Árbol de búsqueda cuántico

Alfredo Villegas

4 de abril de 2023

Algoritmo de árbol de búsqueda cuántico

A continuación se presenta un ejemplo del algoritmo cuántico de arbol de búsqueda que resuelve el juego de 3-puzzle en python. Para ello nos basamos en el trabajo de Andreas Wichert en *Quantum Tree Search with Qiskit* 1

1 Rompecabezas 3-puzzle

El rompecabezas de 3 se compone de tres fichas móviles numeradas en un marco de 2x2. Una celda del marco está vacía, y debido a esto los mosaicos se pueden mover para formar diferentes patrones. El objetivo es encontrar una serie de movimientos de fichas en el espacio en blanco que cambie el tablero de la configuración inicial a la configuración deseada. En el esquema de 2x2 hay 12 configuraciones posibles, para cualquier configuración solo hay dos movimientos posibles, en el sentido horario y antihorario. La abstracción al modelo cuántico del puzzle consta de manejar cada celda como 4 objetos diferentes, tres celdas de número y una celda vacía. Cada objeto se codifica como dos qubits y una configuración de los cuatro objetos se puede representar como el registro de 8 qubits que llamaremos $|x\rangle$.

En esta representación:

- Descriptores de posición son fijos
- Descriptores de clase se mueven

Se deben cumplir dos requisitos:

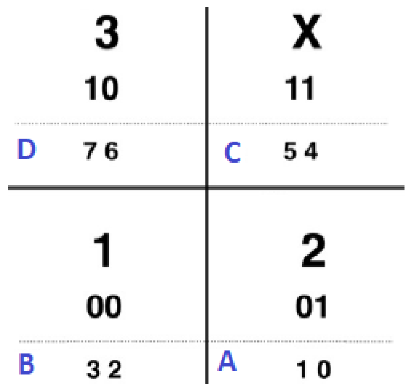
- Para un tablero dado, la configuración y una regla de producción determinan la nueva configuración del tablero.
- Determinar si la configuración es la configuración objetivo.

Existen cuatro posibles posiciones de la celda vacía. La función p (producciones) determina la nueva configuración y la entrada de la función p consiste en la configuración actual y un bit m que indica la dirección del movimiento $m = 0$ sentido horario y $m = 1$ sentido antihorario. Existen 8 posibles mapeos como salida de las producciones porque la celda vacía puede estar en 4 posiciones y puede cambiar a dos posibles movimientos por cada 4 posiciones. Esto se representa como una matriz L que actúa sobre el ket $|m\rangle$ que representa la dirección y el ket $|x\rangle$ de 8 qubits que representa el estado de la tabla. $L|m\rangle|x\rangle = |m\rangle|\gamma\rangle$

La función O definida como *oráculo* determina si la confuguración es nuestra configuración final deseada. Se define como un operador unitario T que actúa también en la configuración de 8 + 1 qubits, esta vez el ket adicional $|c\rangle$ es un qubit auxiliar.

1.1 Definiciones

El objeto 1 está representado por 00, 2 está representado por 01, 3 está representado por 10 y el espacio vacío x está representado por 11. se tienen entonces 8 qubits, véase la configuración siguiente:



Nótese que el orden de los bits que describen las posiciones de cada casilla se encuentra en un orden invertido que va de derecha a izquierda y de abajo a arriba. Por ejemlo siendo el orden ABCD, la celda B tiene las posiciones 2 y 3 solo que se muestra invertido de derecha a izquierda y se ve como un 3 2.

Comenzamos importando las bibliotecas necesarias e inicializando el modelo

[1]:
```
from qiskit import *
from qiskit.visualization import plot_histogram
from qiskit.circuit.library import MCXGate
```

[2]:
```
def posicion_inicial(qubits_i:tuple):
    """Crea un circuito cuántico de 8 qubits y aplica una compuerta X a los␣
 ↪qubits en las posiciones indicadas.
    El propósito del mismo es representar las posiciones iniciales de las␣
 ↪celdas en el puzzle, esto viene a ser el ket x.

    args
        qubits_i: En esta tupla de 4 elementos se indican las posiciones de los␣
 ↪qubits que serán inicializados como ket 1
    """
    qc = QuantumCircuit(8)
    # Preparación de los estados del 0 al 7
    qc.x(qubits_i[0])
    qc.x(qubits_i[1])
    qc.x(qubits_i[2])
    qc.x(qubits_i[3])
    qc.name = "init"
    return qc
```

1.2 Reglas

En la tarea de 3 rompecabezas, tenemos cuatro **reglas** diferentes definidas por la posición del espacio vacío. Cada una de las reglas tiene dos instancias, ya sea moviendo el espacio vacío en el sentido de las agujas del reloj o en el sentido contrario a las agujas del reloj. Reconocemos las cuatro reglas e indicamos la presencia de una regla mediante un qubit. Usamos cuatro qubits que indican la presencia de las cuatro reglas y las llamamos el **rastro**. Necesitamos el **rastro** representado por los cuatro qubits, debido a que no podemos eliminar la información y no podemos volver a calcular la salida descomputando reharíamos las reglas. Adicionalmente, requerimos una **bandera** representada por un qubit que nos indique si la regla con la instanciación correspondiente se puede ejecutar o no. Finalmente, necesitamos un qubit que represente el **descriptor de ruta** que estará presente por superposición usando una puerta de Hadamard.

En primer lugar, la parte condicional de las reglas es implementada por la compuerta de Toffoli, llamada también ccx. Reconoce la posición del espacio vacío y lo indica configurando un qubit de los cuatro qubits del *rastro* a uno.

1.3 Ejecución de las Reglas

La ejecución de las reglas usa la puerta de Fredkin, también llamada puerta de intercambio controlado (CSWAP), utilizando la información de seguimiento y el descriptor de ruta configurando el qubit bandera (qubit 8) para indicar si la regla se va a ejecutar. El reinicio se realiza descomputando, repitiendo la operación para poner la bandera nuevamente en el estado cero.

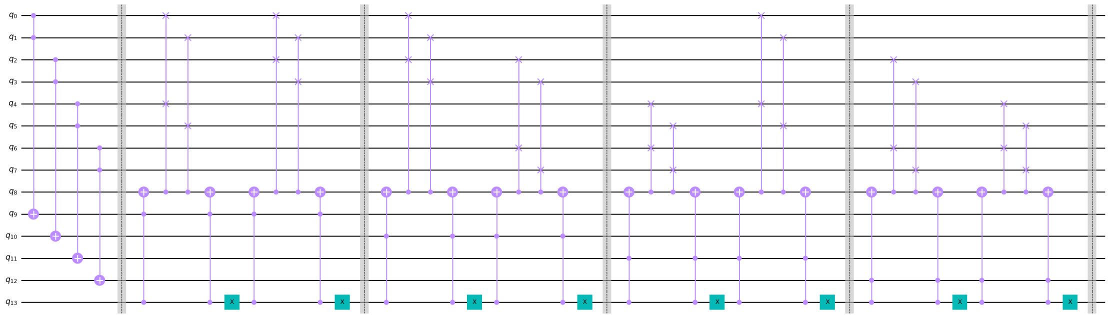
Cambiamos el descriptor de la ruta por la puerta NOT y ejecutamos la segunda instanciación de la regla dependiendo del valor de la traza; el `qc.barrier()` separará la representación en el circuito, dando como resultado el circuito cuántico indicado en la Figura.

[3]:
```
def reglas(nombre:str,tamaño:int, bandera:int, rastro:tuple, descriptor:int) ->␣
↪QuantumCircuit:
    """Reglas de movimiento para el 3-puzzle

    args
        nombre: Nombre de las reglas
        tamaño: El valor define el tamaño del circuito.
        bandera: (Posición) Indica si la regla puede ejecutarse o no. El valor␣
↪define la posición de la bandera.
        rastro: (Posiciones) Cuatro qubits indican la ubicación de la celda␣
↪vacía. El valor define la posición del rastro.
        descriptor: (Posición) El descriptor de camino indica el movimiento a␣
↪realizar. El valor define la posición del descriptor.
    """
    qc = QuantumCircuit(tamaño)

    #If part of rules marked in trace
    qc.ccx(0,1,rastro[0])
    qc.ccx(2,3,rastro[1])
    qc.ccx(4,5,rastro[2])
    qc.ccx(6,7,rastro[3])
```

```
qc.barrier()

# Primer conjunto de reglas para la casilla A

#Search empty state with the descriptor
qc.ccx(rastro[0],descriptor,bandera)
#Execute 1st then part by moving the empty space anti-clockwise
qc.cswap(bandera,0,4)
qc.cswap(bandera,1,5)
#Secod then part with changed descriptor
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[0],descriptor,bandera)
#Fetch second superposition
qc.x(descriptor)
qc.ccx(rastro[0],descriptor,bandera)
#Execute 2th then part by moving the empty space clockwise
qc.cswap(bandera,0,2)
qc.cswap(bandera,1,3)
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[0],descriptor,bandera)
#Restore descriptor
qc.x(descriptor)
qc.barrier()

# Segundo conjunto de reglas para la casilla B

#Search empty state with the descriptor
qc.ccx(rastro[1],descriptor,bandera)
#Execute 1st then part
qc.cswap(bandera,0,2)
qc.cswap(bandera,1,3)
#Secod then part with changed descriptor
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[1],descriptor,bandera)
#Fetch second superposition
qc.x(descriptor)
qc.ccx(rastro[1],descriptor,bandera)
#Execute 2th then part
qc.cswap(bandera,2,6)
qc.cswap(bandera,3,7)
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[1],descriptor,bandera)
#Restore descriptor
qc.x(descriptor)
qc.barrier()

# Tercer conjunto de reglas para la casilla C
```

```python
#Search empty state with the descriptor
qc.ccx(rastro[2],descriptor,bandera)
#Execute 1st then part
qc.cswap(bandera,4,6)
qc.cswap(bandera,5,7)
#Secod then part with changed descriptor
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[2],descriptor,bandera)
#Fetch second superposition
qc.x(descriptor)
qc.ccx(rastro[2],descriptor,bandera)
#Execute 2th then part
qc.cswap(bandera,0,4)
qc.cswap(bandera,1,5)
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[2],descriptor,bandera)
#Restore descriptor
qc.x(descriptor)
qc.barrier()

# Cuarto conjunto de reglas para la casilla D

#Search empty state with the descriptor
qc.ccx(rastro[3],descriptor,bandera)
#Execute 1st then part
qc.cswap(bandera,2,6)
qc.cswap(bandera,3,7)
#Secod then part with changed descriptor
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[3],descriptor,bandera)
#Fetch second superposition
qc.x(descriptor)
qc.ccx(rastro[3],descriptor,bandera)
#Execute 2th then part
qc.cswap(bandera,4,6)
qc.cswap(bandera,5,7)
#Reset Flag
qc.ccx(rastro[3],descriptor,bandera)
#Restore descriptor
qc.x(descriptor)
qc.barrier()
qc.name = nombre

# Se muestra la estructura del circuito en caso de querer visualizarla
if nombre == 'test':
    display(
```

```
            qc.draw(output='mpl', fold=-1)
        )
    return qc

reglas(nombre="test",tamaño=14,bandera=8,rastro=(9,10,11,12),descriptor=13)
```



[3]: <qiskit.circuit.quantumcircuit.QuantumCircuit at 0x283d1466ec0>

2 3-puzzle de profundidad 2

La amplificación de Grover no se puede aplicar a menos de cuatro estados. Una búsqueda de profundidad uno para el rompecabezas de 3 parte los resultados en dos estados y una búsqueda de profundidad dos en cuatro estados. El operador $L(2)$ que describe la búsqueda de la profundidad dos se representa como

$L(2)\,|m_2, m_1\rangle\,|x\rangle = |m_2, m_1\rangle\,|\gamma\rangle$

con dos qubits representando el camino que tomará.

El operador T representa la función oráculo. La cual sirve para verificar si se ha alcanzado la solución.

Con búsqueda en profundidad $t = 2$, se necesitan cuatro qubits adicionales para representar la nueva traza, un qubit adicional para el descriptor de ruta de la profundidad dos y un qubit auxiliar para la operación del oráculo. El circuito cuántico para este caso está representado por 20 qubits. Medimos el descriptor de ruta representado por dos qubits 13 y 18.

En el ejemplo siguiente las variables init y goal definen la configuración inicial de las celdas del puzzle y la configuración objetivo, La siguiente imagen representa la posición inicial de las celdas en las configuraciones indicadas en el código.

Cuadrícula

Nombre de celda	3	2
Bits de celda	1 0	0 1
Posición de bits	D 7 6	C 5 4
Nombre de celda	x	1
Bits de celda	1 1	0 0
Posición de bits	B 3 2	A 1 0
	00111001	2347
	Posición codificada	Bits en uno

Posicionamiento ordenado

A		B		C		D		
1		X		2		3		Nombre de celda
0	0	1	1	1	0	0	1	Bits de celda
0	1	2	3	4	5	6	7	Posición de bits
		2	3	4			7	Bits en uno

La posición de los bits en 1 del registro de las cuatro celdas (los 8 bits que definen la posición de las celdas) es lo que define la configuración inicial y objetivo del puzzle. En este caso la configuración inicial es 2-3-4-7, y la objetivo es 0-4-5-7 la cual es llevar la celda vacía hasta la posición C en sentido antihorario.

Cuadrícula

Nombre de celda	3	x
Bits de celda	1 0	1 1
Posición de bits	D 7 6	C 5 4
Nombre de celda	1	2
Bits de celda	0 0	0 1
Posición de bits	B 3 2	A 1 0
	10001101	0457
	Posición codificada	Bits en uno

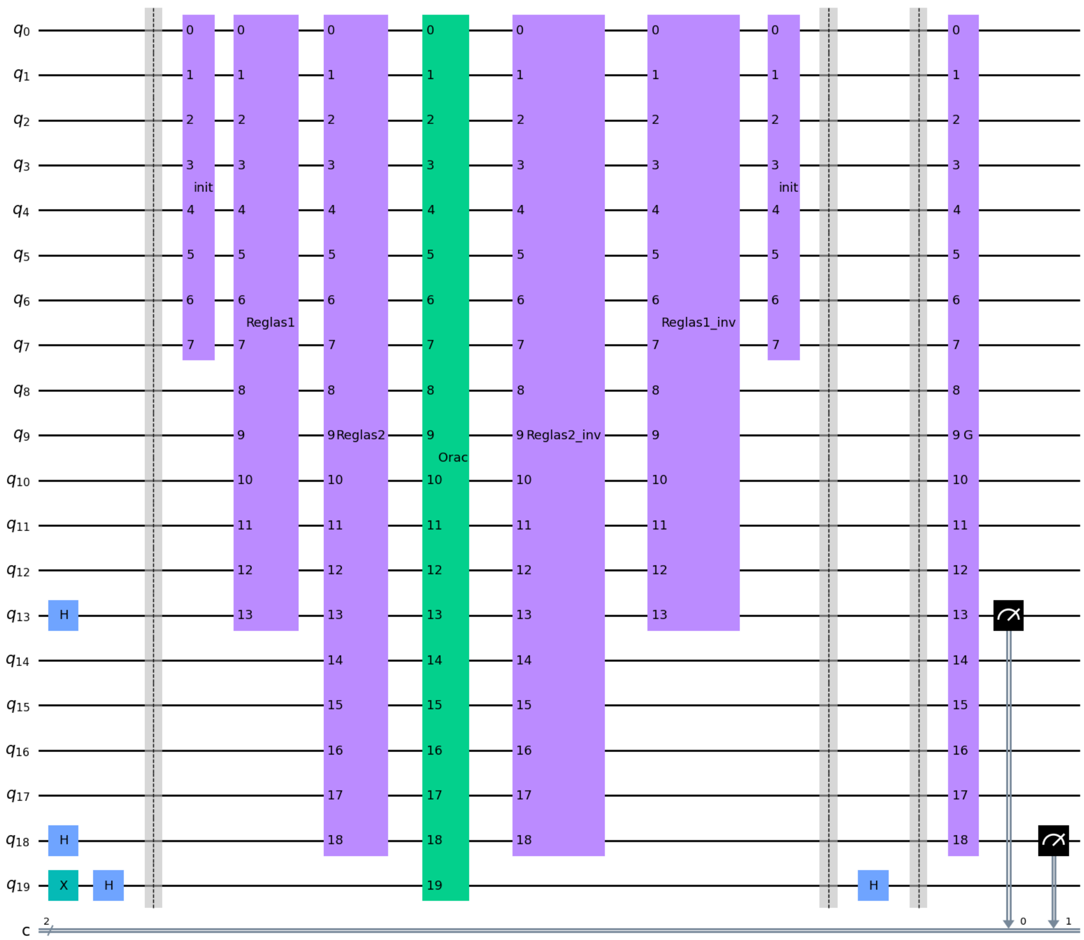
Posicionamiento ordenado

A		B		C		D		
2		1		X		3		Nombre de celda
1	0	0	0	1	1	0	1	Bits de celda
0	1	2	3	4	5	6	7	Posición de bits
0				4	5		7	Bits en uno

[4]:
```
def oracle(size:int, qubits_t:tuple):
    """Oráculo. Verifica si se ha alcanzado la solución.

    args
        size: El tamaño en qubits del circuito
        qubits_t: Esta tupla define la solución (target) del puzzle por la␣
↪posición de los qubits en 1.
    """
    qc = QuantumCircuit(size)
    gate = MCXGate(4)
    #Goal Configurations
    qc.append(gate,[qubits_t[0], qubits_t[1], qubits_t[2], qubits_t[3], size-1])
    qc.name=" Orac"
    return qc

def reglas_inv(nombre:str, tamaño:int, bandera:int, rastro:tuple, descriptor:
↪int) -> QuantumCircuit:
    qc = reglas(nombre, tamaño, bandera, rastro, descriptor)
    qc_inv = qc.inverse()
    qc_inv.name = nombre + "_inv"
    return qc_inv

def Grover():
```

```python
    """Grover para el caso de profundidad 2"""
    qc = QuantumCircuit(19)
    #Diffusor
    qc.h([13,18])
    qc.z([13,18])
    qc.cz(13,18)
    qc.h([13,18])
    qc.name="G"
    return qc

# Inicialización del circuito cuántico con 25 qubits.
qc2 = QuantumCircuit(20,2)
# Posición de las celdas inicial y final, descritas como la posición de los␣
 ↪qubits que son ket 1
init = (2,3,4,7)
goal = (0,4,5,7)
# Colocamos en superposición los descriptores de camino 13, 18 y 23
qc2.h(13)
qc2.h(18)

# Qubit auxiliar que indica si se alcanzó la solución, se niega y se coloca en␣
 ↪superposición
qc2.x(19)
qc2.h(19)
qc2.barrier()

# Preparación del estado inicial
qc2.append(posicion_inicial(init),range(8))
qc2.append(reglas(nombre="Reglas1",tamaño=14,bandera=8,␣
 ↪rastro=(9,10,11,12),descriptor=13), range(14))
qc2.append(reglas(nombre="Reglas2",tamaño=19,bandera=8,␣
 ↪rastro=(14,15,16,17),descriptor=18),range(19))
# Oráculo
qc2.append(oracle(20, goal),range(20))
qc2.append(reglas_inv(nombre="Reglas2",tamaño=19,bandera=8,␣
 ↪rastro=(14,15,16,17),descriptor=18),range(19))
qc2.append(reglas_inv(nombre="Reglas1",tamaño=14,bandera=8,␣
 ↪rastro=(9,10,11,12),descriptor=13), range(14))
# Rehacemos la preparación
qc2.append(posicion_inicial(init),range(8))
qc2.barrier()
# Rehacemos la superposición del qubit auxiliar
qc2.h(19)
qc2.barrier()
qc2.append(Grover(),range(19))
qc2.measure(13,0)
```

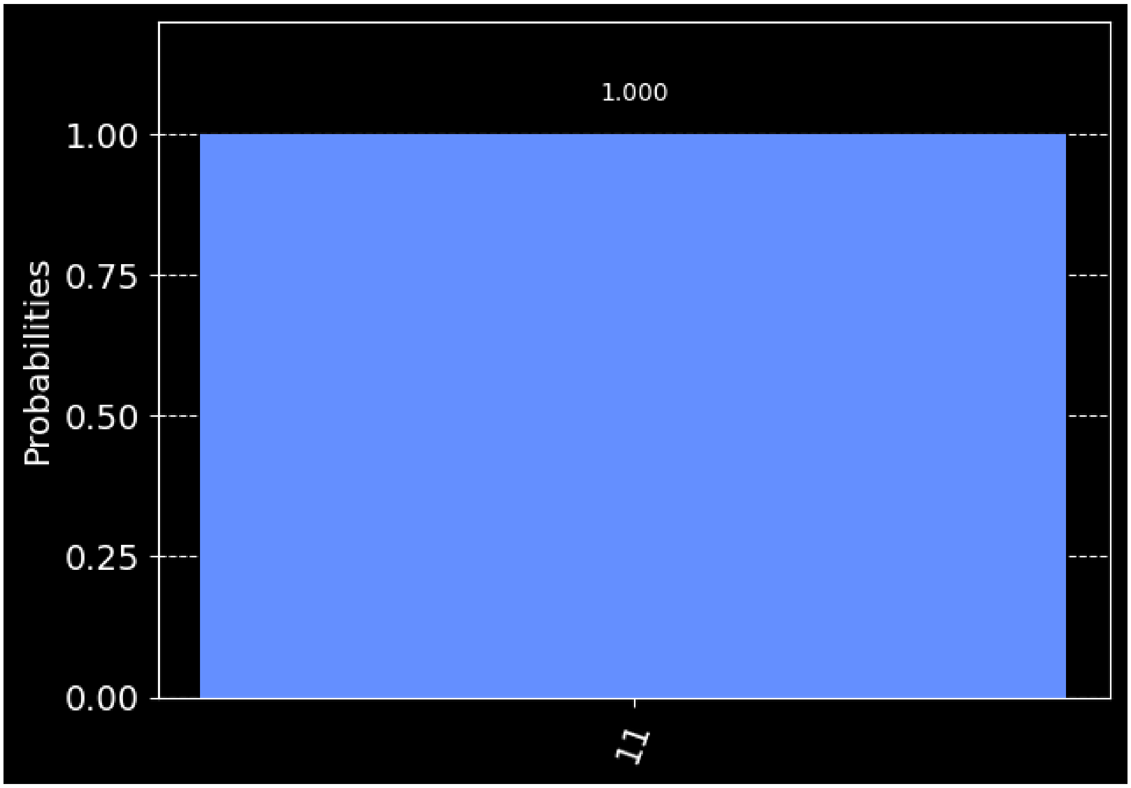
```
qc2.measure(18,1)


# Visualización del circuito
estilo = { "displaycolor": { " Orac": ["#03D08C", "#000000"] } }
display(
    qc2.draw(output='mpl', style=estilo)
)
```



Se puede apreciar en la gráfica que la solución para este caso es 11, es decir mover la casilla en sentido horario dos veces.

[5]:
```
# Simulador
simulator2 = Aer.get_backend('qasm_simulator')
result2=execute(qc2,simulator2, shots=512).result()
counts2 = result2.get_counts()
plot_histogram(counts2)
```

[5]:



3 3-puzzle de profundidad 3

Este caso es similar a los anteriores aunque el Grover es diferente.

En este ejemplo nuevamente las variables init y goal definen la configuración inicial de las celdas del puzzle y la configuración objetivo, esta vez la configuración objetivo por tratarse de 3 movimientos existen tres maneras de llegar a la configuración objetivo.

Configuración inicial y final La configuración inicial es la misma que en el caso anterior 2-3-4-7, sin embargo la configuración final para este caso es 0-1-4-7, la cual puede apreciarse en la figura siguiente.

Cuadrícula

Nombre de celda	3	2
Bits de celda	1 0	0 1
Posición de bits	D 7 6	C 5 4
Nombre de celda	1	x
Bits de celda	0 0	1 1
Posición de bits	B 3 2	A 1 0
	11001001	0147
	Posición codificada	Bits en uno

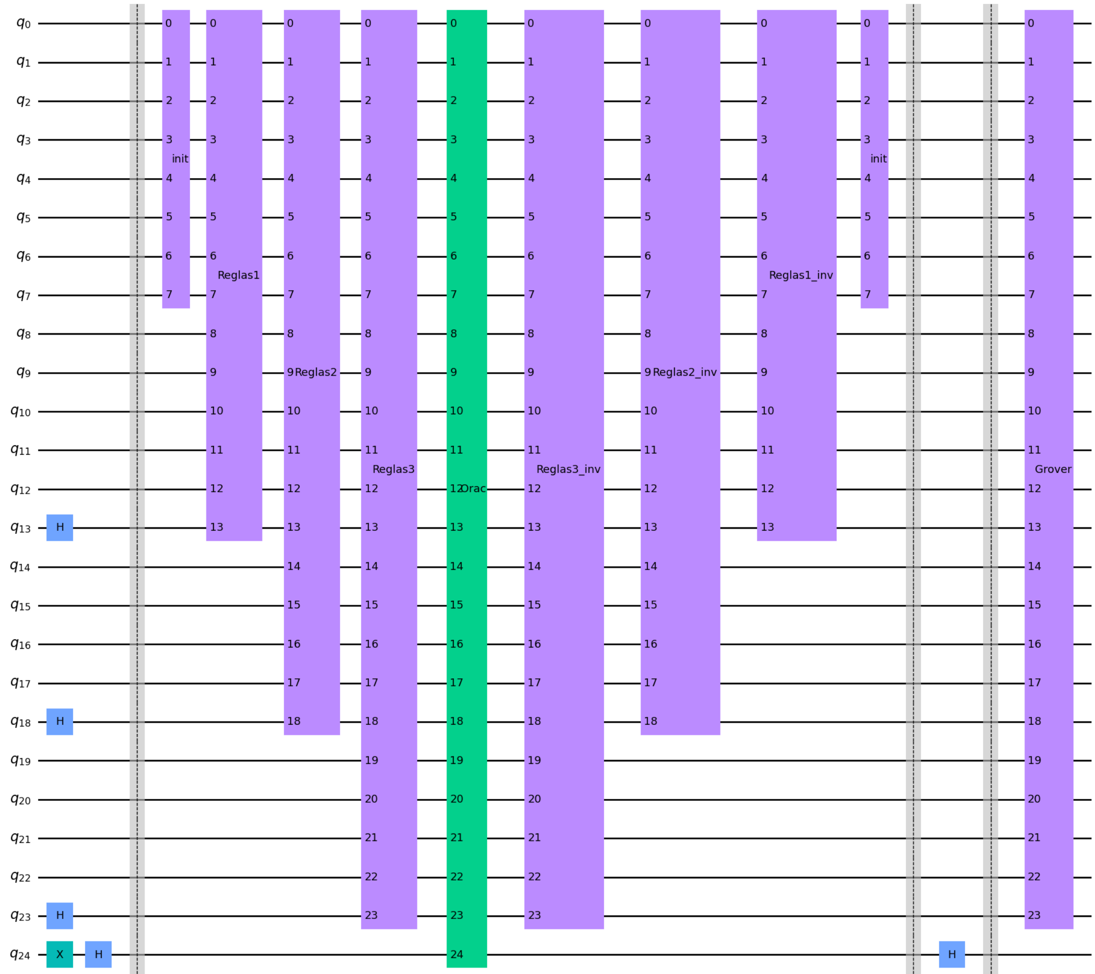
Posicionamiento ordenado

A		B		C		D		
X		1		2		3		Nombre de celda
1	1	0	0	1	0	0	1	Bits de celda
0	1	2	3	4	5	6	7	Posición de bits
0	1			4			7	Bits en uno

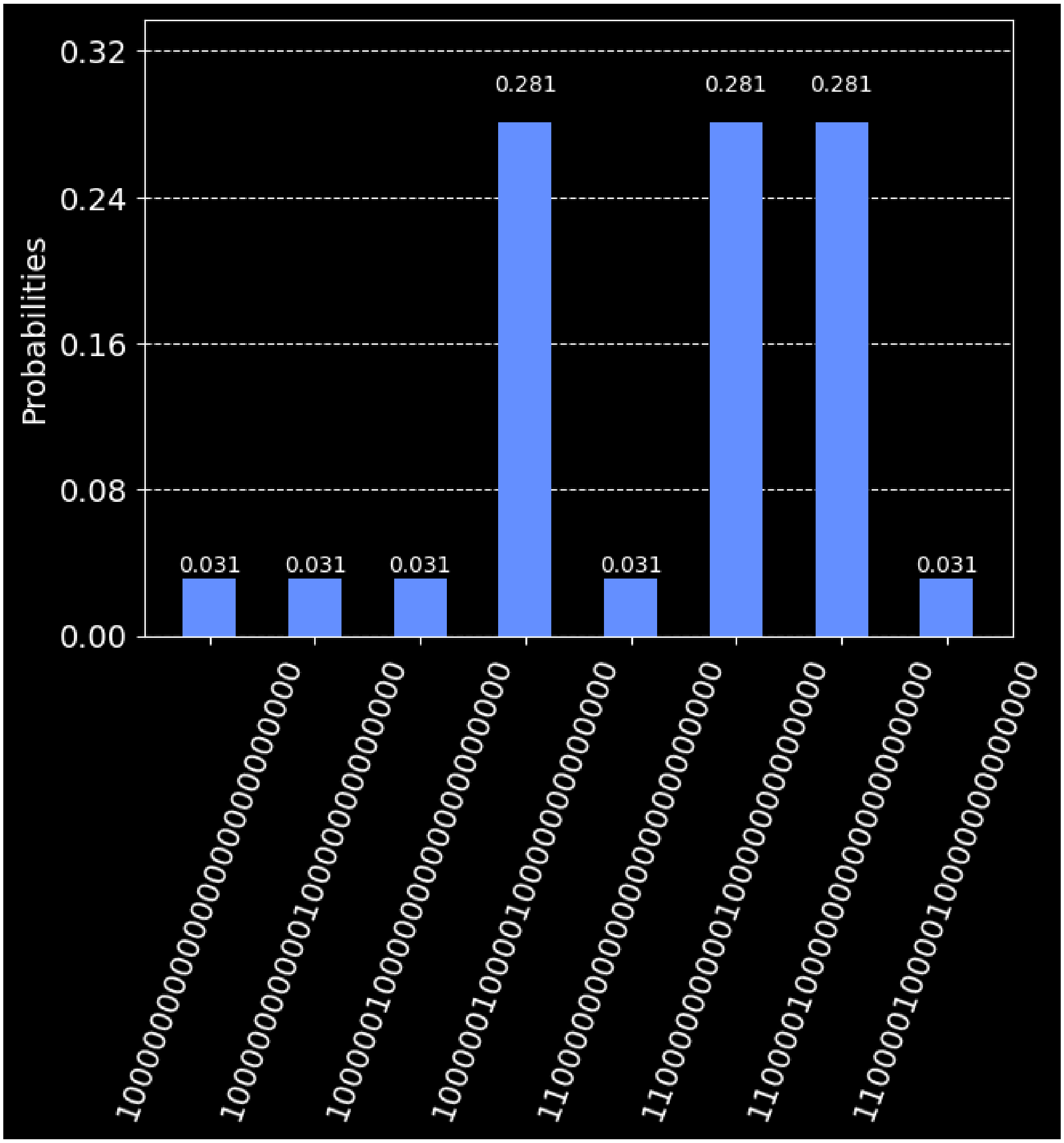
Nótese que la solución se puede hallar con un solo movimiento al mover la celda vacía a la derecha, sin embargo en este caso se requiere una solución que consista estrictamente de tres movimientos.

[8]:
```
def Grover3():
    """Grover para el caso de profundidad 3. En términos generales,
    el algoritmo de Grover se puede entender como una rotación en
    el espacio de estado de los qubits que lleva la amplitud de la
    solución deseada a un estado de mayor amplitud, lo que aumenta
    la probabilidad de medir la solución correcta al final del algoritmo. """
    qc = QuantumCircuit(24)
    #Diffusor
    qc.h([13,18,23])
    qc.x([13,18,23])
    qc.h(13)
    qc.ccx(18,23,13)
    qc.h(13)
    qc.x([13,18,23])
    qc.h([13,18,23])
    qc.name="Grover"
    return qc

# Inicialización del circuito cuántico con 25 qubits.
qc3 = QuantumCircuit(25)
# Posición de las celdas inicial y final, descritas como la posición de los␣
 ↪qubits que son ket 1
init = (2,3,4,7)
goal = (0,1,4,7)

# Colocamos en superposición los descriptores de camino 13, 18 y 23
qc3.h(13)
qc3.h(18)
qc3.h(23)

# Qubit auxiliar que indica si se alcanzó la solución, se niega y se coloca en␣
 ↪superposición
qc3.x(24)
qc3.h(24)
qc3.barrier()

qc3.append(posicion_inicial(init),range(8))
qc3.append(reglas(nombre="Reglas1", tamaño=14, bandera=8,␣
 ↪rastro=(9,10,11,12),descriptor=13), range(14))
qc3.append(reglas(nombre="Reglas2", tamaño=19, bandera=8,␣
 ↪rastro=(14,15,16,17),descriptor=18),range(19))
qc3.append(reglas(nombre="Reglas3", tamaño=24, bandera=8,␣
 ↪rastro=(19,20,21,22),descriptor=23),range(24))
# Oráculo con la solución
```

```
qc3.append(oracle(25, goal),range(25))
qc3.append(reglas_inv(nombre="Reglas3", tamaño=24, bandera=8, rastro=(19,20,21,22),descriptor=23),range(24))
qc3.append(reglas_inv(nombre="Reglas2", tamaño=19, bandera=8, rastro=(14,15,16,17),descriptor=18),range(19))
qc3.append(reglas_inv(nombre="Reglas1", tamaño=14, bandera=8, rastro=(9,10,11,12),descriptor=13), range(14))
# Rehacemos la preparación
qc3.append(posicion_inicial(init),range(8))
qc3.barrier()

qc3.h(24)
qc3.barrier()
qc3.append(Grover3(),range(24))

# Visualización del circuito
display(
    qc3.draw(output='mpl', fold=-1, style=estilo)
)
```



[9]:
```
simulator3 = Aer.get_backend('statevector_simulator')
result3=execute(qc3,simulator3).result()
counts3 = result3.get_counts()
plot_histogram(counts3)
```
[9]:



Puede apreciarse que 3 soluciones fueron encontradas para este caso, ya que alcanzar la configuración objetivo con tres movimientos exactos solo puede lograrse de tres formas diferentes, estas soluciones tienen como descriptor de camino los casos: 1-1-0, 1-0-1, 0-1-1, siendo 1 el movimiento en sentido horario y 0 antihorario, se puede analizar que las tres decisiones de camino conducen a la solución.

4 Análisis y conclusiones

Dado que los problemas de inteligencia artificial suelen describirse como problemas de búsqueda, juegos de lógica y puzzles, estudiar las aplicaciones de un algoritmo cuántico de búsqueda en juegos de lógica y la abstracción de dichos juegos al mundo cuántico nos permite acercarnos al desarrollo de la inteligencia artificial cuántica. En el presente trabajo se hizo la abstracción a un algoritmo cuántico de búsqueda del juego del puzzle de 3 celdas considerando un árbol de búsqueda de 3 niveles de profundidad. Para este nivel de complejidad, el circuito cuántico consistió de 25 qubits, se puede ver que si se desea aumentar la profundidad, por cada nivel se deben añadir 5 qubits, 4 que sirven de rastro y 1 para el descriptor de ruta de ese nivel de profundidad. Para alcanzar cualquier solución, se necesitan de 6 a 7 niveles de profundidad, por lo que vienen a ser de 40 a 45 qubits.

Al comparar este algoritmo cuántico con el algoritmo clásico, para este ejemplo a pesar de que teóricamente es más eficiente este algoritmo, no se puede determinar que el algoritmo cuántico pueda ser más rápido por el hecho de que el problema del puzzle de 3 celdas es relativamente sencillo incluso para un ordenador clásico y la diferencia de tiempos de ejecución entre ambos algoritmos cuántico y clásico es muy pequeña por hallar la solución en un tiempo muy corto. No obstante es una abstracción funcional del puzzle, como un algoritmo cuántico que resuelve un árbol de búsqueda y que a su vez es escalable, por lo tanto puede abstraerse a otro tipo de juegos y puzzles más complejos, lo cual bajo escenarios de mucha mayor complejidad computacional puede saberse que este algoritmo cuántico hallaría la solución de forma más rápida por usar el algoritmo de Grover, el cual conseguiría la solución en un tiempo $O(\sqrt{N})$ gracias al principio de superposición.

La superposición se utiliza aplicando la compuerta Hadamard en los qubits descriptores de ruta, por lo que estos consideran los dos caminos posibles en cada paso y permite describir al aplicar las reglas de movimiento, el oráculo y la operación Grover cuál es el camino en cada paso que conlleva un resultado igual al esperado, evaluando una superposición de todos los posibles escenarios del árbol de búsqueda al mismo tiempo. Es por ello que para problemas mucho más complejos la búsqueda sería mucho más eficiente.

Por otro lado, es importante diferenciar un árbol de búsqueda de un árbol de decisión, el primero es similar a lo estudiado con el presente algoritmo, hallar un camino en un árbol que me permita alcanzar la solución, en este se desea obtener un camino. El segundo, el árbol de decisión, es un algoritmo que permite determinar con un árbol si un dato tiene o no una característica específica estudiando este arbol previamente generado con un conjunto de datos similares.