix simplement en una suma ponderada, a la qual se li suma un altre número, i finalment una funció no lineal que s'aplica al resultat. Les neurones tenen vectors com input i output. Per tant, una neurona es pot definir 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 lineal i n sent la mida del vector. Després estan els paràmetres, w_i i b, anomenats *weights* i *bias*.

Una neurona pot tindre diversos inputs que venen de diverses neurones, el mateix passa amb els outputs. Depenent de com es connectin entre si les neurones, aquestes passen a formar diversos tipus de capes. A partir dels tipus de capes i el nombre d'aquestes és com s'especifica l'arquitectura d'una xarxa neuronal.

Una vegada especificada la interconnectivitat de les neurones puc parlar de la intuïció darrere dels paràmetres. Un *weight* especifica com és de forta la relació entre una neurona en una capa i una altra neurona en una capa veïna. I un *bias* especifica com és d'important una neurona, ja que aquest número afecta el resultat a la suma, fent que l'activació de la neurona[2] sigui més alta.

Tornant a l'arquitectura, usualment aquesta es divideix en tres parts la capa d'input, les capes ocultes i la capa d'output. La quantitat de neurones que hi ha a la capa d'inputs és la que defineix la mida del vector que es dona com input a la xarxa, ja 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

[2] Així és com s'anomena el seu resultat.

acaba sent un element en el vector que surt de la xarxa. Per tant, el nombre de neurones que té cadascuna d'aquestes dues capes, especifica la mida dels 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 en blanc i negre calen 256 neurones en la capa d'inputs, una per cada píxel.

En canvi, les *hidden layers*, és a dir les capes ocultes, no tenen una mida determinada, 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 els diversos tipus de capes és el que dona la versatilitat d'aquests algoritmes [36].

Entre els diferents tipus de capes que ponen tindre les xarxes neuronals, la més comuna i simple d'aquestes és la *fully connected layer*, o una capa completament connectada, com les que es poden veure en 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. L'única forma que aquestes capes tenen de variar és a partir de canviar el nombre de neurones, ja que no es pot alterar el funcionament de les neurones.

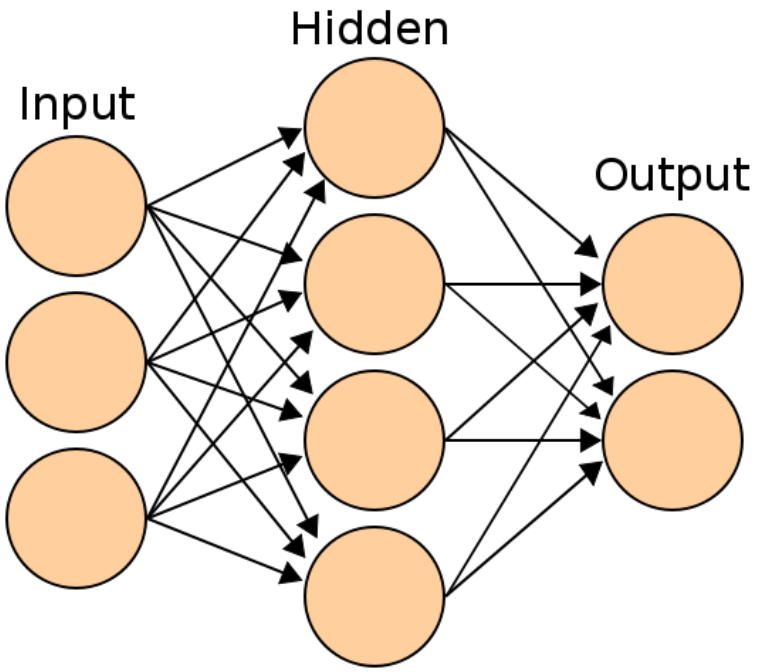


FIGURA 3.2: Usualment, les xarxes neuronals es representen d'aquesta forma, amb fletxes i boles. Les boles representarien cada neurona i les fletxes mostren com estan connectades. La *hidden layer* d'aquesta representació es pot veure que és una *fully connected layer* a causa de com està connectada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

No obstant això, es pot variar la funció d'activació que tenen, que ha de ser una funció no lineal. La més utilitzada és la sigmoide:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-1}}$$

3.2 Descens del gradient

Una vegada he parlat de les xarxes neuronals, he de comentar com aquestes evolucionen al llarg del temps, és a dir com se'n van actualitzen a si mateixes per complir el seu objectiu. Ja he comentat que existeix una funció anomenada *loss function*, la qual es deriva per actualitzar els paràmetres de la xarxa. El mecanisme pel qual s'actualitzen els paràmetres s'anomena el descens del gradient.

Aquest procés comença amb la funció de pèrdua, que esmenta els objectius de la xarxa. Els punts mínims d'aquesta funció representen els punts òptims de la xarxa, als quals es vol arribar.

Per explicar-lo utilitzaré un exemple pràctic, primer de tot parlaré sobre la funció de pèrdua que s'utilitza i a continuació de l'actualització dels paràmetres.

Parlaré de la classificació d'imatges, si es volen classificar imatges de gats i gossos, s'assignen dues etiquetes a aquestes, per exemple, 1 als gats i 0 als gossos. A continuació s'escull una funció de pèrdua[3] com *binary cross entropy* o *log loss*. La funció *binary cross entropy* és la següent [37]:

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

Amb t sent l'etiqueta que ha de tenir la imatge, anomenada etiqueta real, i y sent l'etiqueta que el model assigna a la imatge. Per tant, si l'etiqueta real és 1, l'equació acaba sent [37]:

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

I el cas contrari per $t = 0$ seria:

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

Si donen com input la 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 acaba sent més gran. El mateix es pot veure per les imatges dels gossos,

[3] Una que funcioni per la classificació d'imatges, és clar.

és a dir, 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, com més pròximes estén les prediccions (els outputs del model) a les etiquetes ideals, menor serà la pèrdua. Llavors al minimitzar la funció es trobarà el punt òptim on totes les prediccions seran iguals a les etiquetes [38].

A aquests punts òptims s'arriben actualitzant els paràmetres a partir de la derivada de la funció, concretament a través del seu gradient. El gradient d'una funció és un vector on els seus elements són la derivada parcial respecte a cada paràmetre (per aclarir, una entrada 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 el que és exactament un gradient, només s'ha de saber que cada paràmetre de la xarxa neuronal[4] s'ha d'actualitzar d'acord amb la derivada respecte al paràmetre. Això es pot entendre com canviar lleugerament un paràmetre d'acord amb la direcció de la derivada respecte a ell. L'objecte que s'encarrega d'actualitzar-los s'anomena optimitzador. L'optimitzador més senzill que hi ha és el següent [39]:

$$\theta_i^t = \theta_i^{t-1} \pm \eta \frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \theta_i^{t-1}} \tag{3.2}$$

Es pot veure com s'actualitza el paràmetre θ_i. En l'equació he posat el superíndex t per expressar aquesta actualització, passant d'un temps $t-1$ a t. També, utilitzo

[4] Cada *weight* i cada *bias*.

el símbol θ per expressar tots els paràmetres del model, que es troben en la forma d'un vector. En els optimitzadors s'afegeix un nombre η anomenat *learning rate*. Usualment, és un nombre petit[5], aquest nombre especifica com de ràpid canvien els paràmetres. El *learning rate* es pot anar ajustant depenen de la situació o del model en el qual s'implementi. Alteracions en aquest poden causar diversos fenòmens tant negatius com positius, i aquesta és la principal tasca que tenen els optimitzadors, alterar el *learning rate*. Existeixen molts optimitzadors que donen a terme aquesta tasca de diverses maneres, un dels més famosos és ADAM [40].

Cal notar que en l'optimitzador he utilitzat el signe $\pm$ perquè si és positiu significa que s'està ascendint pel gradient, i si és negatiu s'està descendint. No obstant això, usualment es fa servir el signe negatiu per convenció, ja que la majoria de funcions de pèrdua estan dissenyades per ser minimitzades.

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 l'estructura de la xarxa neuronal està composta per una sèrie de funcions compostes entre si. En la secció següent parlaré del procediment que s'utilitza per avaluar el gradient, anomenat *backpropagation* o propagació inversa.

3.2.1 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 contrària. Mentre que quan es dona un input a la xarxa, s'anomena forward propagation o *forward pass*.

No entraré en profunditat sobre l'intuïció de la *backpropagation* en aquesta secció, només em limitaré a esmentar la manera en la qual es calcula.

L'activació[6] d'una neurona j en l'última capa L de la xarxa es defineix com:

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

[5] Entre 0.1 i 0.001 per exemple.
[6] S'anomena així al resultat d'una neurona.

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 què mesura es connecta la neurona j a la neurona k. Com ja he dit, expressa com és de forta aquesta connexió. La suma es fa al llarg de n_{L-1} que és el nombre de neurones que té la capa $L-1$. Utilitzant aquesta definició ja es poden efectuar les derivades.

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

$$z_j^L = \sum_{j=0}^{n_L-1} w_{jk}^L a_k^{L-1} + b_j^L \tag{3.3}$$

L'objectiu és obtenir la derivada de la *loss function* respecte a un *weight* qualsevol i un *bias* qualsevol. Per tant, s'han de 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*, al aplicar la regla de cadena obtenim que:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w_{jk}^L} = \frac{\partial z_k^L}{\partial w_{jk}^L} \frac{\partial a_j^L}{\partial z_j^L} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_j^L} \tag{3.4}$$

La primera derivada, és la derivada de z_j^L respecte al *weight*, que és l'activació d'una neurona en la capa $L-1$:

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

La següent és la derivada del resultat de la neurona a_j^L respecte a z_j^L, que resulta ser la derivada de la funció d'activació de la neurona:

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

Finalment, està la derivada de la funció de pèrdua respecte a l'output de la xarxa, és a dir, l'activació d'una de les últimes neurones. La qual és simplement la derivada de la funció de pèrdua, per tant, varia en cada cas.

Ja sabent totes les derivades, es pot reescriure l'equació 3.4 es pot escriure com[7]:

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

No obstant falta un detall, per efectuar la derivada de l'activació d'una neurona respecte a la funció de pèrdua s'ha d'afegir un sumatori:

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

La suma representa que aquesta neurona té un output que es propaga cap endavant afectant les neurones que la segueixen.

Finalment, he d'esmentar la derivada de la funció de pèrdua respecte a un *bias* qualsevol b_k^L. Al aplicar la regla de la cadena es pot veure que aquesta derivada és:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b_k^L} = \frac{\partial z_k^L}{\partial b_k^L} \frac{\partial a_k^L}{\partial z_k^L} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_k^L}$$

Al veure l'equació 3.3 es pot veure que la derivada $\frac{\partial z_k^L}{\partial b_k^L}$ serà 1. Les altres derivades de l'equació ja les he esmentat anteriorment. Per tant, finalment tenim que [39]:

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

Amb aquestes derivades ja es pot desenvolupar el vector gradient, que com ja he dit està compost per les derivades de cada paràmetre de la xarxa, concretament està compost la mitjana d'aquestes, perquè es vol actualitzar els paràmetres per poder minimitzar la pèrdua respecte a diverses dades, d'aquesta manera el model s'entrena amb el nombre més gran de dades possibles.

Tota aquesta teoria es veurà implementada en la part pràctica en forma de codi, ja que m'he vist amb la necessitat de tenir una xarxa neuronal programada

[7] Deixo l'última 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.

des de zero. No obstant això, usualment s'utilitzen plataformes com *TensorFlow* [41] o *PyTorch* [42] per desenvolupar xarxes neuronals, pel fet que aquests *frameworks* faciliten moltíssim el treball.

3.3 Generative adversarial networks

Com ja he dit hi ha molts tipus de xarxes neuronals, tanmateix, en aquest treball només em centraré en un tipus en específic, les xarxes generatives adversàries o *generative adversarial networks (GAN)* en anglès.

Aquestes xarxes, com el seu nom diu, s'utilitzen per generar dades, usualment s'apliquen a imatges. Es troben al darrere de projectes com *This person does not exist* [43, 44], una pàgina web que et genera una cara d'una persona que no existeix, ja que és una cara generada artificialment a partir d'aquest tipus de models.

Aquests tipus de models van ser introduïts per primera vegada en 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. Per aquesta raó s'inclou paraula adversària en el nom. El generador i discriminador es poden entendre com un falsificador de bitllets i uns policies que el vol atrapar. On el generador és el falsificador de bitllets i el discriminador és el policia.

L'analogia és la següent: Una vegada el falsificador comença el seu entramat, el policia comença a detectar quins són els bitllets falsificats, i amb el temps es torna millor al seu treball, podent distingir entre els bitllets falsificats i els reals a la perfecció. El falsificador respon a això millorant les seves tècniques, per tant, el policia han de millorar encara més. És un cicle en el qual aquestes forces antagonistes es fan millorar l'una a l'altra.

El mateix passa amb el generador i el discriminador. El discriminador 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, arriben a un *zero sum game*[8]. La manera en la qual es soluciona aquest tipus de joc és arribant a un equilibri de Nash [5, 4], on el discriminador no sap diferenciar entre les imatges reals i les falses[9].

En l'article original [4], s'esmenta un pseudocodi per aquests models, que he representat en l'algoritme 1 (adaptat). En aquest es parla de *minibatch* que és simplement un grup d'imatges o de dades. I del soroll, que són dades generades aleatòriament i que es donen com input al generador perquè aquest no generi exactament les mateixes imatges cada vegada. El soroll afegeix variació als outputs del generador, però sempre s'intenta que sigui en una petita quantitat.

Algorithm 1 Pseudocodi per una xarxa generativa adversària

for número de interaccions **do**
for k pasos **do**
Crear minibatch de m mostres de soroll $\{z_i, \cdots, z_m\}$ de la distribució de soroll $p_g(z)$
Crear 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
Crear 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

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

[9] Que el discriminador no sàpiga diferenciar no implica arribar a un equilibri de Nash, aquest concepte és definit d'una altra forma que està fora de l'àmbit d'aquest treball [4].

En el pseudocodi es pot veure que primer s'actualitza el discriminador k vegades i després el generador una sola vegada. Això és perquè interessa que el discriminador sàpiga distingir les imatges ràpidament, per poder indicar al generador com generar les imatges. Si el discriminador esmenta que unes imatges de gats són imatges de gossos, el generador fabricarà imatges de gossos pensant que ho són de gats, perquè aquest aprèn a partir del que l'indica el discriminador.

També és pot veure com és la funció de pèrdua, que en l'article els autors anomenen *Minimax loss function*. La qual en la pràctica és la mateixa que la *Binary Cross Entropy (BCE)*. Es pot veure que en la BCE, quan $t = 0$, que seria l'etiqueta per les imatges falses del generador, aquesta funció seria $-\log(1 - y)$. En el cas contrari, per $t = 1$, la funció seria $-\log(y)$.

Capítol 4

Generació d'imatges amb un ordinador quàntic

Investigadors en informació quàntica al veure el potencial que tenen els ordinadors quàntics i la intel·ligència artificial, no es van poder resistir a crear un nou camp d'investigació, el *Quantum Machine Learning (QML)*, o aprenentatge automàtic quàntic. Igual que les xarxes neuronals són les estrelles dintre del *machine learning*, les xarxes neuronals quàntiques també ho són dintre del *quantum machine learning*.

Des de que es van començar a investigar aquests algoritmes s'han arribat a implementar diversos tipus de xarxes neuronals en ordinadors quàntics. Principalment pel que fa a la generació i classificació d'imatges i dades.

No obstant això, aquests algoritmes no són completament quàntics, usualment consisteixen a actualitzar els paràmetres d'un circuit quàntic perquè aquest generi les dades. On les actualitzacions dels paràmetres es calculen amb un ordinador clàssic. Això es veurà molt clar quan expliqui la part pràctica del treball.

Abans de continuar amb la secció he de dir que existeixen diversos algoritmes dintre del *quantum machine learning*, no tot en la vida són xarxes neuronals. Per exemple, es pot donar a terme classificació de dades mitjançant *support vector machines*[1] [45, 46] o amb un anàleg de la regressió lineal [47]. Malgrat això, en aquest capítol em centraré exclusivament en les xarxes neuronals quàntiques.

[1] Classificar dades de dimensions petites en espais vectorials molt grans.

4.1 Descens del gradient quàntic

De moment tindre en consideració que una xarxa neuronal quàntica és un circuit quàntic qualsevol però parametritzat, és a dir, que té portes quàntiques parametritzades. Això juntament amb una funció de pèrdua i un *dataset* és suficient per explicar com s'actualitzen els paràmetres.

L'objectiu principal és avaluar la derivada respecte a un paràmetre. Sorprenentment, és dona a terme d'una manera més senzilla que amb una xarxa neuronal clàssica. Tan sols s'utilitza la definició de la derivada per poder avaluarla: S'altera lleugerament un sol paràmetre i es treu la diferència entre dos outputs del circuit quàntic que tenen el paràmetre alterat. Aquest mètode per avaluar la derivada s'anomena *parameter shift* [2, 48].

Si un circuit quàntic té un vector de paràmetres θ, per un paràmetre θ_i, es defineix un vector de pertubació Δ_i ple de zeros, d'igual mida que θ, però que en la posició de θ_i té un 1. He vist que per un vector de pertubació $|\Delta_i\rangle$, donat un vector de paràmetres $|\theta\rangle$ es compleix que:

$$\exists\, |\Delta_i\rangle \iff \langle \Delta_i|\theta\rangle = \theta_i$$

A partir d'aquest vector es pot definir la derivada de la funció de pèrdua $\mathcal{L}(\cdot)$ respecte al paràmetre θ_i:

$$\frac{\partial}{\partial\theta_i}\mathcal{L}(\theta) = \mathcal{L}(\theta + \tfrac{\pi}{4}\Delta_i) - \mathcal{L}(\theta - \tfrac{\pi}{4}\Delta_i)$$

Es pot veure que el vector $\theta \pm \frac{\pi}{4}\Delta_i$ és el vector θ, però amb una petita variació en la posició i que és la que correspon al paràmetre θ_i. Amb aquest mètode ja es pot desenvolupar pràcticament qualsevol actualització de paràmetres, aquesta és la part senzilla de les xarxes neuronals quàntiques, la dificultat radica en la forma dels circuits quàntics que les componen.

4.2 Circuits quàntics per xarxes neuronals

L'única qualitat obligatòria que hi han de dintre aquests circuits és que han d'estar parametritzats. Usualment, estan compostos per una gran quantitat de portes rotacionals parametritzades, les quals ja he presentat en les equacions 2.2, 2.3 i 2.4.

El problema al qual s'enfronten els investigadors dedicats a les xarxes neuronals quàntiques és la manera amb la qual implementar funcions no lineals en els circuits quàntics. Aquests tipus de funcions són les responsables de la gran complexitat i profunditat de les xarxes neuronals clàssiques. A primera vista pot semblar una tasca quasi impossible a causa de la naturalesa lineal de la computació quàntica. Tanmateix, durant els anys s'han desenvolupat diverses tècniques per donar a terme aquesta fita, les quals comentaré a continuació.

A partir d'una combinació de rotacions i portes que entrellacen qubits es pot arribar a implementar una funció semblant a la tangent hiperbòlica[2] en un circuit quàntic [49]. No obstant això, aquest mètode té un gran desavantatge, consisteix en un circuit que s'ha d'anar mesurant i repetint per veure si funciona correctament, els autors parlen de *repeat until success* perquè s'ha de mesurar un qubit i mirar si dona $|0\rangle$ per assegurar que aquesta funció ha sigut aplicada correctament[3].

En un article posterior[4], en el qual els autors generen distribucions contínues a partir d'una xarxa generativa adversària quàntica. S'especifica que les no-linearitats presents en l'algoritme no formen part del circuit quàntic, és a dir, funcions que s'implementen clàssicament als resultats dels circuits quàntics o a les dades que s'introdueixen als circuits [50]. Aquesta és la manera més simple de resoldre aquest problema.

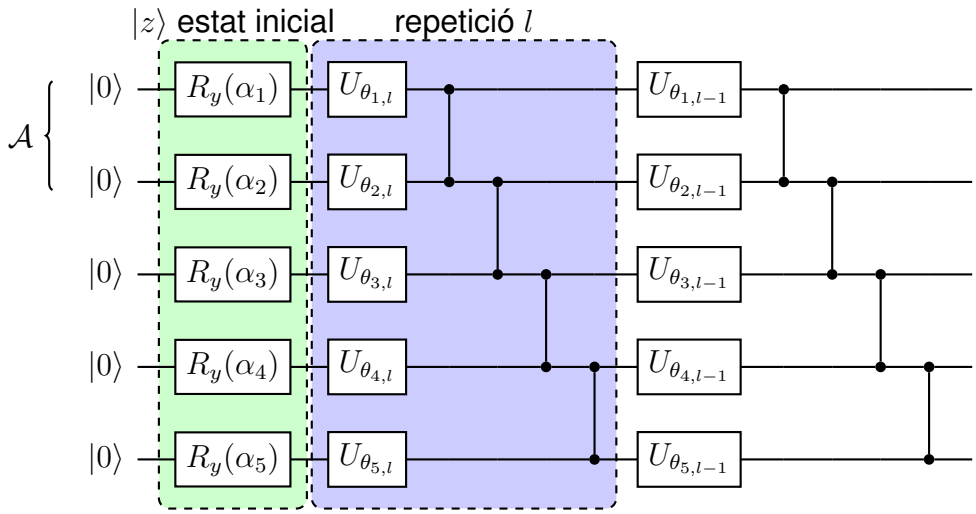
[2] La tangent hiperbòlica també s'utilitza com a funció no lineal en el *deep learning*.
[3] En cas que doni $|1\rangle$, s'ha de repetir el procés.
[4] Realitzat en part per un dels autors del mètode anterior.

En 2019 es va publicar un dels articles que més m'agraden[5] Cong et. al. (2019) [51], en aquest els autors presenten una xarxa neuronal convolucional quàntica. No fa falta entrar en detall, però es diuen convolucionals perquè s'apliquen convolucions a les imatges que es volen classificar, es multiplica una part de la imatge per una matriu que s'anomena filtre [52]. Simplement, tenen un altre tipus de capes que no són les capes completament connectades. L'única afirmació dels autors que s'ha de recalcar, és que a partir de reduir els graus de llibertat (*degrees of freedom*) en els circuits quàntics, sorgeixen no-linearitats. Això és a causa dels mesuraments parcials que es donen a terme en un moment determinat de l'algoritme.

Un dels mètodes que m'ha semblat més interessant, és l'implementat en una altra xarxa convolucional quàntica, on a l'aplicar els filtres que s'utilitzen per a la convolució, s'implementa una funció no lineal. Aquest mètode no el puc arribar a comprendre, les equacions que fan servir són molt complexes i no sembla que arriben a utilitzar un mesurament parcial en cap moment. Simplement, els autors presenten una equació i diuen que no és lineal, i no puc arribar a comprendre perquè no ho és.

Finalment, he de parlar de l'article que he seguit per fer aquest treball, Huang et. al. (2021) [5], en aquest, al igual que en l'article de Cong et. el. (2019) [51], s'utilitzen mesuraments quàntics per introduir no-linearitats a l'algoritme. Concretament, els autors implementen aquests mesuraments tant en el generador quàntic d'imatges, com en el discriminador. Els circuits quàntics que utilitzen per al generador d'imatges tenen la següent forma:

[5]Utilitzen imatges de gats a les figures i és un dels primers articles que vaig llegir d'aquest camp fa més de dos anys. A més a més la xarxa neuronal esmentada en l'article està completament programada en TensorFlow Quantum [2], i això sempre s'agraeix.



On les portes R_y amb un paràmetre α_i , marcades en verd, són utilitzades per introduir les dades al circuit. Aquestes dades són simplement soroll que crea varietat en els outputs dels circuits, igual que el soroll que s'empra en les GAN clàssiques (algoritme 1).

El circuit que genera les imatges realment consisteix en les portes U_θ i CZ, marcades en blau. Aquestes portes s'agrupen en les repeticions-l, que s'utilitzen per afegir profunditat i complexitat als circuits. En aquest cas el circuit té dues repeticions-l[6]. Al mesurar es fa un mesurament parcial, però els autors especifiquen que es fa d'una forma concreta que explicaré a continuació.

Per un estat $|\Psi_\alpha\rangle$ que surt del circuit especificat posteriorment, l'estat $\rho(z)$ després d'una mesura parcial sobre el qubits $\mathcal{A}$, és:

$$\rho(z) = \frac{\mathrm{tr}_{\mathcal{A}}(\Pi_{\mathcal{A}} \left|\Psi(z)\right\rangle \left\langle\Psi(z)\right|)}{\mathrm{tr}(\Pi_{\mathcal{A}} \otimes I_{2^{N-N_{\mathcal{A}}}} \left|\Psi(z)\right\rangle \left\langle\Psi(z)\right|)}$$

Els autors afirmen que aquest estat $\rho(\alpha)$, és una funció no lineal de l'estat $|z\rangle$. Això és degut al fet que tant el denominador com el numerador de l'equació són funcions de $|z\rangle$.

Tanmateix, en altres treballs com per exemple Zoufal et.al. (2019) [53], on es defineix una GAN quàntica que genera distribucions de probabilitat, els autors no mencionen la necessitat de tenir funcions no lineals en alguna part de l'algoritme.

[6] És a dir $l = 2$.

Part III

Marc Experimental

Capítol 5

Plantejament de l'hipòtesi

Podria haver anat per altres vies com la generació d'imatges amb color o la implementació d'un d'una porta X en una part específica del circuit quàntic que genera les imatges, que al posar-la o no, el model generes dos tipus d'imatges a través del mateix circuit. Tanmateix, les dues propostes requerien desenvolupar nous conceptes, ja que són idees meves pròpies, però com que no tenia els coneixements necessaris vaig descartar-les.

Llavors, al ser la implementació de les funcions no lineals un assumpte lleugerament conflictiu entre els diversos models de xarxes neuronals quàntiques, com ja he comentat en la secció 4.2, havia decidit des d'un principi centrar-me en aquesta qüestió en concret.

La pregunta a investigar és la següent:
La incorporació d'una funció no lineal en el circuit quàntic generacional, a partir d'una mesura parcial; causa que el model arribi més ràpidament al punt òptim?

En altres paraules, volia veure si la mesura parcial afectaria positivament en l'eficiència del model, fent que la generació de les imatges desitjades es donés a terme en un menor temps.

Sembla una qüestió senzilla, però la dificultat de l'experiment radica en crear la xarxa neuronal en si, amb totes les seves parts accessibles per poder fer els canvis que siguin necessaris. L'única manera de fer l'experiment seria programant el model, una tasca que tenia clar que faria des del principi.

Capítol 6

Programació del model

Posteriorment a començar a programar el model, jo ja sabia que ho havia de realitzar en Python, ja havia creat alguns algoritmes abans de començar aquest treball i tenia experiència construint i executant circuits quàntics amb Cirq [54], una eina desenvolupada per Google. A més a més, sabia de l'existència de TensorFlow Quantum [2], una altra eina desenvolupada per Google destinada a la creació de xarxes neuronals quàntiques i algoritmes de *quantum mechine learning* en general. També tenia experiència en aquest *framework*. Per tant, TensorFlow Quantum va ser la meva primera opció.

Tenia pensat basar el meu codi en el tutorial de TensorFlow sobre una xarxa convolucional generativa adversària. Havia de canviar el generador per un circuit quàntic que s'optimitza a partir d'un diferenciador[1] automàtic provinent de TensorFlow Quantum. Els canvis que corresponien al discriminador simplement havien de ser un canvi d'arquitectura, passar d'una xarxa més complexa a una de més simple que només consistiria en unes poques capes totalment connectades.

El primer problema que em vaig trobar va ser la creació del *dataset* que alimenta a la xarxa discriminativa. A causa de la peculiaritat de les imatges que volia generar, havia de crear-lo manualment. Usualment les imatges que componen els *datasets* utilitzats en *deep machine learning* són extretes de bancs d'informació amb mides enormes. En el meu cas, havien de ser generades per

[1] Objecte que calcula el gradient d'un circuit quàntic.

mi, per tant havia de convertir matrius de Numpy en *datasets* de TensorFlow. Recordo que en va costar arribar a tindre la solució a aquest problema.

6.1 Discriminador

Una vegada ja tenia fet el *dataset* em vaig posar a fer el model. En el tutorial per una DCGAN (GAN convolucional) els dos models eren entrenats per la funció `train_step()`, que representa una iteració en el procés d'optimització. En aquesta es crida a la funció `tf.GradientTape` per guardar el diferenciador automàtic. El problema que vaig dintre amb aquesta funció és que directament no funcionava amb el discriminador, aquest no era optimitzat. Després d'intentar solucionar l'error pels meus propis medis, mirant la causa d'aquest i de buscar a fòrums la solució o causa, em vaig rendir. Ja havia estat uns quants mesos intentant desenvolupant el model amb TensorFlow i TensorFlow Quantum. Havia creat les capes del generador quàntic manualment, també ho havia fet amb l'optimitzador[2]. Tenia el model gairebé acabat, però perquè no podia optimitzar el discriminador em vaig veure obligat a canviar d'estratègia.

Existeixen dos grans *frameworks* per crear i executar circuits quàntics: Cirq [54], desenvolupat per Google, i Qiskit [55], creat per IBM. Una vegada vaig decidir no continuar amb Cirq, havia de provar amb Qiskit. La veritat, havia d'haver-hi començat amb Qiskit des del principi, és més útil (té moltes més característiques), i el més important, té una major comunitat, per tant, és més fàcil trobar solucions a l'error que pots tenir i és més fàcil trobar a persones disposades a ajudar-te.

Igual que Cirq té un *framework* per poder desenvolupar xarxes neuronals (TensorFlow Quantum); Qiskit també té el seu, anomenat PyTorch [42], no obstant no té una integració tan directa, ja que no estan desenvolupats pel mateix equip, ni la mateixa companyia.

[2]No sabia ni si funcionarien adequadament, pel fet que per provar-ho, havia de tenir tot el model enllestit.

Per tant, en canviar de Cirq a Qiskit, també havia de canviar de TensorFlow a PyTorch, però no tenia res d'experiencia amb PyTorch, sabia que la transició seria complicada, i tenia raó. No vaig ni aconseguir crear el *dataset* que contenia les imatges per alimentar al discriminador.

Després d'intentar-lo amb TensorFlow Quantum i amb PyTorch, vaig decidir prescindir de *frameworks* per crear models de *machine learning*. El discriminador, al ser una xarxa tan simple, la podria crear des de zero. Llavors vaig començar a buscar codi a internet que pogués utilitzar. Volia una xarxa neuronal feta amb Numpy, una llibreria de Python per fer càlculs amb vectors i matrius amb la qual tenia bastant experiència.

Després de provar dues opcions que més o menys m'agradaven[3], va aparèixer un repositori[4] de Michael Nielsen, un dels autors de *Quantum Computation and Quantum Information* [8] que em va salvar.

El repositori tenia codi per xarxes neuronals que estava estructurat d'una forma que m'agradava i encara més important, que entenia. Inclús tènia diverses versions d'una mateixa xarxa neuronal, amb un nivell de complexitat diferent. Llavors, a partir del model més simple que hi havia en el repositori [5], vaig començar a desenvolupar el discriminador.

Per verificar el correcte funcionament del discriminador, i per poder comprendre com funciona el codi, vaig utilitzar la teoria del capítol 3. No obstant això, el principal problema que em vaig trobar va ser derivar la funció de pèrdua, per exemple la MinMax, s'ha de derivar-la a partir de dues equacions, una per a cada etiqueta.

Com es pot veure al codi final pel discriminador a l'annex E.2.1.0.2, he fet bastants canvis, però no he canviat l'estructura o el funcionament teòric. La

[3] Buscava codi estructurat d'una forma en concret, que estigui dissenyat amb la filosofia de *Object Oriented Programming*, una forma d'escriure codi en el qual tot s'implementa en un sol objecte.

[4] Enllaç del respositori de Michael Nielsen, la persona que més m'ha ajudat a fer aquest treball. Però no m'ha ajudat directament, ho dic perquè és el coautor de *QC i QI* [8] i de la xarxa neuronal que va fer que progressés amb la programació.

[5] Es pot veure el codi original a l'annex E.2.1.0.1.

majoria dels canvis són per afegir més funcionalitat al model, com per exemple l'emmagatzematge de les dades per poder al final veure-les en un gràfic.

El canvi més important és que inclou les dues formes d'optimitzar el model, amb dues funcions de pèrdua que funcionen de manera diferent, però que són la mateixa, la *Binary Cross Entropy* i la *MinMax*.. Això en el codi està materialitzat en dues funcions[6] diferents, `backprop_bce()` i `backprop_minimax()`. No tenen cap diferència en termes d'eficàcia o rapidesa i les vaig fer tan sols per comprovar aquest fet. El codi final del discriminador es pot veure a l'annex E.2.1.0.2. També en el repositori d'aquest treball hi ha un altre arxiu que conté una altra versió en la qual intentava implementar diverses funcions d'activació en el model, però no ho vaig aconseguir, tanmateix, no em preocupa perquè no és una part vital del treball, no passa res per tindre el discriminador només amb la funció sigmoide com a funció d'activació.

6.2 Generador

El desenvolupament de l'altra part del model, el generador, va ser molt diferent. Després de provar de fer-ho amb TensorFlow, sense obtenir bons resultats, no tenia altra opció que fer-ho tot manualment i jo mateix[7], això no obstant, ja tenia experiència en fer petites xarxes neuronals quàntiques i això em tranquil·litzava. Sabia perfectament el que havia de fer, i com ho havia de fer: Implementar el mètode de *parameter shift* en els circuits quàntics dels quals vaig parlar en la secció 4.2.

Una vegada vaig crear els circuits quàntics amb una funció fins a un punt en el qual sentia que ja estava tot perfecte, em vaig posar amb l'optimització, de la qual parlaré a continuació.

Primer de tot cal remarcar que el model s'optimitza a partir d'un *batch*, és a dir, un grup d'imatges, en aquest cas, un grup de dades. S'agafa la mitjana

[6] Funcions de Python.

[7] No em vaig ni plantejar buscar codi per internet perquè pensava que els autors dels papers que vaig llegir, les úniques persones que sabia que podien tindre el codi, no el penjarien.

dels errors de cada *batch*, i s'actualitzen els paràmetres a partir d'aquesta. La motivació per treball en *batch* i no dades individuals és perquè s'ha de mirar l'error d'unes quantes dades a la vegada, d'aquesta manera l'optimització és més robusta.

Tornant al funcionament del procediment, l'explicaré tal i com està implementat en el codi. Per començar s'han d'agafar els paràmetres a optimitzar, que estaran en forma d'un vector θ, escollir un d'ells que anomenaré θ_i, que és el paràmetre que s'optimitzarà, i crear un vector de pertubació Δ_i.

Llavors es creen dos vectors de paràmetres nous, θ_i^+ i θ_i^+, multiplicant $\pm\frac{\pi}{4}$ pel vector de pertubació, i sumant el resultat al vector de paràmetres original[8]. A continuació, es creen dues imatges, cadascuna corresponent a un dels vectors de paràmetres creats, una amb θ_i^+ i l'altra amb θ_i^-. Per últim, s'avalua la funció de pèrdua per a cada imatge generada i es treu la diferència entre elles, d'aquesta manera calculant una derivada $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_i}$ respecte al paràmetre θ_i. Una vegada es té una derivada per a cada paràmetre de θ es pot construir el vector gradient ∇_θ. He de dir aquest vector, ha de tenir la mateixa mida que el vector θ, com que cada element en el gradient correspon a la derivada d'un paràmetre de θ.

Al llarg de l'optimització es van sumant les derivades a ∇_θ, si això es fa per a tots els paràmetres de θ i per a totes les dades del *batch*, finalment es pot treure la derivada mitjana dividint els elements de ∇_θ per la quantitat de dades que hi ha en un *batch*.

Amb el gradient ∇_θ resultat es poden finalment optimitzar tots els paràmetres, d'acord amb les derivades mitjanes de les quals està compost.

El pseudocodi per aquest procediment es pot trobar en la figura 6.1. En aquesta es pot veure que es crida al discriminador perquè posi etiquetes a les dues imatges generades, això és per poder avaluar aquestes etiquetes amb la funció de pèrdua, per després poder agafar la diferència i d'aquesta manera calcular la derivada. El codi pel generador es pot trobar en l'annex, E.2.1.0.3.

[8]Cada un d'aquests vectors de paràmetres té una petita variació en un paràmetre, i cada vector té una variació en un sentit.

Algorithm 2 Pseudocodi per una xarxa generativa adversària quàntica

$\nabla = 0$ ▷ Creació del vector ∇ que te la mateixa mida que θ
for soroll en batch **do**
  for paràmetre θ_i en θ **do**
    $\Delta_i = 0$ ▷ Creació del vector pertubació d'acord amb el vector θ_i
    $\theta_i^+ = \theta + \frac{\pi}{4}\Delta_i$
    $\theta_i^- = \theta - \frac{\pi}{4}\Delta_i$

    Imatge$_1$ = generador(soroll, θ_i^+)
    Imatge$_2$ = generador(soroll, θ_i^-) ▷ Generació de les imatges

    Predicció$_1$ = discriminador(Imatge$_1$)
    Predicció$_2$ = discriminador(Imatge$_2$) ▷ El discriminador posa una etiqueta a cada imatge

    Diferencia$_i$ = $\mathcal{L}$(Predicció$_1$) - $\mathcal{L}$(Predicció$_2$)

    $\nabla_\theta = \nabla_i +$ Diferencia$_i$ ▷ On $\mathcal{L}$ és la funció de pèrdua del generador
  end for
end for

for θ_i en θ i ∇_i en ∇_θ **do** ▷ Per a cada paràmetre i per a cada error
  $\theta_i^{t+1} = \theta_i + \frac{\eta}{M}\nabla_i$ ▷ Actualització del paràmetre amb la mitjana de l'error que correspon a aquest paràmetre
end for

FIGURA 6.1: Em refereixo a l'input de la xarxa generacional com a soroll, ja que és més encertat d'aquesta manera. El vector ∇ té la mateixa mida que el vector de paràmetres θ, cal notar que també té la mateixa mida els vectors $\theta_i^{\pm}$, ja que aquests vectors són θ amb una alteració al paràmetre θ_i. Les paraules *generador* i *discriminador* denoten els respectius models, per tant, *Imatge*$_i$ i *Predicció*$_i$ són els outputs dels models.

6.3 Creació del model

Quan ja es tenen les dues parts del model, aquestes s'han d'ajuntar d'alguna manera. El que jo he fet és posar-ho tot en una classe de Python anomenada `Quantum_GAN`, que conté les funcions per definir el model, per executar-lo, per guardar les seves dades i per crear els gràfics que serveixen per avaluar l'eficiència del model. No fa falta entrar en detall sobre aquesta part en particular del codi. Només cal mencionar que és el tros de codi que junta tot, tant el discriminador i el generador. També agafa altres funcions que són necessàries, com per exemple la sigmoide. Aquestes funcions que no estan tant en l'arxiu del generador com el discriminador es troben en `functions.py`.

Tanmateix, s'han de tenir en compte algunes de les funcionalitats d'aquesta classe, com circulen les dades del generador als discriminadors i com es creen les gràfiques amb les quals valoro l'eficiència dels models.

A la funció de la classe `Quantum_GAN` que s'utilitza per entrenar, `Quantum_GAN.train()` se li dona, entre altres inputs, un dataset amb imatges reals i el soroll per poder entrenar el generador. Aquest dataset es divideix en grups d'imatges (els *batchs*), cada *batch* conté tant imatges reals, com soroll en la mateixa quantitat.

En una iteració primer s'optimitza el generador, que substitueix el soroll del *batch* amb les imatges que genera. Llavors es passa el *batch* al discriminador que s'optimitza tant amb les imatges reals com amb les imatges falses. Aquest és el procés pel qual s'optimitzen els dos models. Pel que fa a la creació de les gràfiques, aquesta classe selecciona una imatge real aleatòria i una de falsa per avaluar la funció de pèrdua en la iteració, també crea les etiquetes utilitzades en aquesta l'avaluació. Totes aquestes dades s'usen per a la creació de diversos gràfics que mostren l'evolució d'aquestes dades a través de tota l'optimització.

6.4 Execució del model

No obstant en l'arxiu `qgan.py`, no es troba l'execució del model, només està la definició de la classe `Quantum_GAN`. Això és perquè el codi realment s'executa

en l'arxiu `main.py`. Aquest és l'únic arxiu que té codi que realment s'executa, els altres arxius només tenen definicions. Per projectes relativament grans, com aquest, convé tenir un arxiu que fa tot el treball, el qual crida a totes les funcions definides en altres arxius i les executa d'una manera ordenada.

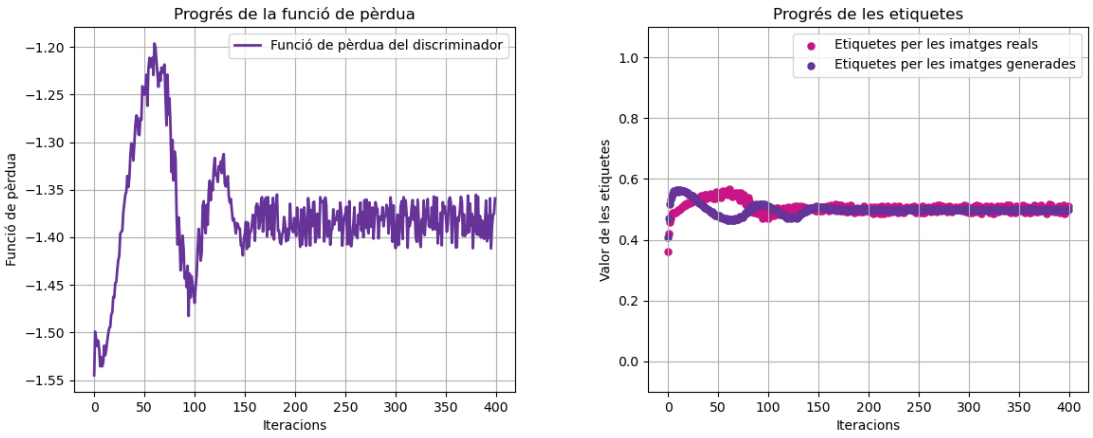
Com es pot veure en l'annex, E.2.1.0.5, aquest arxiu té molt poc codi. En ell només es crea amb Numpy el dataset, es defineix el discriminador i el generador, amb els quals es crea el model amb `Quantum_GAN`. Finalment, es crida a la funció `Quantum_GAN.train()` per optimitzar el model. En acabar l'optimització es criden les funcions `Quantum_GAN.plot()`, `Quantum_GAN.create_gif()` i `Quantum_GAN.save()`, les quals donen a terme funcions complementàries com la creació de les gràfiques, la creació d'un GIF que mostra com les imatges vam evolucionar al llarg de l'optimització, i l'emmagatzematge de les dades rellevants que s'han creat durant l'optimització.

Les imatges que vaig escollir per generar són les mateixes que van generar en l'article en el qual vaig basar el treball. No entraré molt en detall sobre les distribucions concretes que formen les imatges, però per tindre una imatge general sobre com són es pot veure la figura 6.2.

Si executen el model, amb una mida de *batch* de 10, tant el *learning rate* del discriminador com del generador a 0.1, i un total d'iteracions de 400, hi ha una garantia d'arribar a la convergència desitjada, és dir que, que els dos models arriben a l'equilibri de Nash i no poden continuar l'optimització. En aquest punt és quan les imatges falses i les reals són iguals.

(A) (B)

FIGURA 6.2: **A)** Aquest és un exemple d'una imatge del *dataset* amb el qual s'entrena el model que he creat. És simplement una imatge en blanc i negre de 4 píxels, en la qual hi ha dos píxels amb un valor de 0.5 i els altres dos amb un valor de 0. Les imatges es creen a partir d'una *array* de Numpy, per exemple `np.array([[0.47804505, 0.], [0.47804505, 0.]])` . **B)** Aquest és un exemple d'una imatge generada que tracta de ser el més semblant possible a les imatges del *dataset*. Es pot veure que són indistingibles a simple vista, però al veure els valors es pot apreciar com els nombres no són els mateixos: `np.array([[0.504324, 0], [0.495676, 0]])` . Això és perquè només pel valor de 0.5 és possible tenir els dos píxels amb el mateix valor, sempre que els valors dels altres píxels sigui zero. Cal recordar que els valors dels píxels han de sumar 1, per tant, les imatges del dataset com la que he mostrat no són possibles de crear. He pensat fer-ho d'aquesta manera per veure si es generaria les imatges correctament amb aquesta limitació, el resultat ha sigut que les imatges que es generen són com la mitjana dels valors de les imatges del *dataset*, tal com es pot apreciar en la figura .

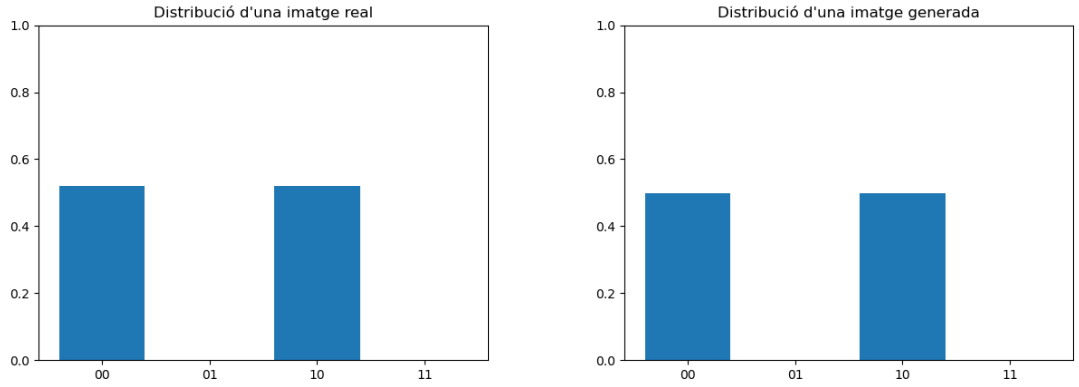


(A) (B)

FIGURA 6.3: En pot veure com per la iteració 250, el model ja s'ha estabilitzat, ja que les etiquetes i el valor de la funció de pèrdua convergeixen en un valor. **A)** Funció de pèrdua per cada iteració. A partir de la iteració 175, es pot veure com el valor de la funció s'estabilitza en l'interval $(-1.35, -1.4)$, això concorda amb els valors de les etiquetes en les mateixes iteracions, ja que $\log(\frac{1}{2}) + \log(1 - \frac{1}{2}) \simeq -1.38$. **B)** Etiquetes per les imatges reals i generades per cada iteració. Es pot observar que els valors de les etiquetes per les imatges reals són més inestables que els valors de les generades. Això és perquè les imatges reals tenen una major variació en els valors dels píxels, mentre que en les generades aquest fet no és tan notable. Per tant, el discriminador assigna etiquetes amb una major variació.

En la figura, 6.3b, es pot veure com les etiquetes pels dos tipus d'imatges van oscil·lant fins a estabilitzar-se. El mateix es pot dir per la funció de pèrdua, com es pot veure en la figura 6.3a.

A causa del fet que aquests gràfics són molt semblants als seus anàlegs de les GANs clàssiques i que les distribucions reals i generades són pràcticament iguals, com es pot veure a la figura 6.4, considero que el model funciona correctament.



(A) Distribució d'una imatge real

(B) Distribució d'una imatge generada

FIGURA 6.4: Comparació d'una imatge generada i una real, quan el model ha assolit la convergència. En l'eix Y es pot veure el valor d'un píxel, mentre que en l'eix X estan els píxels.

Abans he especificat que al cap de 400 iteracions podem tenir la garantia d'arribar al punt d'equilibri, no obstant això, es pot arribar a aquest punt amb menys iteracions, el que vull dir és que amb 400 de segur que s'arriba. Això és perquè, com a tots els models de *machine learning* hi ha una part de sort implicada, si els paràmetres inicials són més semblants als paràmetres desitjats, el model assolirà la convergència més ràpidament.

Capítol 7

Realització del experiment

Una vegada havia confirmat el correcte funcionament del model, vaig alterar el generador per poder acomodar els dos tipus de circuits quàntics que necessitava, uns amb un sistema ancilla, i uns altres sense.

Un sistema ancilla, és un grup de qubits sobre els quals es donen a terme operacions, però que no es mesuren per treure l'output del circuit. Aquests qubits es pot veure clarament en la figura 7.1.

Primer de tot he de mencionar que havia de fer alguns canvis al generador per acomodar aquests qubits ancilla.

Segon, cal notar que no he seguit exactament els mateixos passos que en l'article original. En ell tenen aquesta equació [5]:

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

Com ja he comentat en la secció 2.4.1.1, no veig com aquesta equació pot tenir sentit, per tant la vaig ometre del meu experiment.

L'alternativa que he fet servir són els mesuraments de Qiskit, al definir el circuit especifico quins són els qubits que no vull mesurar, que són els qubits que formen part del sistema ancilla. No obstant això, no sé exactament que és el

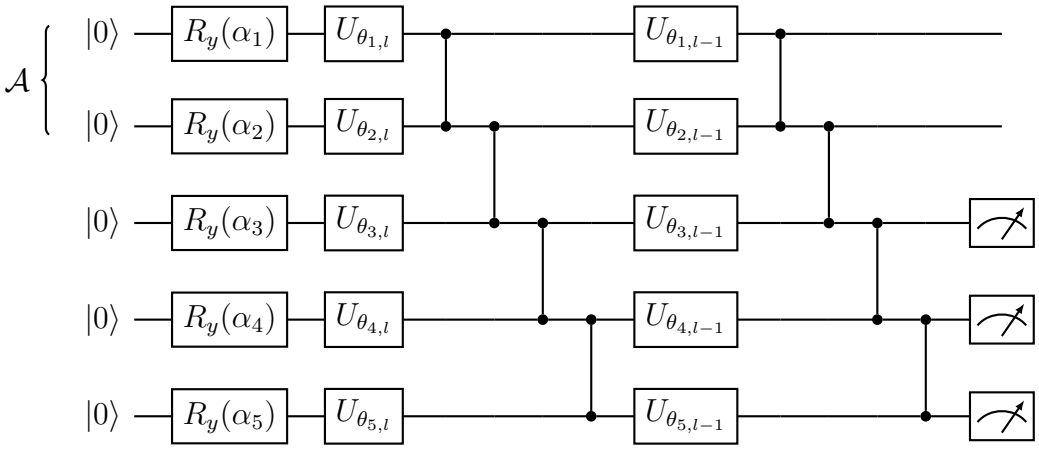


FIGURA 7.1: Aquí he marcat els qubits ancilla amb $\mathcal{A}$, són els dos primers. També al final del circuit he afegit mesures als qubits que s'han de mesurar.

que fa Qiskit amb el mesurament. Però si empro aquest procediment en altres circuits, dels quals sé el resultat, aquest mètode fa el que m'espero[1].

L'arxiu que utilitzo per fer els experiments és `experiment.py`. En ell es pot veure com defineixo dos discriminadors[2] i dos generadors, que es diferencien pels circuits que fan servir, un amb qubits ancilla i l'altre sense. Aquests models s'agrupen en parelles per definir dues qGANs.

Cal notar que els generadors i els discriminadors[3] comencen amb els mateixos paràmetres, per tant, exactament les mateixes condicions, menys els circuits quàntics és clar. També s'utilitza el mateix dataset.

7.1 Anàlisi dels resultats

Si comparem les gràfiques que mostren les etiquetes es pot veure una clara diferencia: Els models que tenen els circuits amb els qubits ancilla són més inestables que el que no els tenen, tal i com es pot veure en la figura 7.2. Això no vol

[1] Parlo dels parells de Bell, els circuits quàntics amb entrellaçament més simples que es poden fer.

[2] Que tenen les mateixes característiques.

[3] Al principi pensava no tenir els mateixos paràmetres inicials pels discriminadors, però al veure les gràfiques de les etiquetes, l'efecte que tenen aquests és molt notable. Es pot veure com a vegades les etiquetes comencen en uns valors de 1 i en altres de 0. enllaç per veure una imatge amb totes les gràfiques (perdó per la informalitat)

dir necessàriament que siguin més eficients, però l'estabilitat és un factor que es busca en les GANs.

També es pot observar una clara diferència en les imatges generades en la primera iteració. En les primeres imatges d'un generador amb la funció no lineal es pot veure un píxel amb un valor de 1 mentre que els altres estan al 0. Mentre que en l'altre tipus de generador es pot veure que els píxels tenen més o menys el mateix valor, d'aquesta manera formant una distribució uniforme. Aquest fet probablement és causat per l'estructura del circuit que té els qubits ancilla. Tanmateix, perquè exactament passa això està fora dels meus coneixements sobre la matèria[4].

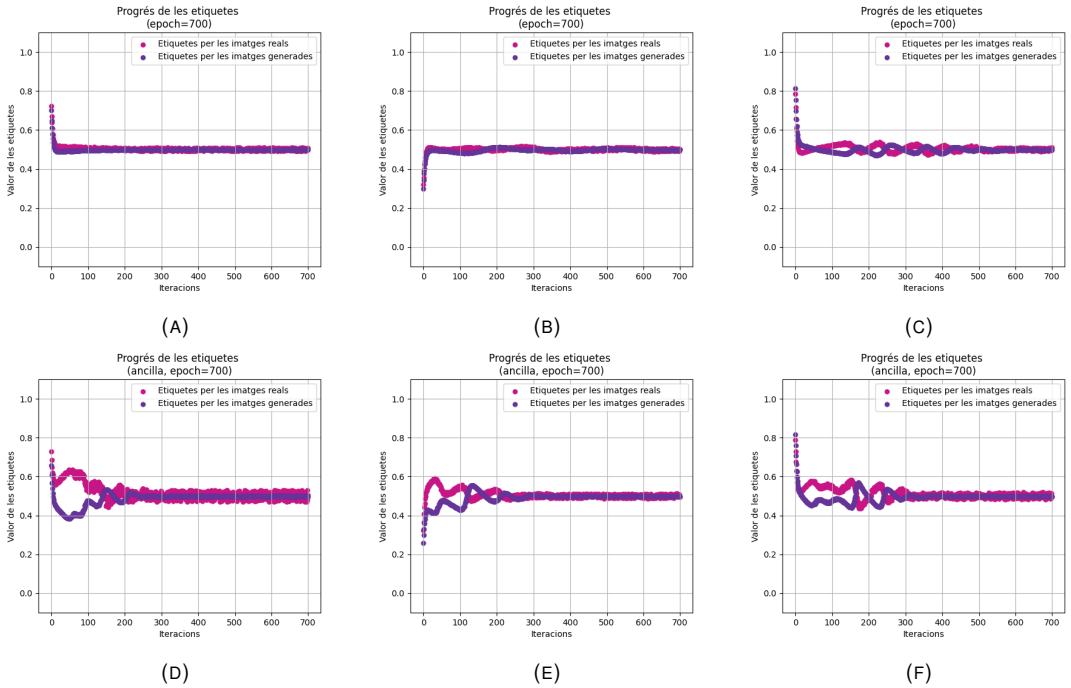


FIGURA 7.2: Es pot apreciar com els models sense la funció no lineal (**A**, **C**, **B**) tenen una major estabilitat en les etiquetes comparats amb els models que sí tenen la funció no lineal (**D**, **E** i **F**).

La part que realment m'intriga és que durant les primeres iteracions, en els circuits amb els qubits ancilla el píxel que té el valor de 1, passa d'un a un altre. Aquest comportament succeeix a absolutament cada vegada que he executat el codi. Igual que he dit abans, arribar a comprendre la causa d'aquest fet està fora del meu nivell de coneixement.

[4]Saber com es comporten sistemes quàntics que tenen parts entrellaçades com aquest està fora del meu àmbit.

Estic bastant segur que aquesta fluctuació dels píxels és el factor que causa la inestabilitat que es pot observar en les etiquetes.

Després de mirar les gràfiques que generaven els models, vaig posar-me a redactar les conclusions, malgrat això, no estava satisfet amb la precisió de l'anàlisi de les dades. No podia saber amb certesa quin dels dos tipus de models era el més eficient. Necessitava una mètrica que en digués quina és la semblança entre les imatges generades i les imatges reals. Sabia que en l'article en el qual he basat el treball els autors havien fet servir una mètrica anomenada *Férchet Score* o puntuació de Férchet, en la qual s'emprava la distància de Férchet. Aquesta distància serveix per comparar dues distribucions a partir de la seva mitjana i la seva covariància.

Llavors vaig decidir implantar aquesta mètrica, i veure com evoluciona al llarg de l'optimització.

En un article sobre l'avaluació de les imatges generades per les GAN [56], vaig trobar aquesta equació per calcular la distància de Férchet:

$$FD(r,g) = |\mu_r - \mu_g|^2 + \mathrm{tr}\Big(\Sigma_r + \Sigma_g - 2(\Sigma_r\Sigma_g)^{\frac{1}{2}}\Big)$$

On μ és la mitjana[5] i Σ és la covariància d'una distribució. Aquesta equació l'he implementat en Python mitjançant matrius, és a dir les imatges. Només em feia falta trobar una funció per poder calcular la covariància d'una matriu, afortunadament Numpy en té una, on cada fila representa una variable d'una distribució. No puc estar 100% segur de què he implementat aquesta mètrica correctament, ja que no sé el funcionament exacte de la covariància, ni de la funció de Numpy. No obstant això, sembla que funciona correctament.

Cal notar que si les dues imatges són exactament iguals, la distancia dona pràcticament zero[6]. Per considerar que dues imatges són «acceptablement semblants», han de tenir una distància entre elles de 10^{-3} aproximadament.

[5] Jo he utilitzat la mitjana aritmètica.
[6] Python diu que és d'un ordre de magnitud de 10^{-16} aproximadament.

Part IV

Conclusions

Una vegada havia implementat la distància de Férchet per poder avaluar el rendiment dels models, vaig arribar a una clara conclusió:

Els models que tenen implementada la funció no lineal són més eficients.

Afirmo això perquè els models sense la funció no arriben a estabilitzar-se, és a dir, no arriben al punt d'equilibri. En canvi, els models que tenen la funció si ho fan. Arribar al punt d'equilibri garanteix que les imatges generadas siguin com les reals. I que per molt més que el model segueixi optimitzant-se, sempre donará les millors imatges generades.

Els models que no presenten la funció no assoleixen aquest punt a causa que la semblança de les imatges oscil·la, és a dir, el model pot arribar a generar imatges correctament, però no ho fa indefinidament, al cap d'unes interaccions la semblança de les imatges generades amb les reals ja no és significativa. Simplement, la qualitat de les imatges generades va oscil·lant entre bona i dolenta. Tot i que hi ha excepcions, a vegades els models sense la funció no experimenten aquesta oscil·lació. Tanmateix cal remarcar que les vegades que passa són notablement més altes que les que no passa. Com es pot veure amb les dades de la taula 7.1.

Aquest problema no és causat pel discriminador, això és perquè la variable independent de l'experiment és el circuit quàntic del generador, per tant, és el factor que té més possibilitat de ser el causant d'aquest comportament. No sé molt bé la causa exacta, però està clar que el mesurament parcial té un impacte.

	Presenta oscil·lació	No Presenta oscil·lació
Amb Funció No Lineal	0	6
Sense Funció No Lineal	5	1

TAULA 7.1: Les dades provenen d'un total de 6 models, 3 d'ells amb un total de 700 epoch i els altres 5 amb un total de 550. El nombre d'interaccions no hauria d'afectar de cada manera les dades. Degut si hi ha una oscil·lació, es pot veure clarament a partir de les 400 iteracions. Amb les dades es pot veure que és més probable que un model sense la funció lineal presenti una oscil·lació. Cal notar que cap model amb la funció ha tingut una oscil·lació. Les gràfiques que corresponen a cada model es poden veure en les figures 7.4 i 7.3.

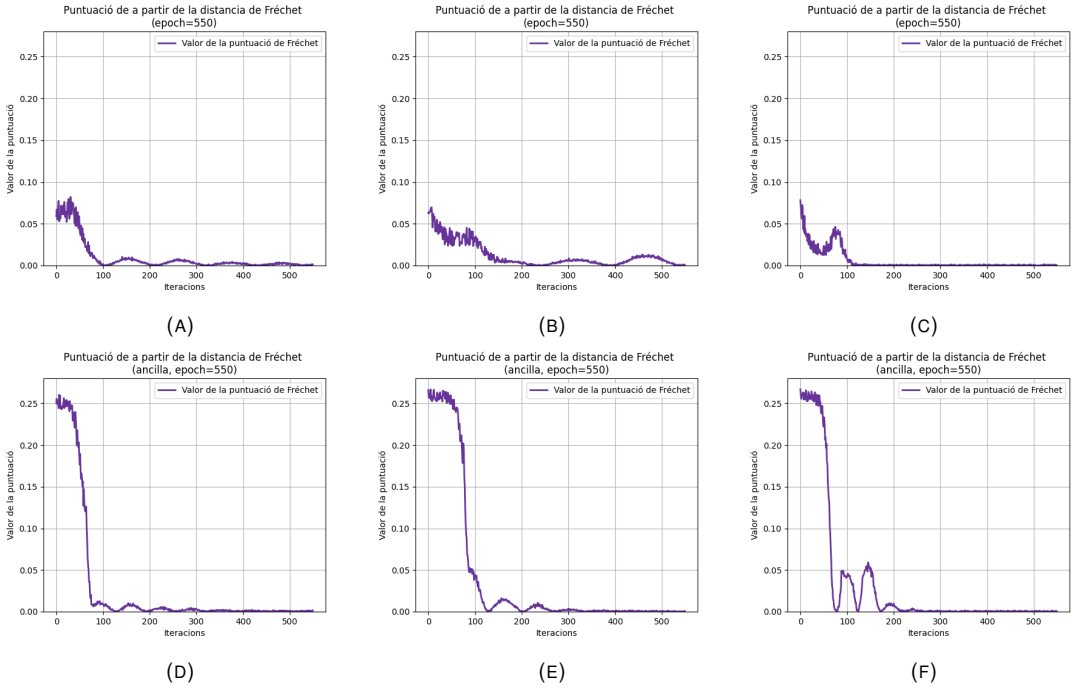


FIGURA 7.3: Totes les gràfiques corresponen a models que s'ha executat al llarg de 550 iteracions. Les figures **A**, **B** i **C**, corresponen a models sense la funció lineal. L'únic d'ells que no presenta una oscil·lació és el **C**. Les gràfiques sense la funció es poden comparar a les d'abaix, les quals representen models amb la funció implementada. Els models han estat creats per parelles, les quals estan organitzades verticalment. És a dir, les gràfiques **A** i **D** representen models que tenen els mateixos paràmetres inicials. El mateix passa amb **B** i **E** i amb **C** i **F**.

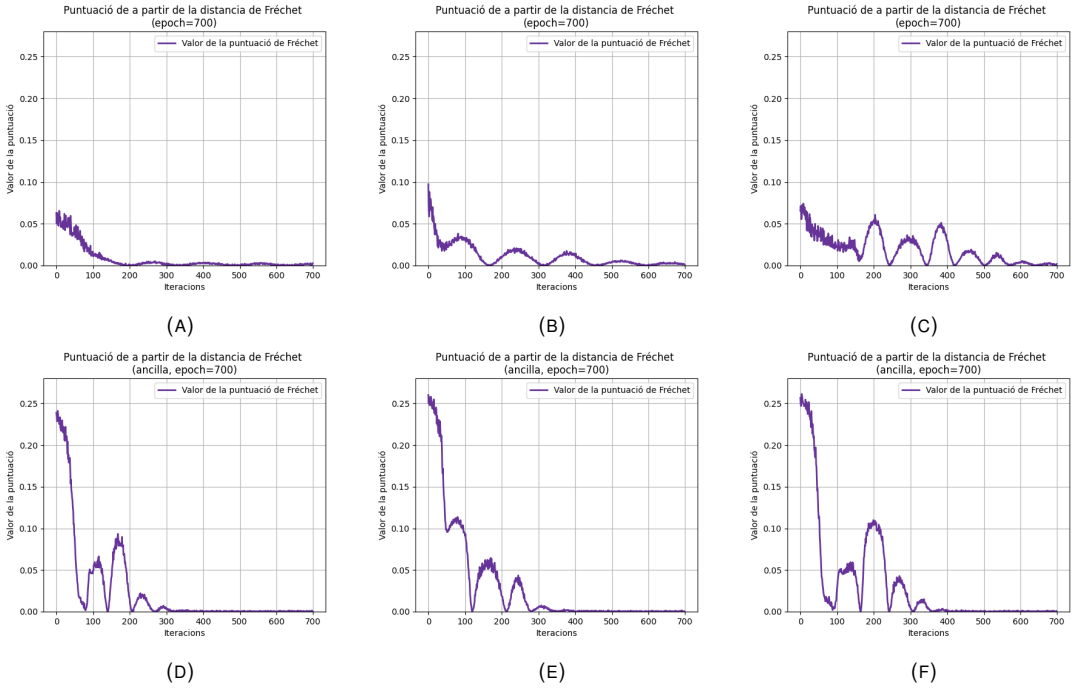


FIGURA 7.4: Aquestes gràfiques corresponen a models que s'han executat al llarg de 700 iteracions. Estan organitzades igual que les gràfiques de la figura 7.3. En aquests casos, com es pot observar tots els models sense la funció no lineal presenten les oscil·lacions. No obstant en la gràfica **A**, aquesta es molt feble. Per veure com afecten les oscil·lacions es pot veure la figura, on estan representades les últimes imatges que han generat els models que corresponen les gràfiques d'aquesta figura.

En les gràfiques 7.3 i 7.4 es pot veure perfectament l'oscil·lació en la Distància de Fréchet. En aquest cas es pot interpretar aquesta mètrica com la semblança entre les imatges generades i les reals. Si aquesta mètrica convergeix a zero, es pot dir que el model a arribat al seu punt d'equilibri. Es pot veure com tots els models que tenen el mesurament parcial assoleixen aquest punt. D'aquesta manera demostrant l'eficàcia de la funció no lineal.

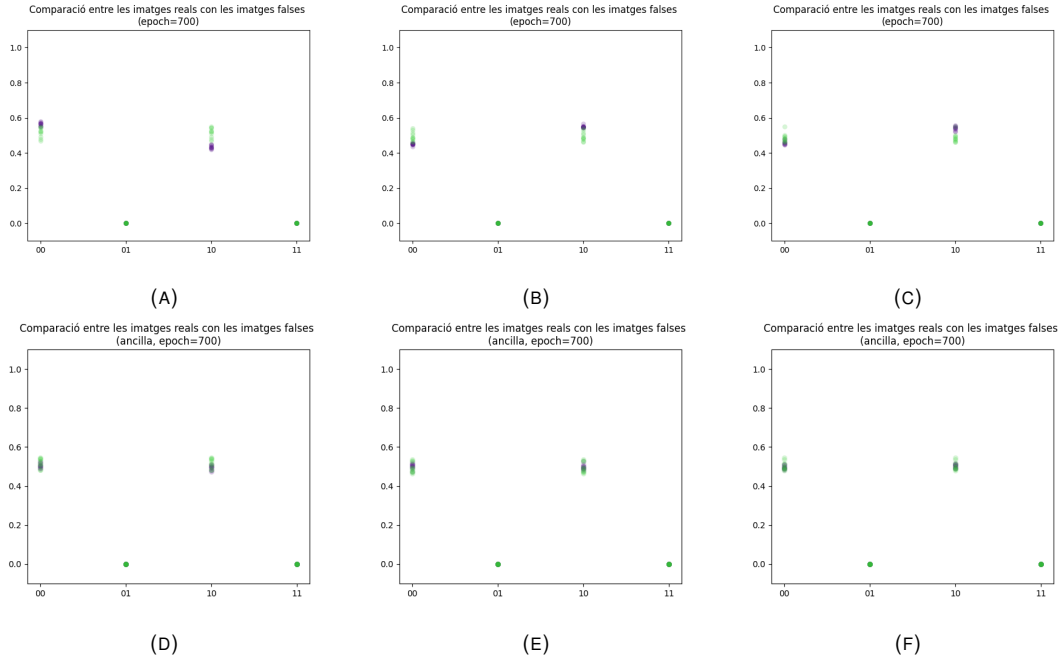


FIGURA 7.5: Aquestes gràfiques corresponen als mateixos models que els de la figura 7.4. Les posicions de les gràfiques són les mateixes, per tant, si estan en la mateixa posició que les de l'altra figura, corresponen al mateix model. Les imatges generades pels models sense la funció no lineal (**A**, **C**, **B**) no s'assemblen a les reals. Es pot veure com els punts de les imatges generades (color violeta) no estan als mateixos valors. Mentre que en les gràfiques **D**, **E** i **F**, sí que ho estan. Els punts violetes sembla que representen la mitjana dels punts verds. També es pot observar que les imatges generades tendeixen a ser més variades que les reals.

Per poder veure la diferència entre les imatges directament, es pot veure la figura 7.5, en la qual es mostren les 10 últimes imatges generades pels models optimitzats al llarg de 700 iteracions.

A partir de la Distància de Fréchet es pot apreciar l'efecte que té el mesurament parcial en la generació de les imatges, fent que aquest procés sigui més eficient i evitant una oscil·lació entre la generació d'imatges de bona i dolenta qualitat. Per tant, es pot afirmar que el mesurament té un efecte positiu en el model, corroborant la tesi exposada en Huang et. al. (2021) [5].

No obstant això, es podria desenvolupar aquest experiment en major profunditat. No he tingut en compte el temps en el qual es tarden a generar les imatges. Els models amb el mesurament parcial implementat són més eficients, però en tenir més qubits és més costos simular-los i, per tant, tarden més temps per cada interacció. He fallat en mirar exactament quina és la diferència en termes de temps, tanmateix, ja que els models sense la funció no lineal no arriben

a assolir el punt d'equilibri la gran majoria de les vegades, des d'un punt pràctic és recomanable utilitzar els models que si tenen la funció.

A més a més es podria investigar la causa de l'oscil·lació en major profunditat. Deixant de banda la investigació teòrica de per què passa, es podria variar el nombre de qubits en els circuits, tant els ancilla, com el total de qubits del circuit, per veure quin és l'efecte que té tenir més qubits en el sistema ancilla. Potser investigaré pel meu compte aquesta qüestió.

El camí que he recorregut

Vull dedicar un petit espai per poder parlar sobre que significa aquest treball per a mi, de tot l'esforç que he posat en aquest, i finalment comentar tot el que he après.

Fa dos anys que vaig començar a aprendre conceptes de computació quàntica, ha sigut un camí molt llarg, però que m'ha encant de recórrer. Pensar en tot l'ho que he après em dona una gran alegria. Els camps dels quals he parlat realment m'encanten (computació quàntica i intel·ligència artificial). A més a més, aprendre tot això m'ajudaria molt en cas que estudiï una carrera en física, que és el meu objectiu.

Deixant d'una banda els evidents beneficis d'avançar temari d'una carrera que vols fer en un futur, fent aquest treball he après altres coses extremadament útils.

Primer de tot, aquest treball està redactat en LaTeX[7], una espècie de llenguatge de programació per escriure equacions matemàtiques i documents de text. És àmpliament utilitzat per escriure articles científics en el món acadèmic, però més important, és utilitzat en l'ambient educatiu de les ciències exactes per poder entregar deures, reports del laboratori, i fer apunts. Tots els meus amics que estudien física o matemàtiques ho fan servir.

[7] La web oficial de LaTeX

A continuació està el fet de crear un gran projecte científic en Python, he après a programar fins al punt que crec que soc bastant bo, és allò que se'm dona millor diria. Programar en Python també és una habilitat que em serà útil a la universitat, perquè és el llenguatge de programació que es fa servir en la carrera de Física a la UB per realitzar experiments computacionals. Però, també vull mencionar que al llarg del procés de la creació del model van sorgir moltíssims problemes, en aquest document només he esmenat una part petita dels problemes que em vaig trobar al llarg del camí. Vaig estar més de mig any programant aquest model fins que estava tot perfecte per fer l'experiment. Definitivament, ha sigut la part més dura de tot el treball.

Per últim, he après a llegir articles científics sobre computació quàntica i intel·ligència artificial. Soc familiar amb la notació que s'empra en aquest camp i també el llenguatge específic que s'utilitza en els articles, amb això em refereixo a les expressions en anglès. No obstant això, hi ha coses que no puc arribar a comprendre és clar, òbviament no tinc els mateixos coneixements d'un estudiant de postgrau de física, matemàtiques o ciències de la computació. I no vull dir que puc valorar els articles d'alguna manera, tan sols puc comprendre'ls.

Penso que aquest treball és el millor que he fet en la meva vida acadèmica, sigui en termes d'utilitat o en termes de realització personal, m'ha encantat fer-ho. He dedicat dos anys de la meva vida a això; des del primer moment que vaig veure que era la computació quàntica vaig tindre clar que faria el treball de recerca sobre aquest camp. No me'n penedeixo de tot l'esforç que hi he posat.

Part V

Annexos

Capítol A

Que podria fer en un futur?

M'agradaria parlar sobre que és el que vull fer en el futur. Gaudeixo massa aprendre sobre aquests camps i programar experiments, com per a deixar tot això de banda.

La primera opció seria investigar en major profunditat com afecta aquest mesurament parcial a l'eficiència dels models, i veure per què la funció de pèrdua oscil·la d'aquesta manera.

Pel que fa a la segona opció, en aquesta entraria tot el que té a veure amb generar imatges amb la qGAN que he fet. Podria posar-me a generar imatges més complexes com dígits escrits a mà, igual que han fet els autors de l'article en el qual he basat aquest treball. També podria provar de generar imatges a color, ja m'he llegit uns quants articles que donen a terme aquesta fita i em sembla molt interessat. A més de tot això s'ha m'acudeix implementar el meu codi en un ordinador quàntic de veritat, però no crec que no faci perquè el meu model requereix moltes avaluacions de diversos circuits quàntics i no penso que IBM Quantum Experience em deixaria fer-les totes.

Com a última opció he pensat fer una cosa completament diferent de la generació d'imatges. Existeixen models generatius que es basen en el que s'anomena *feature encoding*, és a dir, trobar les característiques d'un objecte i a partir d'elles sintetitzar nous objectes. Un gran exemple d'aquests models és Juxebox desenvolupat per OpenAI [57]. Aquest model serveix per a la generació

de música. Consisteix a treure les característiques de l'estil i música d'un artista, i partir d'una gravació d'una veu que canta, transformar la gravació en una cançó amb l'estil de l'artista analitzat.

Aquests tipus de models tenen una arquitectura anomenada *autoencoder*, la qual ja ha sigut implementada en models quàntics [58]. Vull veure si és possible fer alguna cosa semblant a *Jukebox*, no necessàriament per generar dades, sinó per veure si és possible fer *feature encoding* en un circuit quàntic. No penso que sigui probable fer-ho, però serà divertit intentar-ho.

Tanmateix, l'opció més intel·ligent seria centrar-me en les bases de la computació quàntica i aprendre les subrutines que existeixen com la transformada de Fourier quàntica i l'estimació de fase, els pilars dels algoritmes quàntics. A més a més hi ha algoritmes molt interessants i útils que he d'aprendre a utilitzar i encara més important, comprendre'ls; he de desenvolupar més intuïció. Aquesta última opció és que segur que faré en algun moment, possiblement en l'estiu abans d'entrar en la universitat.

Capítol B

Més àlgebra lineal

B.1 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 [59]:

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 a *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 a *bra*
$\langle\varphi\|\psi\rangle$	Producte interior dels vectors $\langle\varphi\|$ i $\|\psi\rangle$
$\|\varphi\rangle\langle\psi\|$	Producte exterior dels vectors $\langle\varphi\|$ i $\|\psi\rangle$
$\|\psi\rangle \otimes \|\varphi\rangle$	Producte tensorial dels 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 dels nombres complexos

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.

Capítol C

Computació Quàntica vs Mecànica Quàntica

En la introducció havia mencionat que una de les raons per les quals havia començat a aprendre i recercar sobre computació quàntica era perquè era fàcil. En aquest annex explicaré exactament a què em refereixo per això amb un exemple pràctic. Dic que és fàcil, perquè ho és si es compara amb la mecànica quàntica.

En mecànica quàntica la manera més usual de representar els estats quàntics, com els orbitals d'un àtom d'hidrogen és a través de *wavefunctions* o funcions d'ona, no se solen representar mitjançant vectors d'estat. Aquestes funcions d'ona són molt útils i poden representar casos més generals que els vectors d'estat. No obstant això, treballar amb elles és molt més complicat, ja que són funcions que depenen del temps, no són vectors. Això implica que s'han d'utilitzar altres operacions per normalitzar les funcions, determinar com evolucionen en el temps o per fer mesures. A continuació faré una comparació entre com es preserva la normalització d'una funció d'ona i la d'un vector d'estat quan aquests objectes evolucionen en el temps per poder mostrar un exemple de com la mecànica quàntica més bàsica em sembla més complicada que la computació quàntica més bàsica.

C.1 Normalitzar

A causa de la interpretació probabilística dels vectors d'estat i de les funcions d'ona, aquests objectes han de ser normalitzats perquè la suma de les probabilitats dels possibles estats de mesura sigui 1.

Per una funció d'ona $\Psi(x,t)$ que representa una partícula, la probabilitat de trobar aquesta partícula en un punt x és $|\Psi(x,t)|^2$. Per tant, la funció d'ona ha de ser normalitza seguint la fórmula:

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

Ja que la funció d'ona evoluciona a través del temps d'acord amb l'equació de Schrödinger (veure la figura C.1) qualsevol solució d'aquesta equació ha d'estar també normalitzada. En altres paraules, aquesta equació ha de preservar la normalització de les funcions d'ona [60].

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

FIGURA C.1: **Equació de Schrödinger**. On $\hbar$ és $h/2\pi$, i V és una funció potencial d'energia.

Podem provar que aquesta equació preserva la fórmula C.1, començant per la igualtat trivial:

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

Per la regla del producte tenim que [1]:

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

Ara l'equació de Schrödinger diu que

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

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

després calculant el complex conjugat tenim que

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

per tant

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

finalment podem avaluar l'integral del principi:

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

Degut a que $\Psi(x,t)$ ha de convergir a zero quan x va cap a infinit, es veritat que:

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

Es pot veure que l'integral és constant, per tant, quan Ψ és normalitzada a $t = 0$, es queda d'aquesta manera per qualsevol t (positiu és clar), i la normalització d'una funció d'ona és constant si aquesta evoluciona d'acord amb l'equació de Schrödinger.

Mentre que amb un vector d'estat és molt més simple: al evolucionar a partir de matrius unitàries, les quals preserven la norma del vector a la qual s'apliquen; si el vector al qual s'aplica una porta quàntica té una norma de 1, aquesta norma es preservarà.

Capítol D

Complexitat i algoritmes quàntics

En ciències de la computació existeix el concepte de *Big-O Notation*, una forma de quantificar l'eficiència dels algoritmes, la qual s'anomena la complexitat algorítmica. Bàsicament, és una forma de classificar-los segon la rapidesa que tenen en fer la tasca que els correspon, aquesta rapidesa no és mesura en segons, ja que aquesta mètrica pot variar d'ordinador a ordinador per les diferències en hardware que aquests poden tindre. En canvi, es mesura segons el nombre d'operacions que són necessàries, sense unitats.

La *Big-O Notation* consisteix a definir el nombre màxim d'operacions que necessita un algoritme, es denota com $O(\cdot)$ on l'argument usualment depèn de n que és la mida de l'input a l'algoritme, per exemple un algoritme de cerca ha de cercar a través de n coses. A continuació parlo d'un exemple en concret; l'algoritme de cerca de cadenes binàries corre en un temps $O(\log_2 n)$, on n és el nombre de cadenes entre les quals ha de cercar. La notació $O(\cdot)$ es diu que és el *upper bounded*, això significa que $\log_2 n$ és la quantitat de temps més gran en la qual es trobaria la cadena. Això vol dir que és possible que a la primera comprovació aconsegueixi trobar la cadena que se cerca, llavors l'algoritme acabaria en un temps $O(1)$. Simplement, aquesta notació és una manera d'avaluar que eficients són els algoritmes amb relació a la mida de l'input que tenen. Cal notar que les operacions específiques que es quantifiquen varien entre els tipus d'algoritmes. Cada grup d'algoritmes que tenen la mateixa tasca, tenen una operació a quantificar diferent.

Amb aquesta notació tenim una manera de comparar l'eficiència que tenen els algoritmes quàntics amb els clàssics que tenen la mateixa funció. Per il·lustrar l'avantatge en eficiència que presenten els algoritmes quàntics, presentaré a continuació els dos algoritmes més famosos, el de Grover, i el de Shor. Que serveixen per a la cerca d'un element en una llista desordenada, i per la factorització en nombres primers; respectivament.

D.1 Algoritme de Grover

En 1996, Lov Grover va presentar un algoritme quàntic per cercar entre una sèrie de dades desordenades [61] (e.g. cercar el número de telèfon en una llista desordenada). Per aquest problema un algoritme clàssic té una complexitat de $O(N)$ cerques[1], mentre que l'algoritme de Grover té una complexitat de $O(\sqrt{N})$, sent substancialment més eficient. En les paraules de Grover [61] (adaptades): un ordinador clàssic per tindre una 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 algoritme s'obté el número de telèfon en només $O(\sqrt{N})$ passos[2].

L'algoritme funciona de la següent manera:

1. S'agafa un sistema de n qubits en l'estat $|0\rangle$ que resulten en una combinació de $N = 2^n$ estats. Aplicar una distribució uniforme als qubits, és a dir, aplicar portes Hadamard a tots els qubits, tenint al final un estat resultant $|s\rangle$:

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle$$

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

[2] Per passos entenc que es refereix al nombre de vegades que es mira a l'oracle, és a dir, el nombre que de vegades que es verifica si s'ha trobat l'element que se cerca.

2. Aplicar $\approx \frac{\pi}{4}\sqrt{N}$ vegades l'operador de Grover G, que consisteix en el següent conjunt d'instruccions:

1: Aplicar l'*Oracle* U_ω

2: Aplicar portes Hadamard a tots els qubits

3: Aplicar el *Grover diffusion operator* $U_s = 2\left|s\right\rangle\left\langle s\right| - I$

4: Aplicar una altre vegada les portes Hadamard

L'*oracle* és un tipus de funció que s'utilitza en els algoritmes de cerca, té la finalitat de reconèixer si un element és l'element que s'està cercant. Els algoritmes de cerca es construeixen al voltant de l'*oracle*, i diversos algoritmes tenen diverses formes de consultar-lo. A més a més, la quantitat de consultes a l'*oracle* serveixen per quantificar la complexitat de l'algoritme, a més consultes, més ineficient és l'algoritme.

Al veure el procediment de l'algoritme es pot veure que l'*oracle* es consulta aproximadament $\frac{\pi}{4}\sqrt{N}$, vegades, d'aquesta manera resultat en una complexitat aproximada de $O(\sqrt{N})$, on $N = 2^n$ per n qubits, com ja he esmentat anteriorment.

No entraré més en profunditat sobre aquest algoritme, perquè si no hauré d'introduir més conceptes de computació quàntica com ara la fase d'un estat, o començar a utilitzar notació més complicada que també hauré d'explicar. Em sap greu, perquè és un algoritme que funciona d'una manera molt bonica de veure. També em sembla el millor algoritme per poder explicar una de les millors característiques de la computació quàntica, tenir algoritmes que et descarten automàticament els estats dolents dintre d'una combinació d'estats, d'aquesta manera lliurant un estat concret desitjat d'entre la combinació. En el cas de l'algoritme de Grover aquest estat desitjat, és l'estat que està cercant l'*oracle*.

D.2 Algoritme de Shor

No explicaré aquest algoritme en profunditat perquè és molt complex[3], no surt ni en els llibres de texts als quals tinc accés. Simplement, em limitaré a explicar

[3]Hauria d'introduir nous conceptes com la fase d'un qubit i com efectuar la transformada de Fourier inversa en un circuit quàntic, a més a més hauria d'explicar-lo en una notació bastant complexa. Però, es pot entendre com funciona sense cap problema veient l'entrada de Wikipedia sobre aquest algoritme.

quina és la seva utilitat i el compararé amb les seves alternatives clàssiques.

L'algoritme de Shor per la factorització en nombres primers [62], és probablement l'algoritme quàntic més famós i més rellevant que hi ha, degut a la gran diferencia en complexitat que té en comparació als seus algoritmes anàlegs clàssics, i a causa del gran impacte que tindria la seva implementació a gran escala. Aquest últim punt és el més interessant i cridaner, per tant, és el que desenvoluparé en major profunditat.

Actualment, totes les dades encriptades que s'envien a través d'internet són encriptades mitjançant la família de protocols RSA[4]. Aquests protocols són lleugerament complicats, no els explicaré, l'únic fet que hem de tenir en compte és que per desencriptar un missatge s'ha de trobar els factors prims d'un nombre n, és a dir, dos nombres primers p i q que multiplicats donin n. Amb aquests nombres es poden saber les claus públiques i privades per encriptar i desencriptar missatges. n seria la clau pública, un nombre que tothom pot conèixer i amb el qual es poden encriptar missatges. Mentre que a partir de p i q es pot trobar la clau privada que correspon a la clau pública. Amb aquesta clau es pot desencriptar un missatge encriptar amb n, per aquesta raó es mantenen els nombres p i q secrets. Es pot entendre la clau pública com un cadenat que només s'obre amb la clau privada. Cal mencionar que a cada clau privada correspon una clau pública, són paralles úniques.

En encriptació es busca el que es diu *one way operations*, és a dir, una operació que sigui fàcil d'efectuar, però que la seva inversa requereixi molts recursos computacionals per donar-la a terme. L'operació $n = pq$ compleix aquest requisit, és fàcil multiplicar els nombres primers p i q i trobar n, però és molt difícil trobar els nombres p i q sabent n, amb n sent un nombre de moltes xifres. Els millors algoritmes per donar a terme aquesta tasca requereixen moltíssim temps computacional en els ordinadors clàssics. Per aquesta raó el protocol RSA s'utilitza àmpliament, és molt segur perquè és molt difícil saber la clau privada a partir de n. Si n és un nombre de 2048 bits, amb la tecnologia actual no és possible

[4]RSA són les sigles dels creadors d'aquests protocols; Ron Rivest, Adi Shamir i Leonard Adleman, que en 1977 van publicar els resultats de la seva investigació [63].

trobar els nombres primers p i q en un temps raonable. Dic raonable perquè es pot arribar a descobrir, però es tardaria milers d'anys inclús amb els ordinadors més potents del planeta.

Ara és quan l'algoritme de Shor juga la seva part, com ja he dit s'utilitza per a la factorització de nombres primers, i és extremadament eficient en comparació als seus anàlegs clàssics. En termes de complexitat, aquest algoritme pot factoritzar un nombre de N dígits en un temps polinomi de $O(\log N)$ [5]. Mentre que el millor algoritme clàssic per factoritzar en nombres primers té una complexitat de $O(e^{c(\log N)^{\frac{1}{3}}(\log\log N)^{\frac{2}{3}}})$ per una constant c. És a dir, que clàssicament es pot factoritzar en un temps exponencial [62], o com a mínim en un temps sub-exponencial. Un algoritme que s'executa en temps sub-exponencial segueix sent més ineficient que un que s'executa en temps polinomi, però significativament més eficient que un que s'executa en temps exponencial. De totes maneres només cal tenir en compte que l'algoritme de Shor és molt més eficient que el millor algoritme clàssic que dona a terme la mateixa tasca.

S'estima que amb un ordinador quàntic prou avançat es podrien arribar a factoritzar nombres els quals tenen una mida que actualment utilitzem[6], però amb la tecnologia actual aquesta fita és impossible. El record pel nombre més gran factoritzat per un ordinador quàntic en l'actualitat el posseeix un equip de la Universitat de Bristol al Regne Unit. En 2021 van aconseguir factoritzar 21 amb un ordinador quàntic que funciona a partir d'un sistema fotònic [64].

D.3 Ordinadors quàntics actuals

El només ser capaços de poder factoritzar 21 il·lustra lo nova que és la tecnologia que està al darrere dels ordinadors quàntics. És un camp que té pocs anys de vida, i en el qual és difícil fer grans avanços. Al moment només es pot utilitzar

[5] Concretament la seva complexitat mesurada mitjançant la quantitat de portes quàntiques seria de $O((\log n)^2(\log\log n)(\log\log\log n))$, per factoritzar un nombre n amb una longitud de $\log n$ bits.

[6] D'uns 2048 o 1024 dígits per exemple.

el millor algoritme que ofereix la computació quàntica per poder fer una tasca extremadament simple[7].

Això és a causa de la petita quantitat de qubits dels quals disposen els ordinadors quàntics actuals i als errors que aquests donen a terme a l'hora d'aplicar operacions. Quan un ordinador quàntic aplica una rotació en l'estat d'un qubit físic, aquest ho fa amb una certa imprecisió. El mateix passa a l'hora d'aplicar portes a dos qubits, com per exemple una CNOT. Els ordinadors quàntics actuals només són utilitzats per fer experiments, com provar nous algoritmes i valorar els mateixos ordinadors. Pràcticament, no existeixen situacions pràctiques en les quals els ordinadors quàntics actuals siguin més útils que els clàssics. Tanmateix, és una tecnologia molt prometedora, en la qual grans companyies com Google, IBM, Amazon estan invertint per investigar-la, igual que altres companyies més petites i nombrosos equips d'investigació al llarg del món. S'espera que un futur els ordinadors quàntics ens permetran dur a terme tasques que són impossibles de realitzar en ordinadors clàssics, sobretot en tenir en compte que s'espera que començarem a arribar a limitacions físiques si continuem millorant els processadors d'ordinadors actuals.

[7] $3 \times 7 = 21$

Capítol E

Codi

En l'annex 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. Per comprendre el codi es recomanable tenir coneixement previs de Python. Tanmateix, la gran majoria del codi està comentat. Aquesta secció existeix principalment per deixar constància la quantitat d'esforç que he ficat en fer aquest model, han sigut molts mesos de treball.

IMPORTANT: Si hi ha text en català dintre del codi (n'hi ha en forma de comentaris), no porta accents perquè els paquets que utilitzo per formatejar el codi d'aquesta manera dintre del document no els accepta. Però si es mira el codi en el repositori del treball es pot veure que sí que té accents. No em deixa posar ni accents, ni la ce trencada, ni la ele geminada. L'error diu que no són caràcters que estan en Unicode UTF-8, quan sí que estan allà, per fet que és un codi que suposadament està internacionalitzat per tots els llenguatges que es fan servir.

Més informació sobre el codi

Aquest projecte de Python el vaig començar a desenvolupar mitjançant una Jupyter Notebook, a través de Google Colab, però degut a que el projecte va augmentar de mida i necesitava més eines (com un *debugger*[1]), vaig decidir passar-me a un IDE (*Integrated Development Environment*), un programa que facilita la feina del programador amb l'objectiu de ser més eficient. Vaig decidir-me per un IDE expressament dissenyat per a Python, PyCharm, creat per JetBrains. Concretament per la versió *community*, que és d'ús gratuït. Per poder manejar els paquets de Python, vaig veure que existien programes com Anaconda, per tant també el vaig instal·lar.

Els paquets que són necessaris per executar el codi estan especificats en el repositori del treball. Tota l'informació corresponent a aquest treball es pot trobar en aquest. Des dels arxius de LaTeX fins als canvis que vaig anar fent al llarg del treball.

E.1 Part I

E.1.1 Capítol 3

E.1.1.0.1 Regressió lineal Codi per efectuar una regressió lineal a dades que es generen a l'atzar en el mateix arxiu, l'utilitzo per poder generar un gràfic per il·lustrar un exemple de regressió lineal. Aquest tros de codi l'he tret de GitHub[2].

```
1    import numpy as np
2    from matplotlib import pyplot as plt
3    import matplotlib
4
5    font = {'family' : 'Helvetica',
6        'size'   : 18}
7
```

[1] Un *debugger* és una eina que serveix per diagnosticar i arreglar problemes en el codi, és extremadament útil.

[2] Gist realitzat per l'usuari *jimimvp*: enllaç

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

    # generate the data
    np.random.seed(222)
    X = np.random.normal(0,1, (200, 1))
    w_target = np.random.normal(0,1, (1,1))
    # data + white noise
    y = X@w_target + np.random.normal(0, 1, (200,1))

    # least squares
    w_estimate = np.linalg.inv(X.T@X)@X.T@y
    y_estimate = X@w_estimate

    # plot the data
    plt.figure(figsize=(15,10))
    plt.scatter(X.flat, y_estimate.flat, label="Prediccio")
    plt.scatter(X.flat, y.flat, color='red', alpha=0.4, label="Dades")
    plt.tight_layout()
    plt.title("Regressio per diferencia de quadrats")
    plt.legend()
    plt.savefig("least_squares.png")
    plt.show()
```

LISTING E.1: Regressió lineal

E.2 Part II

E.2.1 Capítol 6

E.2.1.0.1 Codi original per la xarxa neuronal clàssica

Està extret del repositori de GitHub de Micheal Nielsen, concretament del arxiu `network.py`.

```
"""
network.py
~~~~~~~~~~
A module to implement the stochastic gradient descent learning
algorithm for a feedforward neural network.  Gradients are calculated
using backpropagation.  Note that I have focused on making the code
simple, easily readable, and easily modifiable.  It is not optimized,
and omits many desirable features.
"""

#### Libraries
```

```
# Standard library
import random

# Third-party libraries
import numpy as np

class Network(object):

    def __init__(self, sizes):
        """The list ``sizes`` contains the number of neurons in the
        respective layers of the network.  For example, if the list
        was [2, 3, 1] then it would be a three-layer network, with the
        first layer containing 2 neurons, the second layer 3 neurons,
        and the third layer 1 neuron.  The biases and weights for the
        network are initialized randomly, using a Gaussian
        distribution with mean 0, and variance 1.  Note that the first
        layer is assumed to be an input layer, and by convention we
        won't set any biases for those neurons, since biases are only
        ever used in computing the outputs from later layers."""
        self.num_layers = len(sizes)
        self.sizes = sizes
        self.biases = [np.random.randn(y, 1) for y in sizes[1:]]
        self.weights = [np.random.randn(y, x) for x, y in zip(sizes[:-1], sizes
    [1:])]

    def feedforward(self, a):
        """Return the output of the network if ``a`` is input."""
        for b, w in zip(self.biases, self.weights):
            a = sigmoid(np.dot(w, a)+b)
        return a

    def SGD(self, training_data, epochs, mini_batch_size, eta, test_data=None):
        """Train the neural network using mini-batch stochastic
        gradient descent.  The ``training_data`` is a list of tuples
        ``(x, y)`` representing the training inputs and the desired
        outputs.  The other non-optional parameters are
        self-explanatory.  If ``test_data`` is provided then the
        network will be evaluated against the test data after each
        epoch, and partial progress printed out.  This is useful for
        tracking progress, but slows things down substantially."""
        if test_data: n_test = len(test_data)
        n = len(training_data)
        for j in xrange(epochs):
            random.shuffle(training_data)
            mini_batches = [training_data[k:k+mini_batch_size] for k in xrange(0, n
    , mini_batch_size)]
            for mini_batch in mini_batches:
```

```
                self.update_mini_batch(mini_batch, eta)
            if test_data:
                print "Epoch {0}: {1} / {2}".format(j, self.evaluate(test_data),
    n_test)
            else:
                print "Epoch {0} complete".format(j)

    def update_mini_batch(self, mini_batch, eta):
        """Update the network's weights and biases by applying
        gradient descent using backpropagation to a single mini batch.
        The ``mini_batch`` is a list of tuples ``(x, y)``, and ``eta``
        is the learning rate."""
        nabla_b = [np.zeros(b.shape) for b in self.biases]
        nabla_w = [np.zeros(w.shape) for w in self.weights]
        for x, y in mini_batch:
            delta_nabla_b, delta_nabla_w = self.backprop(x, y)
            nabla_b = [nb+dnb for nb, dnb in zip(nabla_b, delta_nabla_b)]
            nabla_w = [nw+dnw for nw, dnw in zip(nabla_w, delta_nabla_w)]
        self.weights = [w-(eta/len(mini_batch))*nw for w, nw in zip(self.weights,
    nabla_w)]
        self.biases = [b-(eta/len(mini_batch))*nb for b, nb in zip(self.biases,
    nabla_b)]

    def backprop(self, x, y):
        """Return a tuple ``(nabla_b, nabla_w)`` representing the
        gradient for the cost function C_x.  ``nabla_b`` and
        ``nabla_w`` are layer-by-layer lists of numpy arrays, similar
        to ``self.biases`` and ``self.weights``."""

        nabla_b = [np.zeros(b.shape) for b in self.biases]
        nabla_w = [np.zeros(w.shape) for w in self.weights]
        # feedforward
        activation = x
        activations = [x] # list to store all the activations, layer by layer
        zs = [] # list to store all the z vectors, layer by layer
        for b, w in zip(self.biases, self.weights):
            z = np.dot(w, activation)+b
            zs.append(z)
            activation = sigmoid(z)
            activations.append(activation)

        # backward pass
        delta = self.cost_derivative(activations[-1], y) * sigmoid_prime(zs[-1])
        nabla_b[-1] = delta
        nabla_w[-1] = np.dot(delta, activations[-2].transpose())
        # Note that the variable l in the loop below is used a little
        # differently to the notation in Chapter 2 of the book.  Here,
```

```
        # l = 1 means the last layer of neurons, l = 2 is the
        # second-last layer, and so on.  It's a renumbering of the
        # scheme in the book, used here to take advantage of the fact
        # that Python can use negative indices in lists.
        for l in xrange(2, self.num_layers):
            z = zs[-l]
            sp = sigmoid_prime(z)
            delta = np.dot(self.weights[-l+1].transpose(), delta) * sp
            nabla_b[-l] = delta
            nabla_w[-l] = np.dot(delta, activations[-l-1].transpose())
        return (nabla_b, nabla_w)

    def evaluate(self, test_data):
        """Return the number of test inputs for which the neural
        network outputs the correct result. Note that the neural
        network's output is assumed to be the index of whichever
        neuron in the final layer has the highest activation."""
        test_results = [(np.argmax(self.feedforward(x)), y) for (x, y) in test_data
    ]
        return sum(int(x == y) for (x, y) in test_results)

    def cost_derivative(self, output_activations, y):
        """Return the vector of partial derivatives \partial C_x /
        \partial a for the output activations."""
        return (output_activations-y)

#### Miscellaneous functions
def sigmoid(z):
    """The sigmoid function."""
    return 1.0/(1.0+np.exp(-z))

def sigmoid_prime(z):
    """Derivative of the sigmoid function."""
    return sigmoid(z)*(1-sigmoid(z))
```

LISTING E.2: Codi original per la xarxa neuronal clàssica

E.2.1.0.2 Codi final per el discriminador

Aquest codi es pot trobar al repositori del treball en l'arxiu `discriminator.py`.

```
"""DISCRIMINATOR"""
import json
from typing import Dict, List

import numpy as np

```

```
from quantumGAN.functions import BCE_derivative, minimax_derivative_fake,
    minimax_derivative_real, sigmoid, sigmoid_prime


def load(filename):
    f = open(filename, "r")
    data = json.load(f)
    f.close()
    # cost = getattr(sys.modules[__name__], data["cost"])
    net = ClassicalDiscriminator_that_works(data["sizes"], data["loss"])
    net.weights = [np.array(w) for w in data["weights"]]
    net.biases = [np.array(b) for b in data["biases"]]
    return net


class ClassicalDiscriminator:

    def __init__(   self,
                    sizes: List[int],
                    type_loss: str) -> None:

        self.num_layers = len(sizes)
        self.sizes = sizes
        self.type_loss = type_loss
        self.data_loss = {"real": [], "fake": []}
        self.ret: Dict[str, any] = {"loss": [],
            "label real": [],
            "label fake": [],
            "label fake time": [],
            "label real time": []}
        self.biases = [np.random.randn(y, ) for y in sizes[1:]]
        self.weights = [np.random.randn(y, x) for x, y in zip(sizes[:-1], sizes
    [1:])]

    def feedforward(self, a):
        """Return the output of the network if ``a`` is input."""
        for b, w in zip(self.biases, self.weights):
        a = sigmoid(np.dot(w, a) + b)
        return a

    def predict(self, x):
        # feedforward
        activation = x
        zs = []  # list to store all the z vectors, layer by layer
        for b, w in zip(self.biases, self.weights):
            z = np.dot(w, activation) + b
            zs.append(z)
```

```
            activation = sigmoid(z)
        return activation

    def evaluate(self, test_data):
        test_results = [(np.argmax(self.feedforward(x)), y)
        for (x, y) in test_data]
        return sum(int(x == y) for (x, y) in test_results)


    def forwardprop(self, x: np.ndarray):
        activation = x
        activations = [x]  # list to store all the activations, layer by layer
        zs = []  # list to store all the z vectors, layer by layer
        for b, w in zip(self.biases, self.weights):
            z = np.dot(w, activation) + b
            zs.append(z)
            activation = sigmoid(z)
            activations.append(activation)
        return activation, activations, zs

    def backprop_bce(self, image, label):
        """Return a tuple ``(nabla_b, nabla_w)`` representing the
        gradient for the cost function C_x.  ``nabla_b`` and
        ``nabla_w`` are layer-by-layer lists of numpy arrays, similar
        to ``self.biases`` and ``self.weights``."""
        nabla_b = [np.zeros(b.shape) for b in self.biases]
        nabla_w = [np.zeros(w.shape) for w in self.weights]

        # feedforward and back error calculation depending on type of image
        activation, activations, zs = self.forwardprop(image)
        delta = BCE_derivative(activations[-1], label) * sigmoid_prime(zs[-1])

        # backward pass
        nabla_b[-1] = delta
        nabla_w[-1] = np.dot(delta, activations[-2].reshape(1, activations[-2].
    shape[0]))

        for l in range(2, self.num_layers):
            z = zs[-1]
            delta = np.dot(self.weights[-l + 1].transpose(), delta) * sigmoid_prime
    (z)
            nabla_b[-l] = delta
            nabla_w[-l] = np.dot(delta.reshape(delta.shape[0], 1), activations[-l -
     1].reshape(1, activations[-l - 1].shape[0]))
        return nabla_b, nabla_w, activations[-1]

    def backprop_minimax(self, real_image, fake_image, is_real):
```

```
96          """Return a tuple ``(nabla_b, nabla_w)`` representing the
97          gradient for the cost function C_x.  ``nabla_b`` and
98          ``nabla_w`` are layer-by-layer lists of numpy arrays, similar
99          to ``self.biases`` and ``self.weights``."""
100         nabla_b = [np.zeros(b.shape) for b in self.biases]
101         nabla_w = [np.zeros(w.shape) for w in self.weights]
102
103         # feedforward and back error calculation depending on type of image
104         activation_real, activations_real, zs_real = self.forwardprop(real_image)
105         activation_fake, activations_fake, zs_fake = self.forwardprop(fake_image)
106
107         if is_real:
108             delta = minimax_derivative_real(activations_real[-1]) * sigmoid_prime(
    zs_real[-1])
109             activations, zs = activations_real, zs_real
110         else:
111             delta = minimax_derivative_fake(activations_fake[-1]) * sigmoid_prime(
    zs_fake[-1])
112             activations, zs = activations_fake, zs_fake
113
114         # backward pass
115         nabla_b[-1] = delta
116         nabla_w[-1] = np.dot(delta, activations[-2].reshape(1, activations[-2].
    shape[0]))
117
118         for l in range(2, self.num_layers):
119             z = zs[-l]
120             delta = np.dot(self.weights[-l + 1].transpose(), delta) * sigmoid_prime
    (z)
121             nabla_b[-l] = delta
122             nabla_w[-l] = np.dot(delta.reshape(delta.shape[0], 1),
123             activations[-l - 1].reshape(1, activations[-l - 1].shape[0]))
124         return nabla_b, nabla_w, activations[-1]
125
126     def train_mini_batch(self, mini_batch, learning_rate):
127         global label_real, label_fake
128         nabla_b = [np.zeros(b.shape) for b in self.biases]
129         nabla_w = [np.zeros(w.shape) for w in self.weights]
130
131         if self.type_loss == "binary cross entropy":
132             for real_image, fake_image in mini_batch:
133                 delta_nabla_b, delta_nabla_w, label_real = self.backprop_bce(
    real_image, np.array([1.]))
134                 nabla_b = [nb + dnb for nb, dnb in zip(nabla_b, delta_nabla_b)]
135                 nabla_w = [nw + dnw for nw, dnw in zip(nabla_w, delta_nabla_w)]
136
```

```
                delta_nabla_b, delta_nabla_w, label_fake = self.backprop_bce(
    fake_image, np.array([0.]))
                nabla_b = [nb + dnb for nb, dnb in zip(nabla_b, delta_nabla_b)]
                nabla_w = [nw + dnw for nw, dnw in zip(nabla_w, delta_nabla_w)]

            elif self.type_loss == "minimax":
                for real_image, fake_image in mini_batch:
                    delta_nabla_b, delta_nabla_w, label_real = self.backprop_minimax(
    real_image, fake_image, True)
                    nabla_b = [nb + dnb for nb, dnb in zip(nabla_b, delta_nabla_b)]
                    nabla_w = [nw + dnw for nw, dnw in zip(nabla_w, delta_nabla_w)]

                    delta_nabla_b, delta_nabla_w, label_fake = self.backprop_minimax(
    real_image, fake_image, False)
                    nabla_b = [nb + dnb for nb, dnb in zip(nabla_b, delta_nabla_b)]
                    nabla_w = [nw + dnw for nw, dnw in zip(nabla_w, delta_nabla_w)]
                else:
                    raise Exception("type of loss function not valid")

                # gradient descent
                # nabla_w and nabla_b are multiplied by the learning rate
                # and taken the mean of (dividing by the mini batch size)
                self.weights = [w - (learning_rate / len(mini_batch)) * nw
                                for w, nw in zip(self.weights, nabla_w)]
                self.biases = [b - (learning_rate / len(mini_batch)) * nb
                               for b, nb in zip(self.biases, nabla_b)]
```

LISTING E.3: Codi final pel discriminador

E.2.1.0.3 Codi per el generador

Aquest codi es pot trobar al repositori del treball en l'arxiu `generador.py`.

```
"""QUANTUM GENERATOR"""

from typing import Any, Dict, Optional, cast

import numpy as np
import qiskit
from qiskit import ClassicalRegister, QuantumRegister
from qiskit.circuit import QuantumCircuit
from qiskit.circuit.library import TwoLocal
from qiskit.providers.aer import AerSimulator

from quantumGAN.functions import create_entangler_map, create_real_keys,
    minimax_generator

```

```
14
15 class QuantumGenerator:
16
17     def __init__(
18             self,
19             shots: int,
20             num_qubits: int,
21             num_qubits_ancilla: int,
22             generator_circuit: Optional[QuantumCircuit] = None,
23             snapshot_dir: Optional[str] = None
24     ) -> None:
25
26         super().__init__()
27         # passar els arguments de la classe a metodes en de classes
28         # d'aquesta manera son accessibles per qualsevol funcio dintre de la classe
29         self.num_qubits_total = num_qubits
30         self.num_qubits_ancilla = num_qubits_ancilla
31         self.generator_circuit = generator_circuit
32         self.snapshot_dir = snapshot_dir
33         self.shots = shots
34         self.discriminator = None
35         self.ret: Dict[str, Any] = {"loss": []}
36         self.simulator = AerSimulator()
37
38     def init_parameters(self):
39         """Inicia els parametres inicial i crea el circuit al qual se li posen els
    parametres"""
40         # iniciacia dels parametres inicials i dels circuits al qual posar aquests
    parametres
41         self.generator_circuit = self.construct_circuit(latent_space_noise=None,
    to_measure=False)
42         # s'ha de crear primer el circuit perque d'aquesta manera es pot saber el
    nombre de parametres que es necessiten
43         self.parameter_values = np.random.normal(np.pi / 2, .1, self.
    generator_circuit.num_parameters)
44
45     def construct_circuit(self,
46                           latent_space_noise,
47                           to_measure: bool):
48         """Crea el circuit quantic des de zero a partir de diversos registres de
    qubits"""
49         if self.num_qubits_ancilla is 0:
50             qr = QuantumRegister(self.num_qubits_total, 'q')
51             cr = ClassicalRegister(self.num_qubits_total, 'c')
52             qc = QuantumCircuit(qr, cr)
53         else:
```

```
54            qr = QuantumRegister(self.num_qubits_total - self.num_qubits_ancilla, '
    q')
55            anc = QuantumRegister(self.num_qubits_ancilla, 'ancilla')
56            cr = ClassicalRegister(self.num_qubits_total - self.num_qubits_ancilla,
     'c')
57            qc = QuantumCircuit(anc, qr, cr)
58
59        # creacia de la part del circuit que conte la implantacio dels parametres d
    'input. En cas que no es donin aquests parametres es creen automaticament
60        if latent_space_noise is None:
61            randoms = np.random.normal(-np.pi * .01, np.pi * .01, self.
    num_qubits_total)
62            init_dist = qiskit.QuantumCircuit(self.num_qubits_total)
63
64            # es col.loca una porta RY en cada qubits i amb un parametre diferent
    cadascuna
65            for index in range(self.num_qubits_total):
66                init_dist.ry(randoms[index], index)
67        else:
68            init_dist = qiskit.QuantumCircuit(self.num_qubits_total)
69
70            for index in range(self.num_qubits_total):
71                init_dist.ry(latent_space_noise[index], index)
72
73        # la funcio create_entagler_map crea les parelles de qubits a les qual col.
    locar les portes CZ
74        # en funcio del nombre de qubits
75        if self.num_qubits_ancilla is 0:
76            entangler_map = create_entangler_map(self.num_qubits_total)
77        else:
78            entangler_map = create_entangler_map(self.num_qubits_total - self.
    num_qubits_ancilla)
79
80        # creacio final dels circuits a partir una funcio integrada a Qiskit que va
     repetint les operacions
81        # que se li especifiquen
82        ansatz = TwoLocal(int(self.num_qubits_total), 'ry', 'cz', entanglement=
    entangler_map, reps=1, insert_barriers=True)
83
84        # aqui s'ajunten el circuit que funciona com a input amb el circuit que
    consisteix en la repeticio
85        # de les portes RY i CZ
86        qc = qc.compose(init_dist, front=True)
87        qc = qc.compose(ansatz, front=False)
88
89        if to_measure:
90            qc.measure(qr, cr)
```

```
91
92          return qc
93
94      def set_discriminator(self, discriminator) -> None:
95          self.discriminator = discriminator
96
97      def get_output(
98                      self,
99                      latent_space_noise,
100                     parameters: Optional[np.ndarray] = None
101                     ):
102         """Retorna un output del generador quan se li dona un estat d'input i
    opcionalment uns parametres en especific. Els pixels estan compostos per la
    probabilitat que un qubit resulti en ket_0 en cada base. Per tant, els pixels
    de l'imatge estan normalitzats amb la norma 1-1."""
103         real_keys_set, real_keys_list = create_real_keys(self.num_qubits_total -
    self.num_qubits_ancilla)
104
105         # en cas de que no es donin parametres com a input, es treuen els
    parametres de la variable
106         # self.parameter_values. Es a dir els parametres que es creen
    automaticament al principi i que es van
107         # actualitzant al mateix temps que el model s'optimitza
108         if parameters is None:
109             parameters = cast(np.ndarray, self.parameter_values)
110
111         qc = self.construct_circuit(latent_space_noise, True)
112
113         parameter_binds = {parameter_id: parameter_value for parameter_id,
    parameter_value in zip(qc.parameters, parameters)}
114
115         # el metode bind_parametres del circuit quantic
116         qc = qc.bind_parameters(parameter_binds)
117
118         # Simulacio dels circuits mitjancant el simulador Aer de Qiskit. El nivell
    d'optimitzacio es zero, perque al ser circuits petits i que simulen una vegada,
     no es necessari. Al optimitzar el proces acaba sent mes lent.
119         result_ideal = qiskit.execute(experiments=qc,
120                                       backend=self.simulator,
121                                       shots=self.shots,
122                                       optimization_level=0).result()
123         counts = result_ideal.get_counts()
124
125         try:
126             # creacio de l'imatge resultant
127             pixels = np.array([counts[index] for index in list(real_keys_list)])
128
```

```
129         except KeyError:
130             # aquesta excepcio sorgeix quan en el diccionari dels resultats no
    estan totes les keys pel fet que qiskit, en cas de que no hi hagi un mesurament
     en una base, no inclou aquesta base en el diccionari
131             keys = counts.keys()
132             missing_keys = real_keys_set.difference(keys)
133             # s'utilitza un la resta entre dos sets per poder veure quina es la key
     que falta en el diccionari
134             for key_missing in missing_keys:
135                 counts[key_missing] = 0
136 
137             # una vegada es troba les keys que faltaven es crea l'imatge resultant
138             pixels = np.array([counts[index] for index in list(real_keys_list)])
139 
140         pixels = pixels / self.shots
141         return pixels
142 
143     def get_output_pixels(
144                           self,
145                           latent_space_noise,
146                           params: Optional[np.ndarray] = None
147                           ):
148         """Retorna un output del generador quan se li dona un estat d'input i
    opcionalment uns parametres en especific. Cada pixel es la probabilitat de que
    un qubits resulti en l'estat ket_0, per tant, els valors cada pixel (que son
    independents entre si) es troba en l'interval (0, 1) """
149         qc = QuantumCircuit(self.num_qubits_total)
150 
151         init_dist = qiskit.QuantumCircuit(self.num_qubits_total)
152         assert latent_space_noise.shape[0] == self.num_qubits_total
153 
154         for num_qubit in range(self.num_qubits_total):
155             init_dist.ry(latent_space_noise[num_qubit], num_qubit)
156 
157         if params is None:
158             params = cast(np.ndarray, self.parameter_values)
159 
160         qc.assign_parameters(params)
161 
162         # comptes de simular els valors que donara cada qubits, es simula l'estat
    final del circuit i d'aquest s'extreuen els valors que es mesuraran per a cada
    qubit
163         state_vector = qiskit.quantum_info.Statevector.from_instruction(qc)
164         pixels = []
165         for qubit in range(self.num_qubits_total):
166             # per treure la probabilitat s'utilitza una funcio implementada en
    Qiskit
```

```
            pixels.append(state_vector.probabilities([qubit])[0])

        # creacio de l'imatge resultada a partir de la llista que conte el valor per a cada pixel
        generated_samples = np.array(pixels)
        generated_samples.flatten()

        return generated_samples

    def train_mini_batch(self, mini_batch, learning_rate):
        """Optimitzacio del generador per una batch d'imatges. Retorna una batch de les imatges generades amb unes imatges reals que poder donar com a input al generador. """
        nabla_theta = np.zero_like(self.parameter_values.shape)
        new_images = []

        for _, noise in mini_batch:
            for index, _ in enumerate(self.parameter_values):
                perturbation_vector = np.zeros_like(self.parameter_values)
                perturbation_vector[index] = 1

                # Creacio dels parametres per generar les dues imatges
                pos_params = self.parameter_values + (np.pi / 4) * perturbation_vector
                neg_params = self.parameter_values - (np.pi / 4) * perturbation_vector

                pos_result = self.get_output(noise, parameters=pos_params)  # Generacio imatges
                neg_result = self.get_output(noise, parameters=neg_params)

                pos_result = self.discriminator.predict(pos_result)  # Assignacio de les etiquetes
                neg_result = self.discriminator.predict(neg_result)

                # Diferencia entre les avaluacions de la funcio de perdua entre les dues etiquetes
                gradient = minimax_generator(pos_result) - minimax_generator(neg_result)
                nabla_theta[index] += gradient  # Afegir derivada d'un parametre al gradient
            new_images.append(self.get_output(noise))

        for index, _ in enumerate(self.parameter_values):
            # Actualitzacio dels parametres a traves del gradient
            self.parameter_values[index] += (learning_rate / len(mini_batch)) * nabla_theta[index]
```

```
203
204         # Creacio de la batch d'imatges a retornar
205         mini_batch = [(datapoint[0], fake_image) for datapoint, fake_image in zip(
    mini_batch, new_images)]
206         return mini_batch
```

LISTING E.4: Codi final pel generador

E.2.1.0.4 Definició del model

Aquest codi es pot trobar al repositori del treball en l'arxiu `qgan.py`.

```
1  import glob
2  import os
3  import json
4  import random
5  from datetime import datetime
6  from typing import List
7
8  import imageio
9  import matplotlib.pyplot as plt
10 import numpy as np
11
12 from quantumGAN.discriminator import ClassicalDiscriminator
13 from quantumGAN.functions import fechet_distance, minimax, images_to_distribution,
       images_to_scatter
14 from quantumGAN.quantum_generator import QuantumGenerator
15
16
17 class Quantum_GAN:
18
19     def __init__(self,
20                  generator: QuantumGenerator,
21                  discriminator: ClassicalDiscriminator
22                  ):
23
24         self.last_batch = None
25         now = datetime.now()
26         init_time = now.strftime("%d_%m_%Y__%H_%M_%S")
27         self.path = "data/run{}".format(init_time)
28         self.path_images = self.path + "/images"
29         self.filename = "run.txt"
30
31         if not os.path.exists(self.path):
32             os.makedirs(self.path)
33
34         if not os.path.exists(self.path_images):
```

```
            os.makedirs(self.path_images)

        with open(os.path.join(self.path, self.filename), "w") as file:
            file.write("RUN {} \n".format(init_time))
            file.close()

        self.generator = generator
        self.discriminator = discriminator
        self.loss_series, self.label_real_series, self.label_fake_series, self.
    FD_score = [], [], [], []

        self.generator.init_parameters()
        self.example_g_circuit = self.generator.construct_circuit(
    latent_space_noise=None,
                                           to_measure=False)
        self.generator.set_discriminator(self.discriminator)

    def __repr__(self):
        return "Discriminator Architecture: {} \n Generator Example Circuit: \n{}"
    \
        .format(self.discriminator.sizes, self.example_g_circuit)

    def store_info(self, epoch, loss, real_label, fake_label):
        file = open(os.path.join(self.path, self.filename), "a")
        file.write("{} epoch LOSS {} Parameters {} REAL {} FAKE {} \n"
        .format(epoch,
                loss,
                self.generator.parameter_values,
                real_label,
                fake_label))
        file.close()

    def plot(self):
        # save data for plotting
        fake_images, real_images = [], []
        for image_batch in self.last_batch:
            fake_images.append(image_batch[1])
            real_images.append(image_batch[0])

        keys, average_result = images_to_distribution(fake_images)
        print(average_result)
        if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
            plt.title(f"Distribucio d'una imatge generada \n(ancilla, epoch={self.
    num_epochs})")
        else:
            plt.title(f"Distribucio d'una imatge generada \n(epoch={self.num_epochs
    })")
```

```
77          plt.ylim(0., 1.)
78          plt.bar(keys, average_result)
79          plt.savefig(self.path + "/fake_distribution.png")
80          plt.clf()
81
82          keys_real, average_result_real = images_to_distribution(real_images)
83          print(average_result_real)
84          if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
85              plt.title(f"Distribucio d'una imatge real \n(ancilla, epoch={self.
    num_epochs})")
86          else:
87              plt.title(f"Distribucio d'una imatge real \n(epoch={self.num_epochs})")
88          plt.ylim(0., 1.)
89          plt.bar(keys_real, average_result_real)
90          plt.savefig(self.path + "/real_distribution.png")
91          plt.clf()
92
93          y_axis, x_axis = images_to_scatter(fake_images)
94          y_axis_real, x_axis_real = images_to_scatter(real_images)
95          if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
96              plt.title(f"Comparacio entre les imatges reals con les imatges falses \
    n(ancilla, epoch={self.num_epochs})")
97          else:
98              plt.title(f"Comparacio entre les imatges reals con les imatges falses \
    n(epoch={self.num_epochs})")
99          plt.ylim(0. - .1, 1. + .1)
100         plt.scatter(y_axis, x_axis, label='Valors per les imatges falses',
101                     color='indigo',
102                     linewidth=.1,
103                     alpha=.2)
104         plt.scatter(y_axis_real, x_axis_real, label='Valors per les imatges reals',
105                     color='limegreen',
106                     linewidth=.1,
107                     alpha=.2)
108         plt.savefig(self.path + "/scatter_plot.png")
109         plt.clf()
110
111         t_steps = np.arange(self.num_epochs)
112         plt.figure(figsize=(6, 5))
113         if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
114             plt.title(f"Progres de la funcio de perdua \n(ancilla, epoch={self.
    num_epochs})")
115         else:
116             plt.title(f"Progres de la funcio de perdua \n(epoch={self.num_epochs})"
    )
117         plt.plot(t_steps, self.loss_series, label='Funcio de perdua del
    discriminador', color='rebeccapurple', linewidth=2)
```

```
        plt.grid()
        plt.legend(loc='best')
        plt.xlabel('Iteracions')
        plt.ylabel('Funcio de perdua')
        plt.savefig(self.path + "/loss_plot.png")
        plt.clf()

        t_steps = np.arange(self.num_epochs)
        plt.figure(figsize=(6, 5))
        if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
            plt.title(f"Progres de les etiquetes \n(ancilla, epoch={self.num_epochs})")
        else:
            plt.title(f"Progres de les etiquetes \n(epoch={self.num_epochs})")
        plt.scatter(t_steps, self.label_real_series, label='Etiquetes per les imatges reals',
                    color='mediumvioletred',
                    linewidth=.1)
        plt.scatter(t_steps, self.label_fake_series, label='Etiquetes per les imatges generades',
                    color='rebeccapurple',
                    linewidth=.1)
        plt.grid()
        plt.ylim(0. - .1, 1. + .1)
        plt.legend(loc='best')
        plt.xlabel('Iteracions')
        plt.ylabel('Valor de les etiquetes')
        plt.savefig(self.path + "/labels_plot.png")
        plt.clf()

        plt.figure(figsize=(6, 5))
        if self.generator.num_qubits_ancilla != 0:
            plt.title(f"Puntuacio de a partir de la distancia de Frechet \n(ancilla, epoch={self.num_epochs})")
        else:
            plt.title(f"Puntuacio de a partir de la distancia de Frechet \n(epoch={self.num_epochs})")
        plt.plot(t_steps, self.FD_score, label='Valor de la puntuacio de Frechet', color='rebeccapurple', linewidth=2)
        plt.grid()
        plt.legend(loc='best')
        plt.ylim(0., .28)
        plt.xlabel('Iteracions')
        plt.ylabel('Valor de la puntuacio')
        plt.savefig(self.path + "/FD_score.png")
        plt.clf()

```

```
    def train(self,
              num_epochs: int,
              training_data: List,
              batch_size: int,
              generator_learning_rate: float,
              discriminator_learning_rate: float,
              is_save_images: bool):

        self.num_epochs = num_epochs
        self.training_data = training_data
        self.batch_size = batch_size
        self.batch_size = batch_size
        self.generator_lr = generator_learning_rate
        self.discriminator_lr = discriminator_learning_rate
        self.is_save_images = is_save_images

        noise = self.training_data[0][1]
        time_init = datetime.now()
        for o in range(self.num_epochs):
            mini_batches = create_mini_batches(self.training_data, self.batch_size)
            output_fake = self.generator.get_output(latent_space_noise=mini_batches
[0][0][1], parameters=None)

            for mini_batch in mini_batches:
                self.last_batch = self.generator.train_mini_batch(mini_batch, self.
generator_lr)
                self.discriminator.train_mini_batch(self.last_batch, self.
discriminator_lr)

            output_real = mini_batches[0][0][0]
            if is_save_images:
                self.save_images(self.generator.get_output(latent_space_noise=noise
, parameters=None), o)

            self.FD_score.append(fechet_distance(output_real, output_fake))
            label_real, label_fake = self.discriminator.predict(output_real), self.
discriminator.predict(output_fake)
            loss_final = 1 / 2 * (minimax(label_real, label_fake) + minimax(
label_real, label_fake))

            self.loss_series.append(loss_final)
            self.label_real_series.append(label_real)
            self.label_fake_series.append(label_fake)

            print("Epoch {}: Loss: {}".format(o, loss_final), output_real,
output_fake)
            print(label_real[-1], label_fake[-1])
```

```
            self.store_info(o, loss_final, label_real, label_fake)

        time_now = datetime.now()
        print((time_now - time_init).total_seconds(), "seconds")

    def save_images(self, image, epoch):
        image_shape = int(image.shape[0] / 2)
        image = image.reshape(image_shape, image_shape)

        plt.imshow(image, cmap='gray', vmax=1., vmin=0.)
        plt.axis('off')
        plt.savefig(self.path_images + '/image_at_epoch_{:04d}.png'.format(epoch))
        plt.clf()

    def create_gif(self):
        anim_file = self.path + '/dcgan.gif'

        with imageio.get_writer(anim_file, mode='I') as writer:
            filenames = glob.glob(self.path_images + '/image*.png')
            filenames = sorted(filenames)

            for filename in filenames:
                image = imageio.imread(filename)
                writer.append_data(image)

            image = imageio.imread(filename)
            writer.append_data(image)

    def save(self):
        """Save the neural network to the file ``filename``."""
        data = {"batch_size": self.batch_size,
                "D_sizes": self.discriminator.sizes,
                "D_weights": [w.tolist() for w in self.discriminator.weights],
                "D_biases": [b.tolist() for b in self.discriminator.biases],
                "D_loss": self.discriminator.type_loss,
                "Q_parameters": [theta for theta in self.generator.parameter_values
    ],
                "Q_shots": self.generator.shots,
                "Q_num_qubits": self.generator.num_qubits_total,
                "Q_num_qubits_ancilla": self.generator.num_qubits_ancilla,
                "real_labels": self.label_real_series,
                "fake_labels": self.label_fake_series,
                "loss_series": self.loss_series
                }
        f = open(os.path.join(self.path, "data.txt"), "a")
        json.dump(data, f)
        f.close()
```

```
245
246
247     def create_mini_batches(training_data, mini_batch_size):
248         n = len(training_data)
249         random.shuffle(training_data)
250         mini_batches = [
251             training_data[k:k + mini_batch_size]
252             for k in range(0, n, mini_batch_size)]
253         return [mini_batches[0]]
254
255
256     def load_gan(filename):
257         f = open(filename, "r")
258         data = json.load(f)
259         f.close()
260         discriminator = ClassicalDiscriminator(data["D_sizes"], data["D_loss"])
261
262         generator = QuantumGenerator(num_qubits=data["Q_num_qubits"],
263                                      generator_circuit=None,
264                                      num_qubits_ancilla=data["Q_num_qubits_ancilla"
    ],
265                                      shots=data["Q_shots"])
266
267         quantum_gan = Quantum_GAN(generator, discriminator)
268
269         quantum_gan.discriminator.weights = [np.array(w) for w in data["D_weights"
    ]]
270         quantum_gan.discriminator.biases = [np.array(b) for b in data["D_biases"]]
271         quantum_gan.generator.parameter_values = np.array(data["Q_parameters"])
272
273         1return quantum_gan, data["batch_size"]
274
275
```

LISTING E.5: Codi per la definició del model

E.2.1.0.5 Execució del model

Aquest codi es pot trobar al repositori del treball en l'arxiu `main.py`.

```
1 import numpy as np
2
3 from quantumGAN.discriminator import ClassicalDiscriminator
4 from quantumGAN.qgan import Quantum_GAN
5 from quantumGAN.quantum_generator import QuantumGenerator
6
7 num_qubits: int = 3
```

```
8
9  # Set number of training epochs
10 num_epochs = 150
11 # Batch size
12 batch_size = 10
13
14 train_data = []
15 for _ in range(800):
16     x2 = np.random.uniform(.55, .46, (2,))
17     fake_datapoint = np.random.uniform(-np.pi * .01, np.pi * .01, (num_qubits,))
18     real_datapoint = np.array([x2[0], 0, x2[0], 0])
19     train_data.append((real_datapoint, fake_datapoint))
20
21 discriminator = ClassicalDiscriminator(sizes=[4, 16, 8, 1],
22                                         type_loss="minimax")
23 generator = QuantumGenerator(num_qubits=num_qubits,
24                              generator_circuit=None,
25                              num_qubits_ancilla=1,
26                              shots=4096)
27
28 quantum_gan = Quantum_GAN(generator, discriminator)
29 print(quantum_gan)
30 print(num_epochs)
31 quantum_gan.generator.get_output(fake_datapoint[0], None)
32 quantum_gan.train(num_epochs, train_data, batch_size, .1, .1, True)
33
34 quantum_gan.plot()
35 quantum_gan.create_gif()
36 quantum_gan.save()
```

LISTING E.6: Codi final pel generador

E.2.1.0.6 Funcions extres Hi han funcions en el codi que utilitzo en diversos arxius, aquestes les defineixo en l'arxiu `functions.py`, que es pot trobar al repositori del treball. En aquest arxiu també hi ha una funció que dona a terme una traça parcial a una matriu donada, malgrat que no la he arribat a utilitzar.

```
1 import itertools
2 import math
3
4 import numpy as np
5 from matplotlib import pyplot as plt
6
7
8 # DATA PROCESSING
```

```
from scipy import linalg


def save_images_color(image, epoch):
    plt.imshow(image.reshape(int(image.shape[0] / 3), 1, 3))
    plt.axis('off')
    plt.savefig('images/image_at_epoch_{:04d}.png'.format(epoch))


def create_real_keys(num_qubits):
    lst = [[str(a) for a in i] for i in itertools.product([0, 1], repeat=num_qubits
    )]
    new_lst = []
    for element in lst:
        word = str()
        for number in element:
            word = word + number
            new_lst.append(word)
    return set(new_lst), new_lst


def create_entangler_map(num_qubits: int):
    lst = [list(i) for i in itertools.combinations(range(num_qubits), 2)]
    index = 0
    entangler_map = []
    for i in reversed(range(num_qubits)):
        try:
            entangler_map.append(lst[index])
            index += i
        except IndexError:
            return entangler_map


def images_to_distribution(batch_image):
    num_images = len(batch_image)
    sum_result = 0
    for image in batch_image:
        sum_result += image
    average_result = sum_result / num_images
    keys = create_real_keys(int(math.sqrt(batch_image[0].shape[0])))[1]
    return keys, average_result


def images_to_scatter(batch_image):
    keys = create_real_keys(int(math.sqrt(batch_image[0].shape[0])))[1]
    x_axis = []
    y_axis = []
```

```
55
56      for image in batch_image:
57          pixel_count = 0
58          for pixel in image:
59              x_axis.append(pixel)
60              y_axis.append(keys[pixel_count])
61              pixel_count += 1
62
63      return y_axis, x_axis
64
65  def fechet_distance(image1: np.array,
66                      image2: np.array):
67      assert image1.shape == image2.shape
68      y = np.arange(0, image1.flatten().shape[0])
69
70      matrix_a_cov = np.cov(np.stack((y, image1.flatten()), axis=0))
71      matrix_b_cov = np.cov(np.stack((y, image2.flatten()), axis=0))
72
73      to_trace = matrix_a_cov + matrix_b_cov - 2*(linalg.fractional_matrix_power(np.
        dot(matrix_a_cov, matrix_b_cov), .5))
74      return np.abs(image1.mean() - image2.mean())**2 + np.trace(to_trace)
75
76
77  # ACTIVATION FUNCTIONS
78
79  def sigmoid(z):
80      """The sigmoid function."""
81      return 1.0 / (1.0 + np.exp(-z))
82
83
84  def sigmoid_prime(z):
85      """Derivative of the sigmoid function."""
86      return sigmoid(z) * (1 - sigmoid(z))
87
88
89  def relu(z):
90      return np.maximum(0, z)
91
92
93  def relu_prime(z):
94      z[z <= 0] = 0
95      z[z > 0] = 1
96      return z
97
98
99  # LOSSES
100 def MSE_derivative(prediction, y):
```

```
    return 2 * (y - prediction)


def MSE(prediction, y):
    return (y - prediction) ** 2


def BCE_derivative(prediction, target):
    # return prediction - target
    return -target / prediction + (1 - target) / (1 - prediction)


def BCE(predictions: np.ndarray, targets: np.ndarray) -> np.ndarray:
    return targets * np.log(predictions) + (1 - targets) * np.log(1 - predictions).
    mean()


def minimax_derivative_real(real_prediction):
    real_prediction = np.array(real_prediction)
    return np.nan_to_num((-1) * (1 / real_prediction))


def minimax_derivative_fake(fake_prediction):
    fake_prediction = np.array(fake_prediction)
    return np.nan_to_num(1 / (1 - fake_prediction))


def minimax(real_prediction, fake_prediction):
    return np.nan_to_num(np.log(real_prediction) + np.log(1 - fake_prediction))


def minimax_generator(prediction_fake):
    return (-1) * np.log(1 - prediction_fake)


# QUANTUM FUNCTIONS

class Partial_Trace:
    def __init__(self, state: np.array, qubits_out: int, side: str):

        self.state = state
        self.qubits_out = qubits_out
        self.side = side

        if self.state.ndim == 1:
            self.state = np.outer(self.state, self.state)

```

```
        self.total_dim = self.state.shape[0]

        self.num_qubits = int(np.log2(self.total_dim))
        self.a_dim = 2 ** (self.num_qubits - self.qubits_out)
        self.b_dim = 2 ** self.qubits_out

        # if self.side == "bot":
        self.basis_b = [_ for _ in np.identity(int(self.b_dim))]
        self.basis_a = [_ for _ in np.identity(int(self.a_dim))]

        # elif self.side == "top":
        #   self.basis_a = [_ for _ in np.identity(int(self.b_dim))]
        #   self.basis_b = [_ for _ in np.identity(int(self.a_dim))]
        #
        # else:
        #   raise NameError("invalid side argument, enter \"bot\" or \"top\"")
        print(self.basis_a, self.basis_b)

    def get_entry(self, index_i, index_j):
        sigma = 0

        if self.side == "bot":
            for k in range(self.qubits_out + 1):
                ab_l = np.kron(self.basis_a[index_i],
                               self.basis_b[k])
                ab_r = np.kron(self.basis_a[index_j],
                               self.basis_b[k])

                print(ab_r, ab_l)

                right_side = np.dot(self.state, ab_r)
                sigma += np.inner(ab_l, right_side)

        if self.side == "top":
            for k in range(self.qubits_out + 1):
                ba_l = np.kron(self.basis_b[index_i],
                               self.basis_a[k])
                ba_r = np.kron(self.basis_b[index_j],
                               self.basis_a[k])

                print(ba_r, ba_l)

                right_side = np.dot(self.state, ba_r)
                sigma += np.inner(ba_l, right_side)

        return sigma

```

```
194     def compute_matrix(self):
195         a = [_ for _ in range(self.a_dim)]
196         b = [__ for __ in range(self.a_dim)]
197 
198         entries_pre = [(x, y) for x in a for y in b]
199         entries = []
200 
201         for i_index, j_index in entries_pre:
202             entries.append(self.get_entry(i_index, j_index))
203 
204         entries = np.array(entries)
205         return entries.reshape(self.a_dim, self.a_dim)
```

LISTING E.7: Funcions varies

E.2.2 Capítol 7

E.2.2.0.1 Multiprocessament Per poder ser més eficient a l'hora d'executar els models, vaig decidir utilitzar una característica molt útil de Python, el *multiprocessing*. Usualment, una instància de Python, és a dir; un arxiu executant-se, només es fa servir un nucli del processador a la vegada, però amb *multiprocessing* pots emprar múltiples nuclis amb un mateix arxiu, d'aquesta manera executant diverses línies de codi al mateix temps. Per poder executar diversos models a la mateixa vegada i d'una forma simple, vaig fer servir aquest mòdul de Python per executar els models dels quals he agafat les dades que he presentat en aquest treball. Aquest codi es pot trobar al repositori del treball en l'arxiu `test_multi.py`.

```
1   import multiprocessing
2   import time
3   import numpy as np
4 
5   from quantumGAN.discriminator import ClassicalDiscriminator
6   from quantumGAN.qgan import Quantum_GAN
7   from quantumGAN.quantum_generator import QuantumGenerator
8 
9   batch_size = 10
10 
11  train_data = []
12  # generacio de les dades
13  for _ in range(800):
14      x2 = np.random.uniform(.55, .46, (2,))
```

```
        fake_datapoint = np.random.uniform(-np.pi * .01, np.pi * .01, (4,))
        real_datapoint = np.array([x2[0], 0, x2[0], 0])
        train_data.append((real_datapoint, fake_datapoint))
    list_epochs = [550, 550, 550]

    example_generator_ancilla = QuantumGenerator(num_qubits=4,
                                                 generator_circuit=None,
                                                 num_qubits_ancilla=2,
                                                 shots=4096)
    example_generator = QuantumGenerator(num_qubits=2,
                                         generator_circuit=None,
                                         num_qubits_ancilla=0,
                                         shots=4096)

    # generem els parametres inicials d'acord amb el circuit amb un mayor nombre de
     parametres
    circuit_ancilla = example_generator_ancilla.construct_circuit(None, False)
    circuit_not_ancilla = example_generator_ancilla.construct_circuit(None, False)

    init_parameters_ancilla = np.random.normal(np.pi / 2, .1, circuit_ancilla.
    num_parameters)

    # canviem les dimensions dels parametres perque coincideixin amb les dimensions
     necessaries pel circuit
    # sense qubits ancilla
    not_ancilla_list = init_parameters_ancilla.tolist()[
    circuit_ancilla.num_parameters - circuit_not_ancilla.num_parameters:]
    init_parameters_not_ancilla = np.array(not_ancilla_list)

    example_discriminator = discriminator_ancilla = \
        ClassicalDiscriminator(sizes=[4, 16, 8, 1], type_loss="minimax")

    init_biases_discriminator, init_weights_discriminator = example_discriminator.
    init_parameters()


    def to_train(num_epochs):
        # definicio d'un discriminador pel model amb la funcio no-lineal i una
    altre pel model que no la te
        discriminator_ancilla = \
            ClassicalDiscriminator(sizes=[4, 16, 8, 1], type_loss="minimax")
        discriminator_not_ancilla = \
            ClassicalDiscriminator(sizes=[4, 16, 8, 1], type_loss="minimax")

        # es defineix un generador que te la funcio no-lineal integrada en el
    circuit
        generator_ancilla = \
```

```
            QuantumGenerator(num_qubits=4,
                             generator_circuit=None,
                             num_qubits_ancilla=2,  # IMPORTANT
                             shots=4096)
        # i un altre generador que no te la funcio no-lineal
        generator_not_ancilla = \
            QuantumGenerator(num_qubits=2,
                             generator_circuit=None,
                             num_qubits_ancilla=0,  # IMPORTANT
                             shots=4096)

        quantum_gan_ancilla = \
            Quantum_GAN(generator_ancilla, discriminator_ancilla)
        time.sleep(1)
        quantum_gan_not_ancilla = \
            Quantum_GAN(generator_not_ancilla, discriminator_not_ancilla)
        print(quantum_gan_not_ancilla.path)
        print(quantum_gan_ancilla.path)

        # abans de comencar a entrenar el model s'ha de canviar els parametres als definits anteriorment
        quantum_gan_ancilla.generator.parameter_values = init_parameters_ancilla
        quantum_gan_ancilla.discriminator.weights = init_weights_discriminator
        quantum_gan_ancilla.discriminator.biases = init_biases_discriminator
        quantum_gan_ancilla.train(num_epochs, train_data, batch_size, .1, .1, False)

        quantum_gan_not_ancilla.generator.parameter_values = init_parameters_not_ancilla
        quantum_gan_not_ancilla.discriminator.weights = init_weights_discriminator
        quantum_gan_not_ancilla.discriminator.biases = init_biases_discriminator
        quantum_gan_not_ancilla.train(num_epochs, train_data, batch_size, .1, .1, False)

        # una vegada ha acabat l'optimitzacio es creen els grafics per compara l'eficiencia del models
        quantum_gan_not_ancilla.plot()
    quantum_gan_ancilla.plot()


    def main():
        # Crear una queue para compartir les dades entre els processos
        # Crear i iniciar el proces de simulacio
        jobs = []
        for epoch in list_epochs:
            simulate = multiprocessing.Process(None, to_train, args=(epoch,))
            jobs.append(simulate)
```

```
98              time.sleep(2)
99              simulate.start()
100
101
102     if __name__ == '__main__':
103         main()
```

LISTING E.8: Executar els models amb multiprocessing

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: Enllaç].

[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: Enllaç].

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

[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: Enllaç].

[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: Enllaç].

[6] Gilbert Strang. Linear Algebra MIT OCW, 2011. [Online; accedit en 19/09/2021: Enllaç].

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

[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 37–38. Springer, 2 edition, 1997.

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

[12] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 65–68. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[13] Sheldon Axler. *Linear Algebra Done Right*, chapter 6, pages 102–112. Springer, 2 edition, 1997.

[14] Wolfram MathWorld. L2-Norm, 2021. [Online; accedit en 19/09/2021: Enllaç].

[15] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 1, pages 2–36. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

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

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

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

[19] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 75–76. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

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

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

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

[23] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 1, pages 13–15. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[24] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 1, pages 16–17. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[25] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 1, page 15. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[26] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 4, page 174. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[27] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 95–96. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[28] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 4, pages 178–181. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

[29] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, chapter 2, pages 84–86. Cambrindge University Press, 10 edition, 2010.

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

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

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

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

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

[35] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. http://www.deeplearningbook.org.

[36] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*, chapter 6, pages 168–170. MIT Press, 2016.

[37] Contribuidors de ml-glossary. Loss fuctions. [Online; accedit en 09/01/2022: Enllaç].

[38] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*, chapter 5, pages 130–133. MIT Press, 2016.

[39] Backpropagation calculus | chapter 4, deep learning. [Online; accedit en 09/01/2022: Enllaç].

[40] Diederik P. Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. 2017. [Online; accedit en 26/10/2021: Enllaç].

[41] TensorFlow Developers. TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, 2015. Software disponible a tensorflow.org.

[42] Adam Paszke, Sam Gross, Francisco Massa, Adam Lerer, James Bradbury, Gregory Chanan, Trevor Killeen, Zeming Lin, Natalia Gimelshein, Luca Antiga, Alban Desmaison, Andreas Kopf, Edward Yang, Zachary DeVito, Martin Raison, Alykhan Tejani, Sasank Chilamkurthy, Benoit Steiner, Lu Fang, Junjie Bai, and Soumith Chintala. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In *Advances in Neural Information Processing Systems 32*, pages 8024–8035. Curran Associates, Inc., 2019.

[43] 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: Enllaç].

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

[45] Vojtěch Havlíček, Antonio D. Córcoles, Kristan Temme, Aram W. Harrow, Abhinav Kandala, Jerry M. Chow, and Jay M. Gambetta. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature*, 567(7747):209–212, 2019.

[46] Maria Schuld and Nathan Killoran. Quantum machine learning in feature hilbert spaces. *Physical Review Letters*, 122(4), 2019.

[47] Maria Schuld, Ilya Sinayskiy, and Francesco Petruccione. Prediction by linear regression on a quantum computer. *Physical Review A*, 94(2), 2016.

[48] Aram W. Harrow and John C. Napp. Low-depth gradient measurements can improve convergence in variational hybrid quantum-classical algorithms. *Physical Review Letters*, 126(14), Apr 2021.

[49] Yudong Cao, Gian Giacomo Guerreschi, and Alán Aspuru-Guzik. Quantum neuron: an elementary building block for machine learning on quantum computers. 2017. [Online; accedit en 6/11/2021: Enllaç].

[50] Jonathan Romero and Alan Aspuru-Guzik. Variational quantum generators: Generative adversarial quantum machine learning for continuous distributions. 2019. [Online; accedit en 6/11/2021: Enllaç].

[51] Iris Cong, Soonwon Choi, and Mikhail D. Lukin. Quantum convolutional neural networks. *Nature Physics*, 15(12):1273–1278, Aug 2019.

[52] Saad Albawi, Tareq Abed Mohammed, and Saad Al-Zawi. Understanding of a convolutional neural network. In *2017 International Conference on Engineering and Technology (ICET)*, pages 1–6, 2017.

[53] Christa Zoufal, Aurélien Lucchi, and Stefan Woerner. Quantum generative adversarial networks for learning and loading random distributions. *npj Quantum Information*, 5(103), 2019. [Online; accedit en 01/11/2021: Enllaç].

[54] Cirq Developers. Cirq, August 2021. Veure la llista completa d'autors a Github: https://github .com/quantumlib/Cirq/graphs/contributors.

[55] Qiskit Developers. Qiskit: An open-source framework for quantum computing, 2021.

[56] Stanislau Semeniuta, Aliaksei Severyn, and Sylvain Gelly. On accurate evaluation of gans for language generation. 2019. [Online; accedit en 19/09/2021: Enllaç].

[57] Prafulla Dhariwal, Heewoo Jun, Christine Payne, Jong Wook Kim, Alec Radford, and Ilya Sutskever. Jukebox: A generative model for music, 2020.

[58] Jonathan Romero, Jonathan P Olson, and Alan Aspuru-Guzik. Quantum autoencoders for efficient compression of quantum data. *Quantum Science and Technology*, 2(4):045001, Aug 2017. [Online; accedit en 19/09/2021: Enllaç].

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

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

[61] 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: Enllaç].

[62] Peter W. Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM Journal on Computing*, 26(5):1484–1509, Oct 1997. [Online; accedit en 02/01/2022: Enllaç].

[63] R. L. Rivest, A. Shamir, and L. Adleman. A method for obtaining digital signatures and public-key cryptosystems. *Commun. ACM*, 21(2):120–126, 1978.

[64] Enrique Martín-López, Anthony Laing, Thomas Lawson, Roberto Alvarez, Xiao-Qi Zhou, and Jeremy L. O'Brien. Experimental realization of shor's quantum factoring algorithm using qubit recycling. *Nature Photonics*, 6(11):773–776, 2012. [Online; accedit en 06/01/2022: Enllaç].