

COMPUTAEX

Extremadura Supercomputing
Center



Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

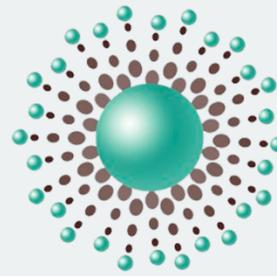
"Una manera de hacer Europa"

JUNTA DE EXTREMADURA

Consejería de Educación, Ciencia y Formación Profesional
Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación



Unión Europea



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

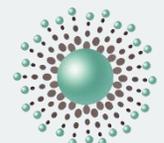
El viajante del comercio

Paloma Rodríguez Oliver

Curso de Computación Cuántica 6.0



Quantum
SPAIN



COMPUTAEX

Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"

JUNTA DE EXTREMADURA

Consejería de Educación, Ciencia y Formación Profesional
Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación



Unión Europea

Índice

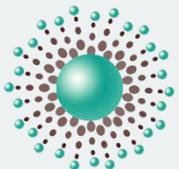
1. FÍSICA CUÁNTICA

2. COMPUTACIÓN CUÁNTICA

3. VIAJANTE DE COMERCIO

4. ANNEALERS

5. RESULTADOS



FÍSICA CUÁNTICA

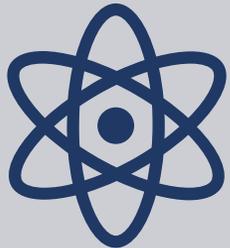
Desmitificación

“It is not at all surprising that electrons behave in a quantum mechanical way. The surprising thing is that they do not behave that way all the time.”

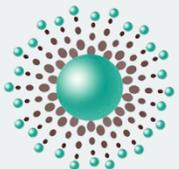
Richard Feynman



Los seres humanos estamos limitados por nuestros sentidos y nuestra intuición cotidiana. Gracias a las **matemáticas** y los **experimentos** podemos ver más allá de la información que procesa nuestro cerebro a partir de los inputs que recibe del entorno.



La física cuántica resulta difícil por los conceptos que confrontan radicalmente nuestra intuición cotidiana.



Radiación del cuerpo negro

A principios del siglo XX se creía que la física estaba completa.

Pero...

Radiación de un cuerpo negro.

Calor específico de los gases.

El problema del éter.

Líneas espectrales discretas.

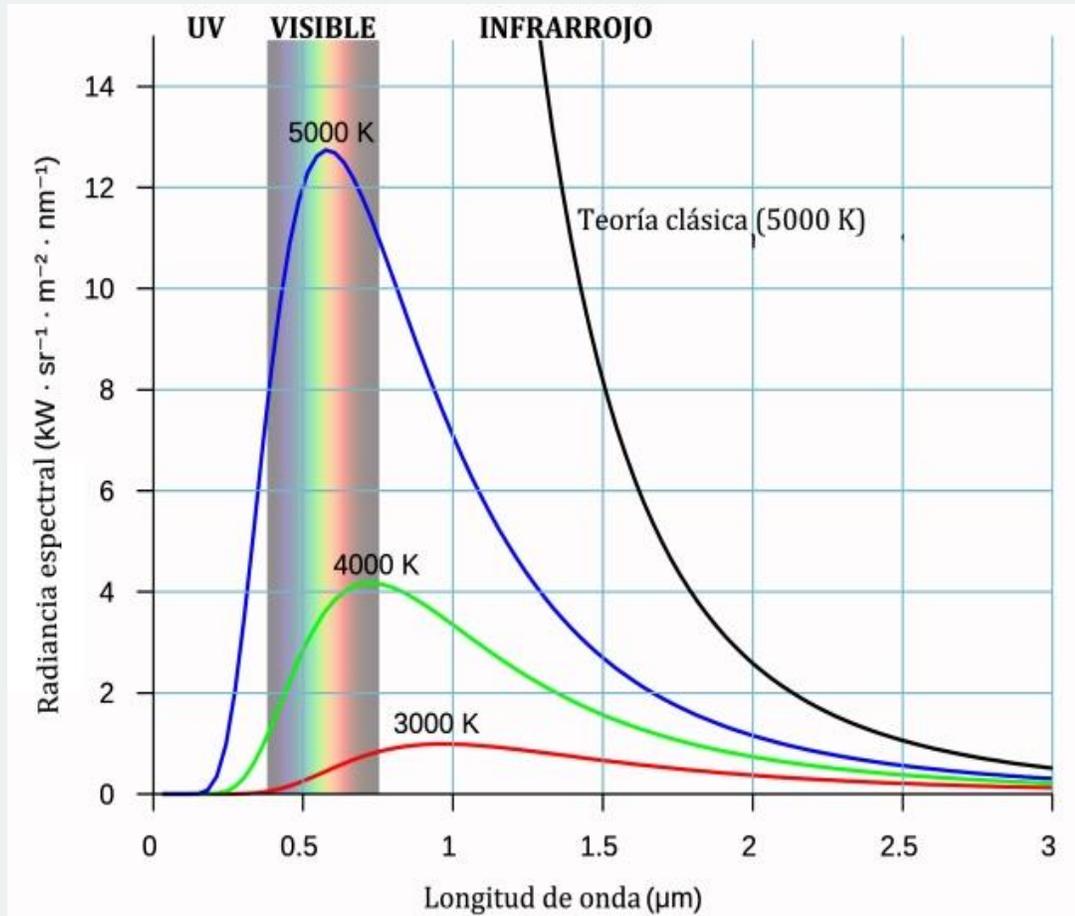
Campos electromagnéticos en diferentes SR.

Estructura de los sólidos.

...

La tormenta perfecta

Radiación del cuerpo negro



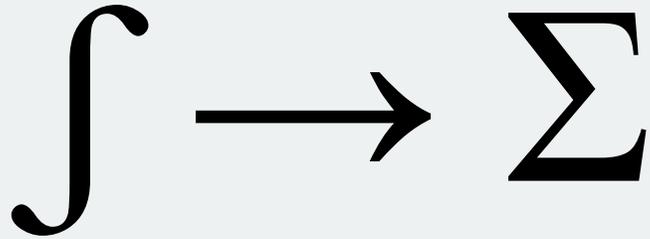
Ley de Rayleigh-Jeans

$$S(\lambda, T) = \frac{2\pi ckT}{\lambda^4}$$



MATEMÁTICAS

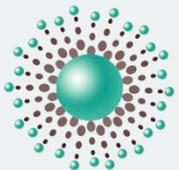
PLANCK



CONTINUO \rightarrow DISCRETO

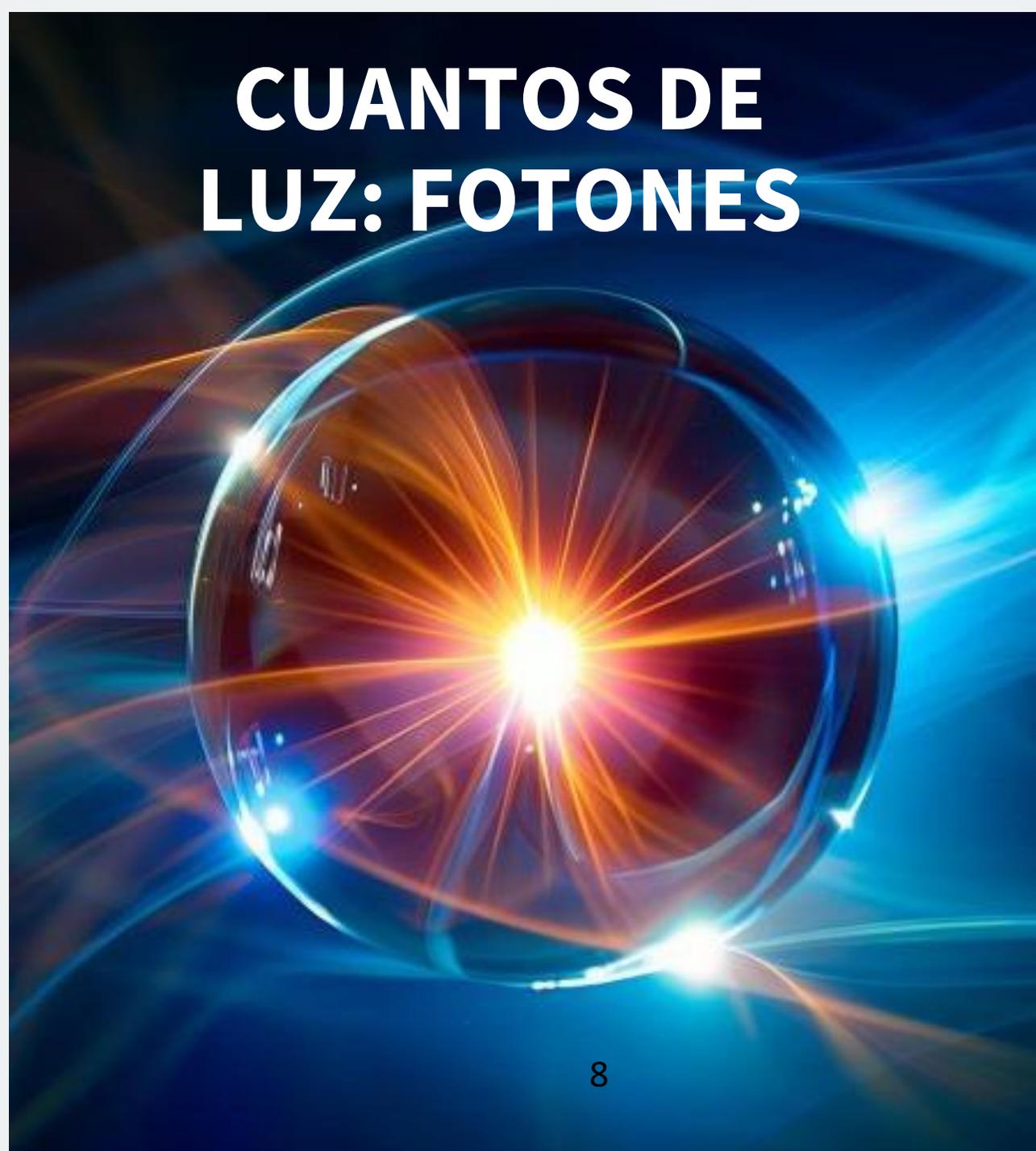
$$S(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^4} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}$$

Ley de radiación de Planck.



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

CUANTOS DE LUZ: FOTONES



Max Planck – 1900 (Cuantos de energía y constante de Planck)

Albert Einstein – 1905 (Efecto fotoeléctrico)

Niels Bohr – 1913 (Modelo atómico de Bohr)

Louis de Broglie – 1924 (Dualidad onda-partícula)

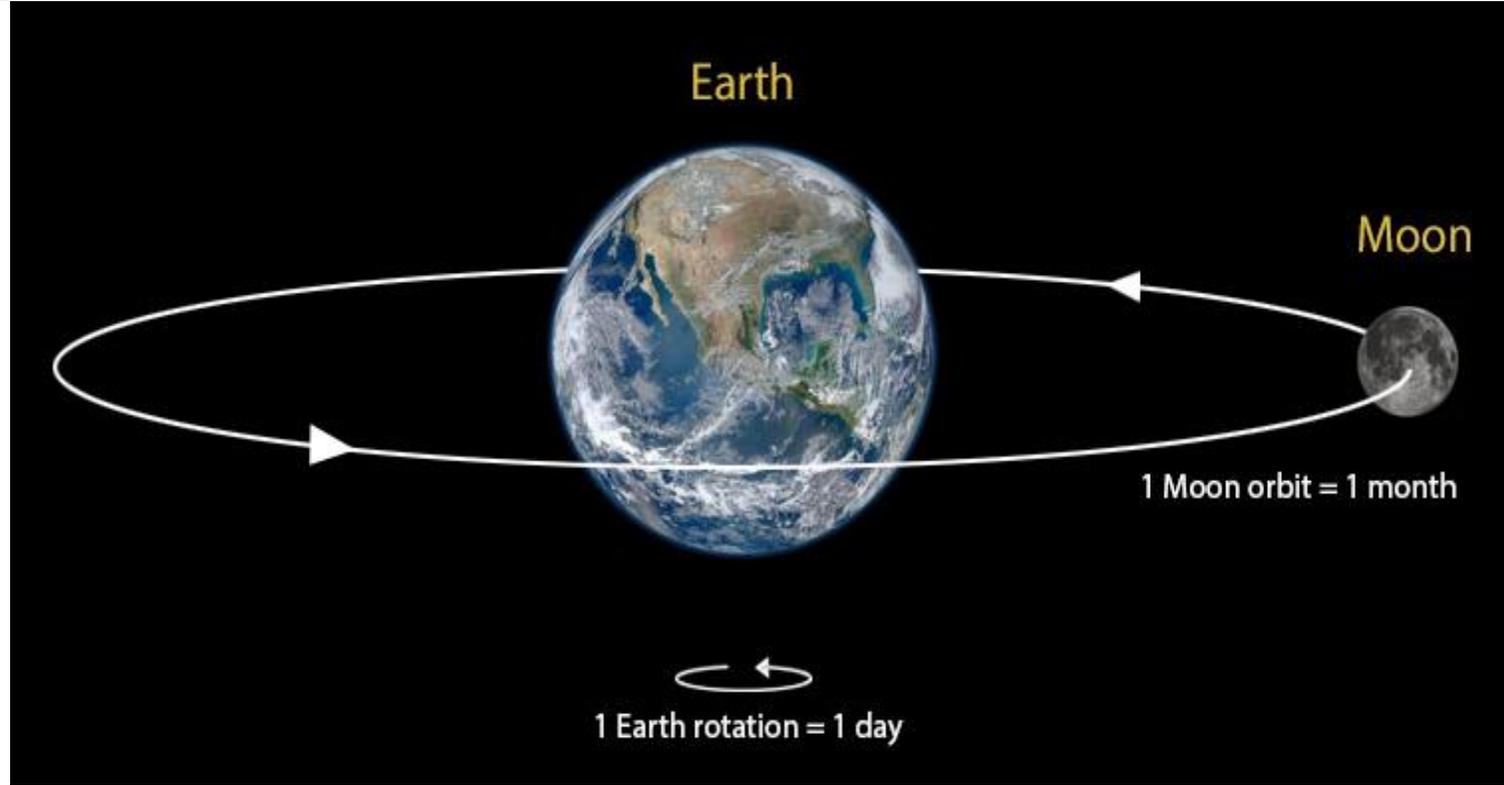
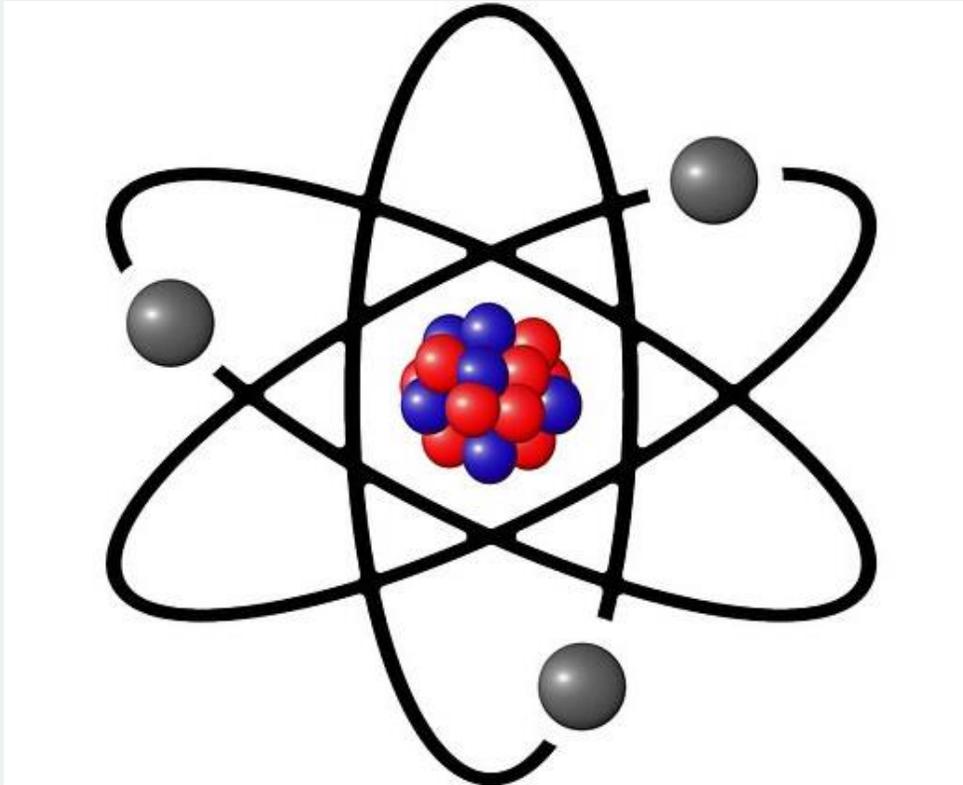
Werner Heisenberg – 1927 (Principio de incertidumbre)

Erwin Schrödinger – 1926 (Ecuación de Schrödinger)

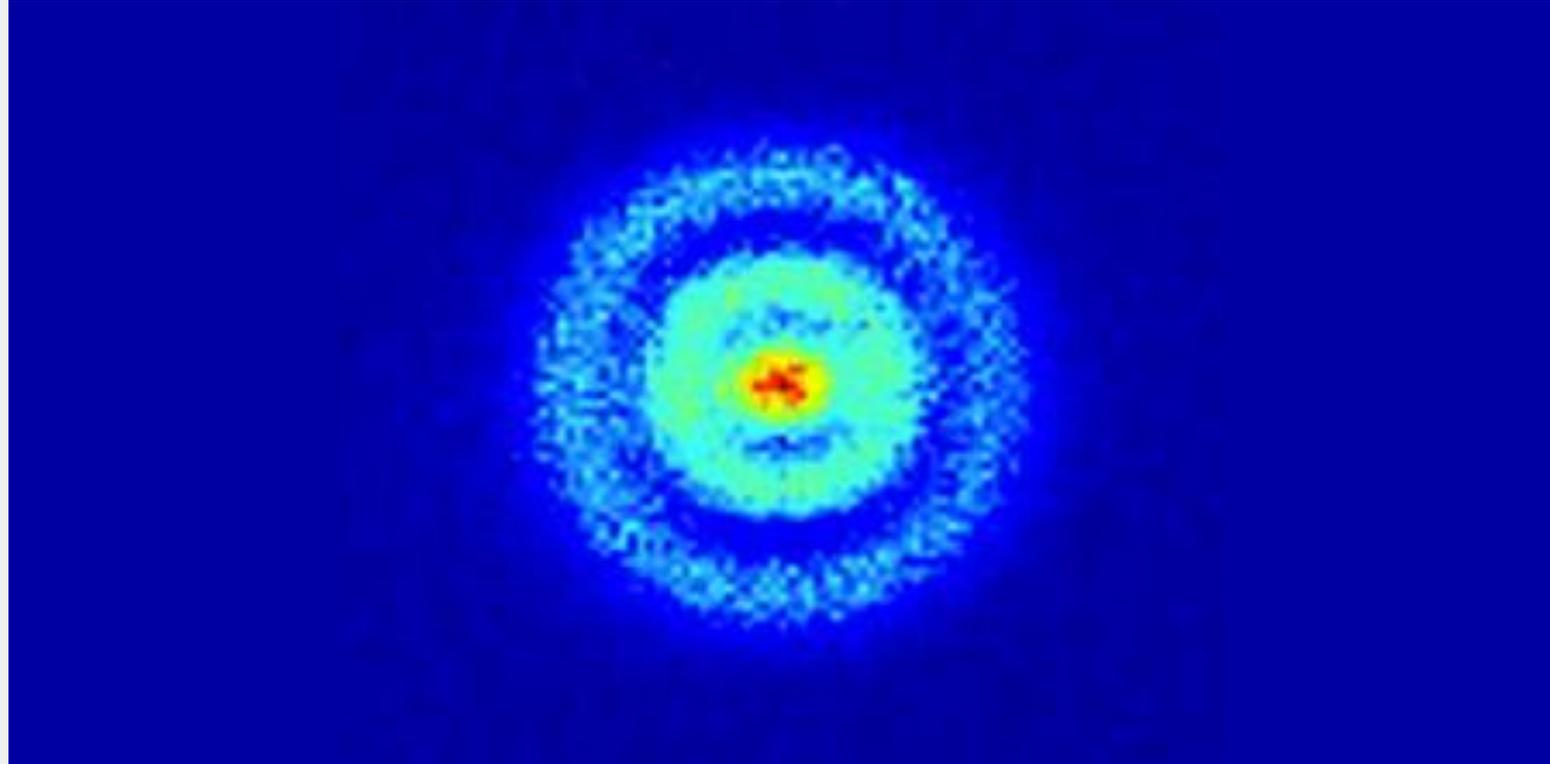
Paul Dirac – 1928 (Ecuación de Dirac y predicción del positrón)

Richard Feynman – 1948 (Electrodinámica cuántica)

Cómo creemos que son los átomos



Cómo son



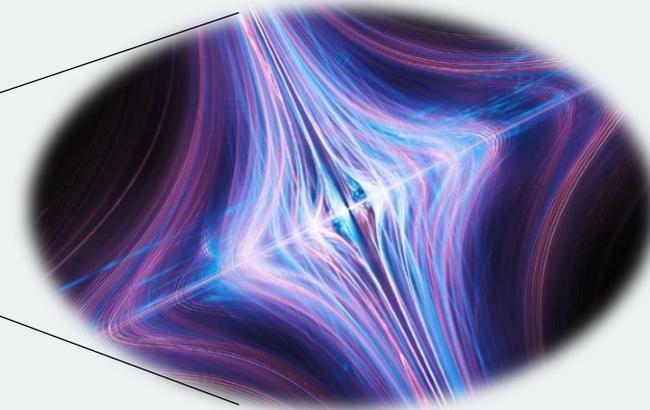
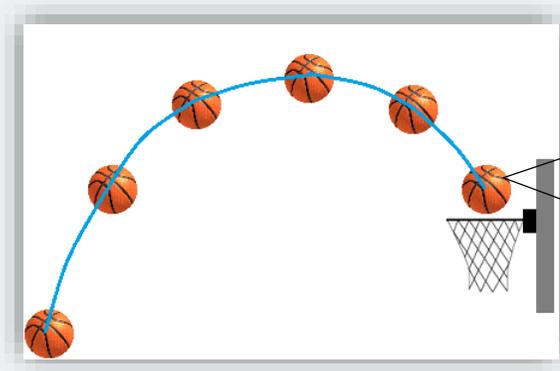
Qué es la física cuántica

1) Rama de la física que describe el comportamiento de las **partículas muy pequeñas**.

3) Propiedades nuevas: **superposición y entrelazamiento**.

2) Las **reglas** que describen esas partículas **son diferentes** a las del mundo clásico.

4) Usando estas propiedades se pueden resolver **problemas concretos** en mucho **menos tiempo**.



1. Características

- La **función de onda** Ψ define el estado cuántico de una partícula. Su módulo al cuadrado, $|\Psi(x)|^2$, representa la densidad de **probabilidad** de encontrar la partícula en la posición x .
- **Superposición y entrelazamiento.**
- Las magnitudes físicas son **operadores.**

$$\hat{x} = x \qquad \hat{p} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Función de onda

La **función de onda** $|\psi\rangle$ es la forma de describir el estado de la partícula. Es una función que **describe las probabilidades** de medir una partícula en un entorno dx en un tiempo dt . Al **medir**, el sistema se determina en uno de los estados posibles siguiendo las probabilidades de su función de onda.



El problema de la medida: la interpretación De Copenhague

Cuando un sistema cuántico interacciona, la función de onda **colapsa** y da como resultado uno de los valores posibles del sistema siguiendo las probabilidades de la función de onda. Los estados posibles se denominan **autoestados** y sus **autovalores** son las energías asociadas a cada uno.

2. Evolución de la función de onda: Ecuación de Schrödinger

$$E\Psi = \left[\frac{-\hbar^2}{2m\nabla^2} + V \right] \Psi = \hat{H}\Psi \quad \text{Donde } \hat{H} = \text{Hamiltoniano}$$

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial lineal: si Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones a la ecuación, entonces:

$\psi = a \psi_1 + b \psi_2$ también es solución → **SUPERPOSICIÓN**

3. Superposición

La **superposición** es una consecuencia del formalismo matemático que describe las partículas: un estado posible de la partícula es una combinación lineal de dos estados ortogonales.

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad \text{Un qubit}$$



$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} (|01\rangle + |10\rangle + |11\rangle + |00\rangle) \quad \text{Dos qubits}$$

4. Entrelazamiento

Dos partículas separadas siguen siendo parte del mismo sistema.

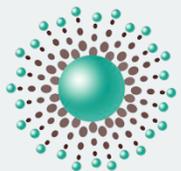
$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle)$$

MEDICIÓN

$|\Psi\rangle = |01\rangle$

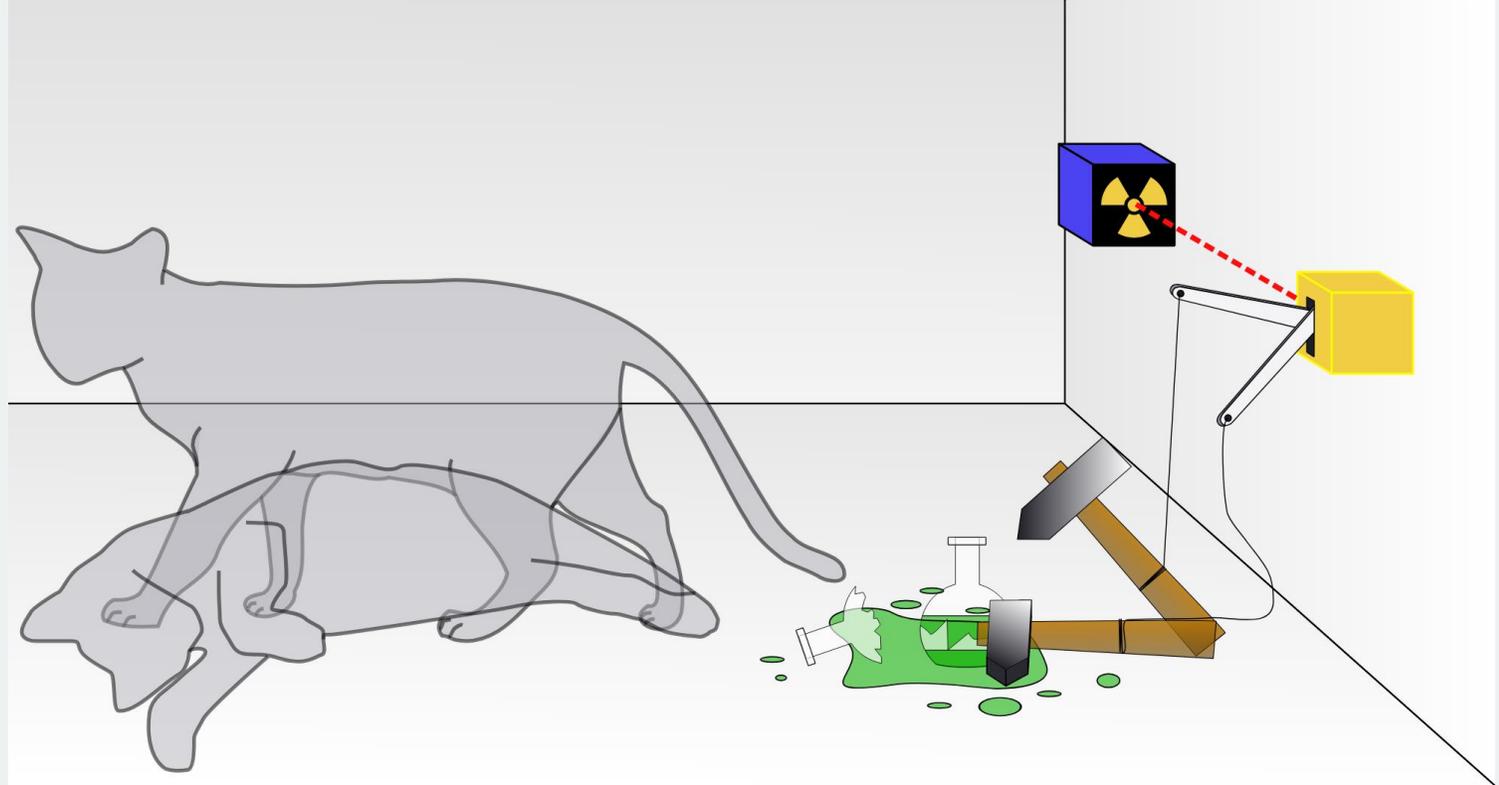
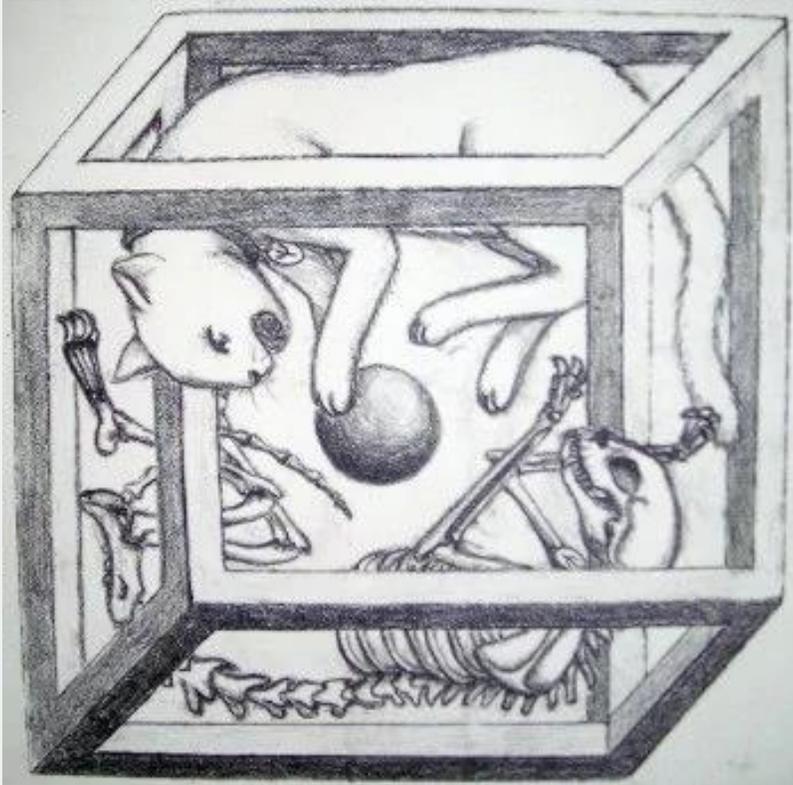
$|\Psi\rangle = |10\rangle$

Consecuencias



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

El gato de Schrödinger



Efecto túnel

Una partícula puede encontrarse en posiciones que clásicamente sería imposible. Hay **probabilidad no nula** de encontrarla al otro lado de la pared.

Resumen

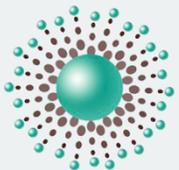
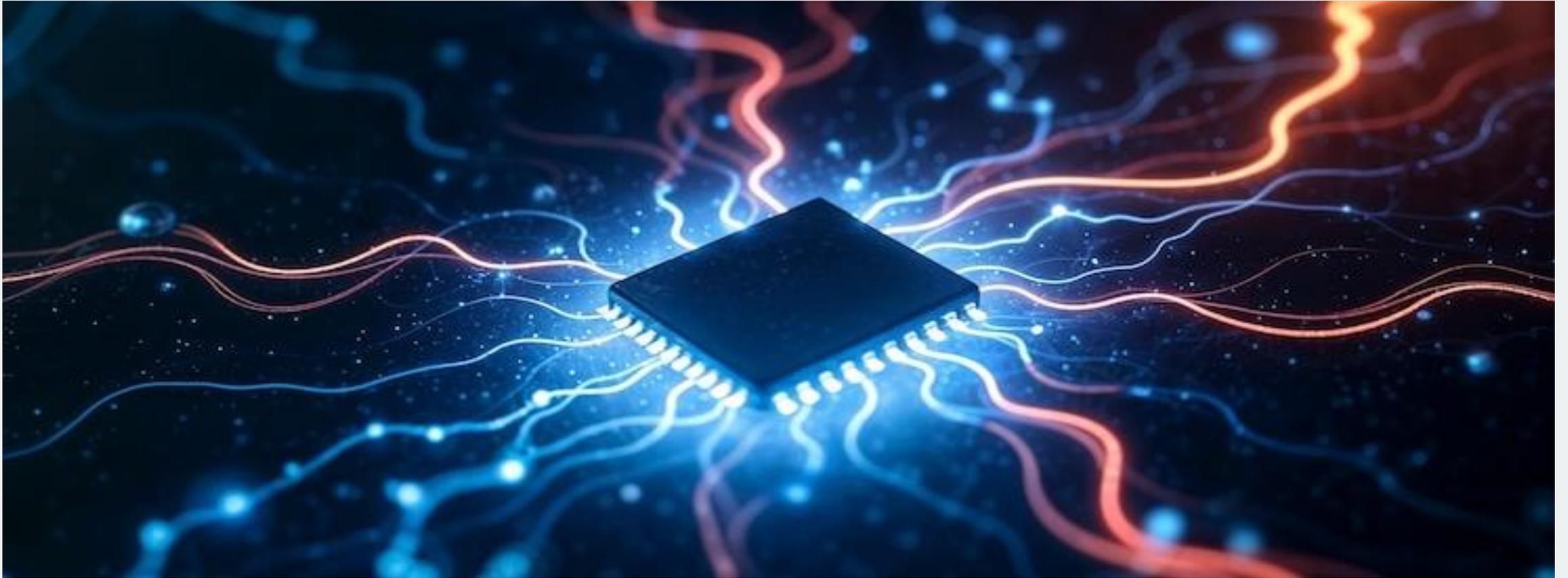
Física clásica

- Propiedades físicas definidas.
- Leyes de Newton.

Física cuántica

- Indefinición de las propiedades físicas.
- Ecuación de Schrödinger.
- Superposición y entrelazamiento.

COMPUTACIÓN CUÁNTICA

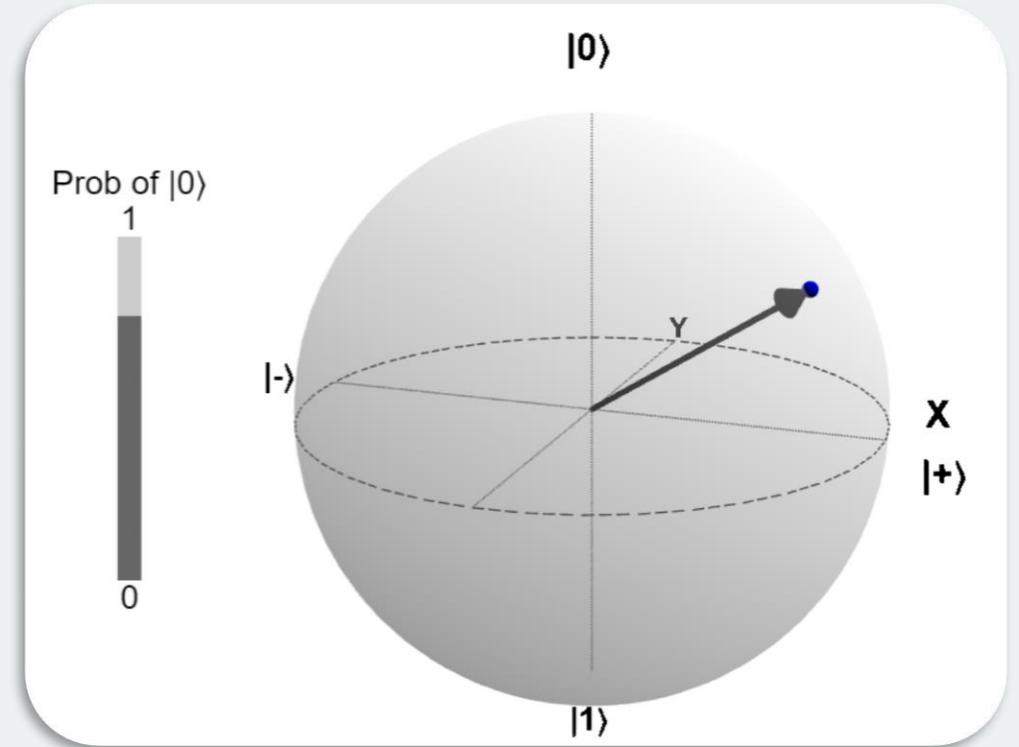
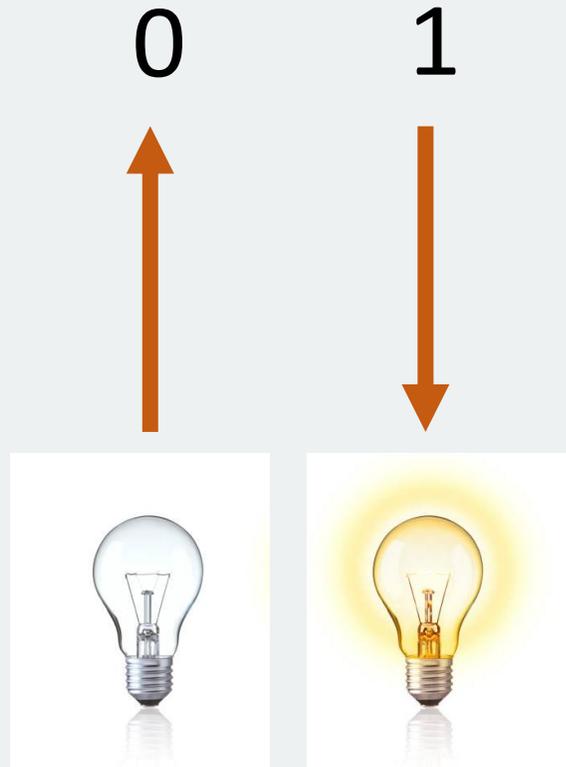


COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

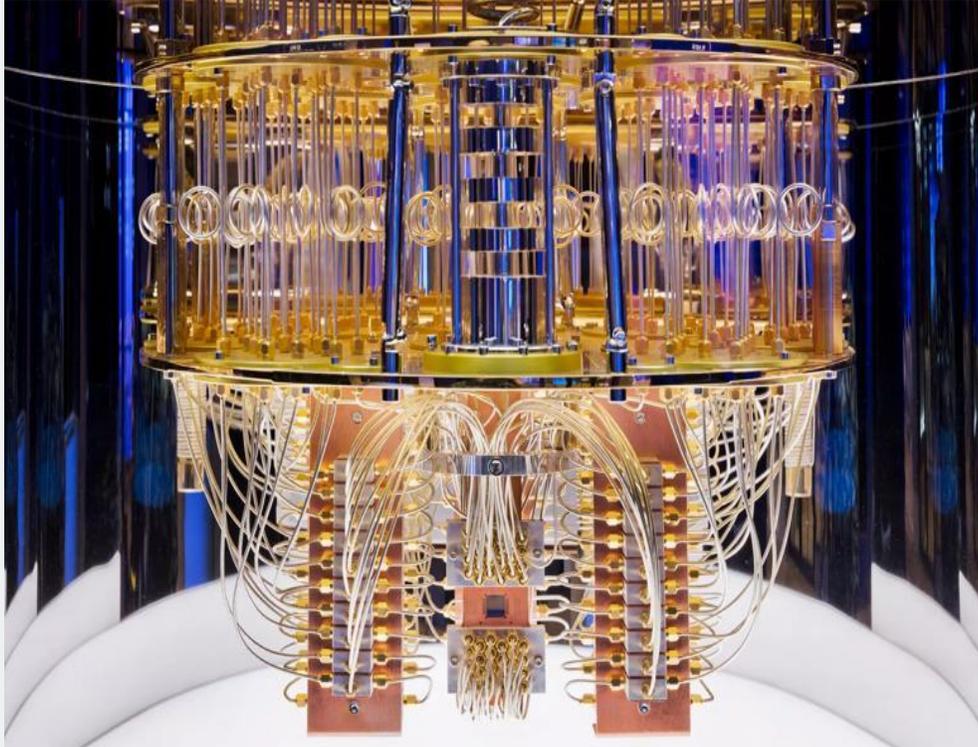
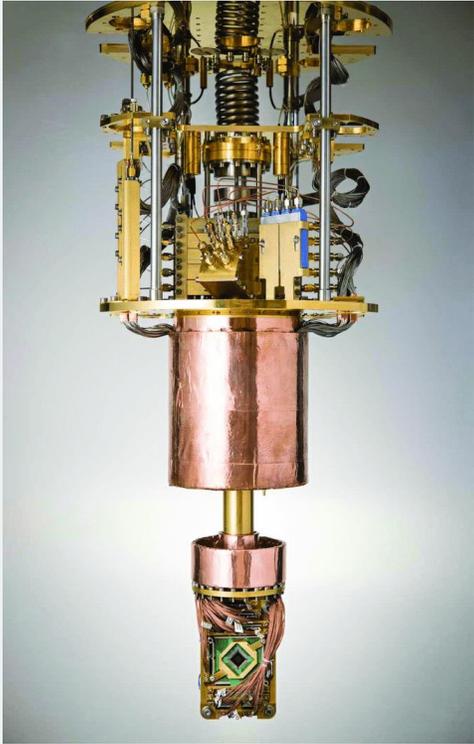
Definición

Forma de computación que se basa en las reglas de la **física cuántica** para **resolver problemas**.

Unidad básica de información



Ordenadores cuánticos reales



El teorema de la no clonación

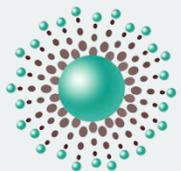
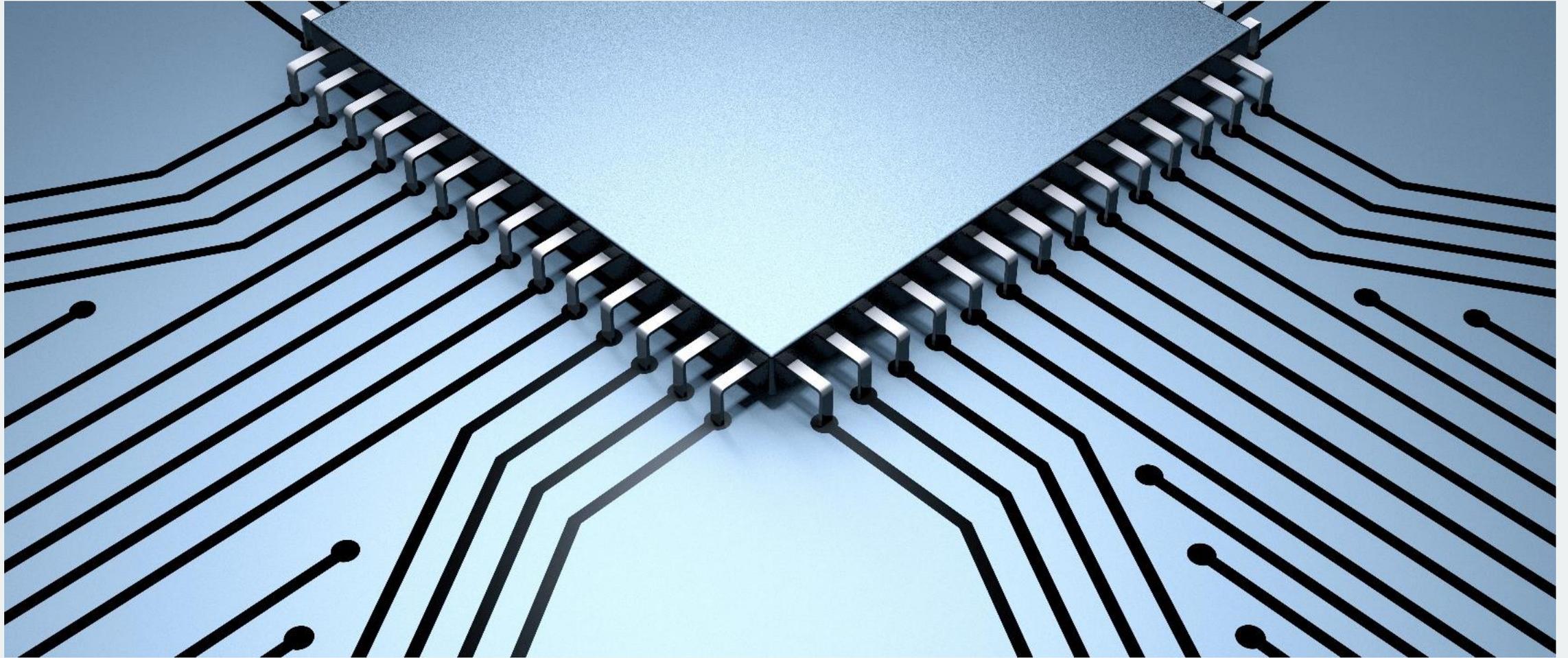
La cantidad de información que pueda conocerse del sistema es limitada, a diferencia de la física clásica, siempre puedes conocer el sistema si eres capaz de medir todas sus propiedades. El teorema de no clonación **prohíbe la creación de copias idénticas de un estado cuántico arbitrario.**

$$\text{Sea } U (|\Psi\rangle |0\rangle) = |\Psi\rangle|\Psi\rangle$$

$$U (\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)) = \frac{1}{\sqrt{2}} (U|00\rangle + U|10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

$$U (\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) |0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{2} [|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle]$$

PUERTAS CUÁNTICAS

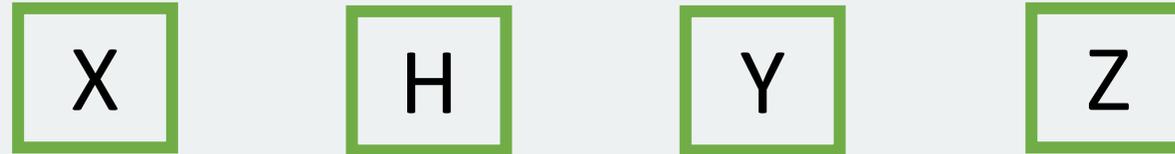


Elementos

Qubit $|q\rangle$



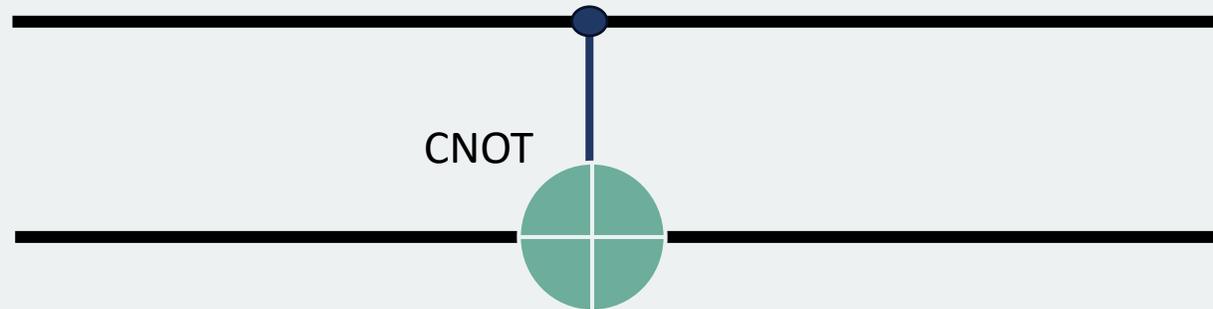
Puertas



Puertas múltiples

$|q_0\rangle$

$|q_1\rangle$



$$\text{Si } |q_0\rangle = |0\rangle \rightarrow |q_1\rangle = |q_1\rangle$$

$$\text{Si } |q_0\rangle = |1\rangle \rightarrow |q_1\rangle = X|q_1\rangle$$

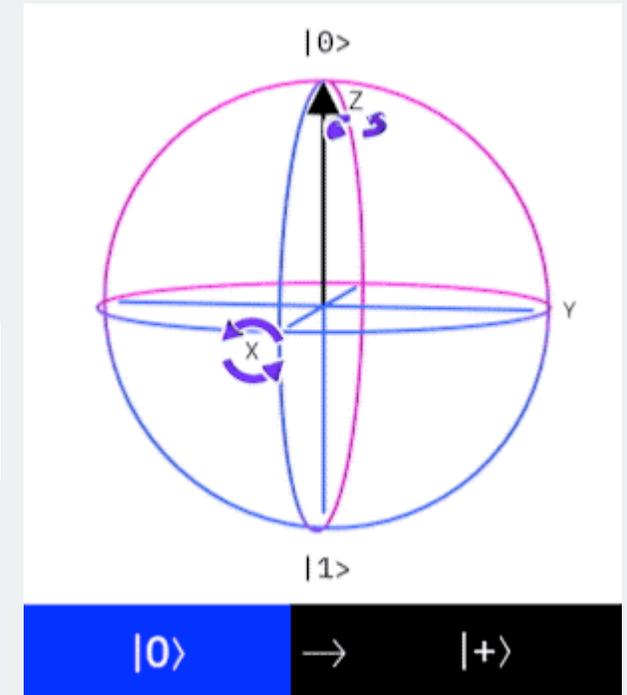
Puertas cuánticas

Se utilizan herramientas matemáticas llamadas puertas cuánticas. Las **puertas** se representan con **matrices**, y **aplicarlo a un estado** es **multiplicar** esa matriz por el estado.

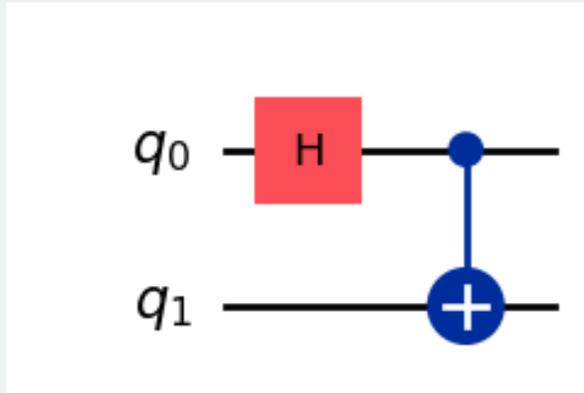
$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Ejemplo: quiero mover el estado bombilla apagada al estado mezcla de estar encendida y apagada.

Estado	$ 0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	}	$H \cdot 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (0\rangle + 1\rangle)$
Puerta H	$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$		



➤ Entrelazamiento



Estados iniciales

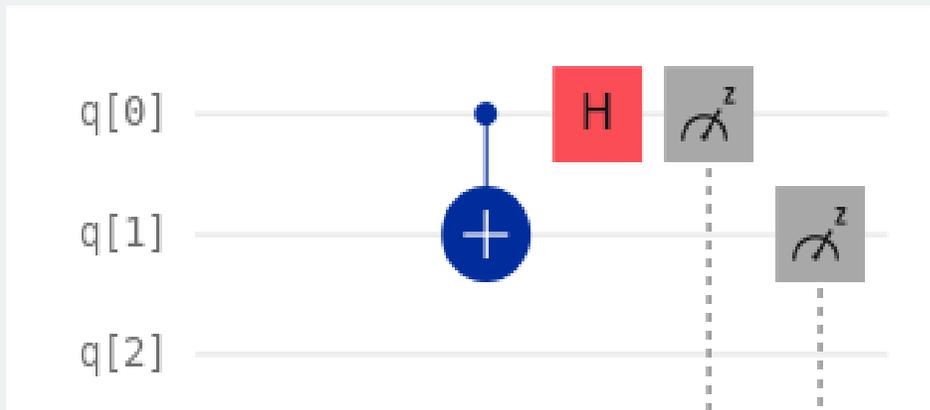
$$|q_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$|q_1\rangle = |0\rangle$$

Estado final del sistema

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

➤ Teleportación



Estados iniciales

$$|q_0\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

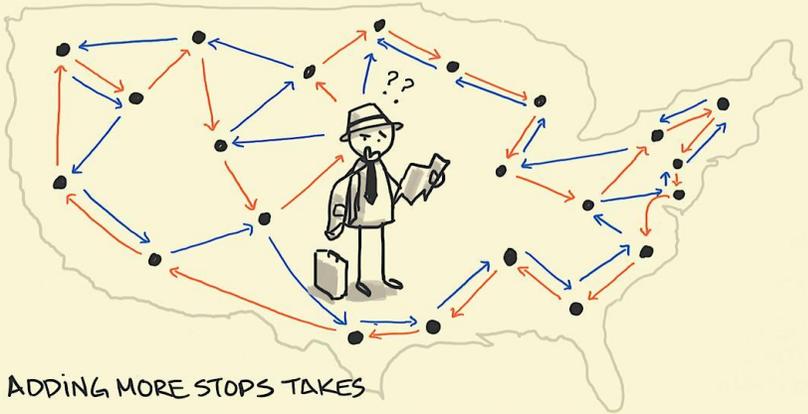
$$|q_1q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Estado final del qubit 2

$$|q_2\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

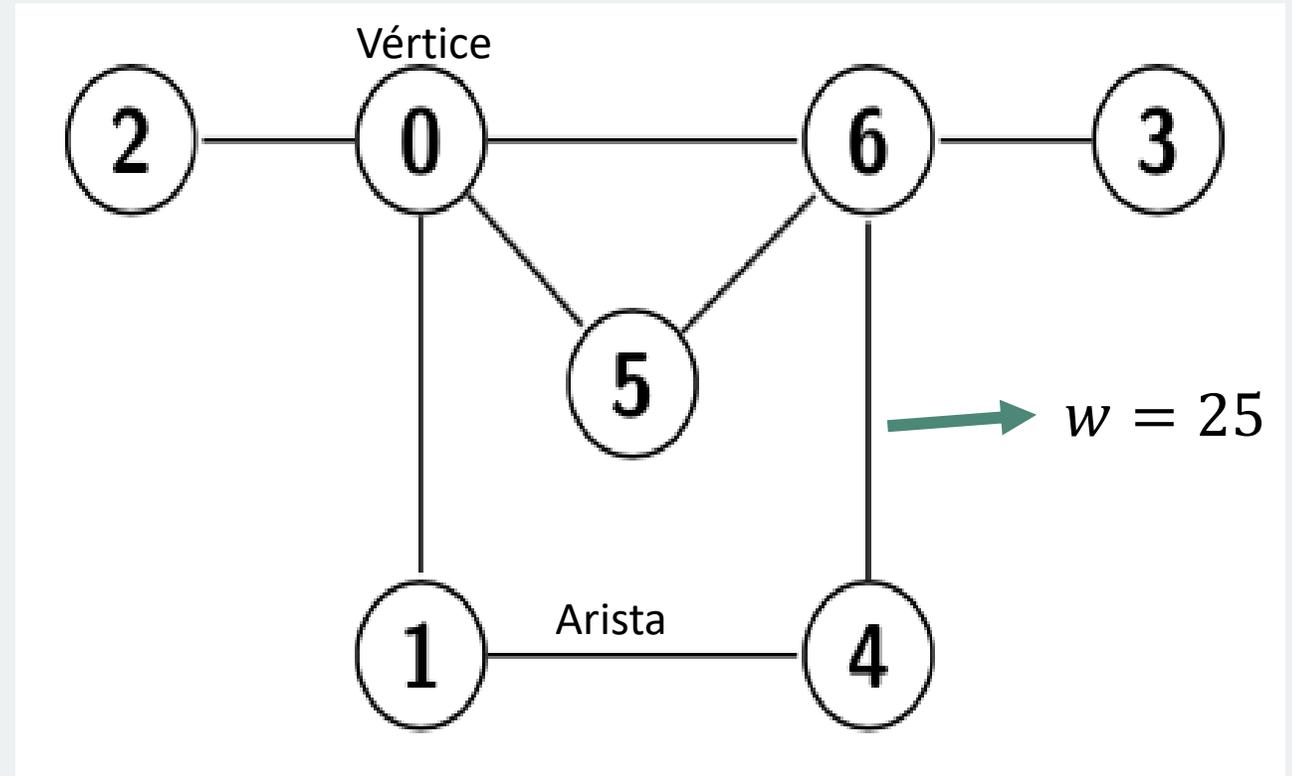
VIAJANTE DE COMERCIO

THE TRAVELLING SALESMAN PROBLEM
WHAT'S THE SHORTEST ROUTE TO VISIT ALL LOCATIONS AND RETURN?



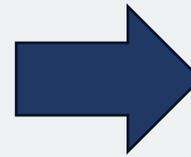
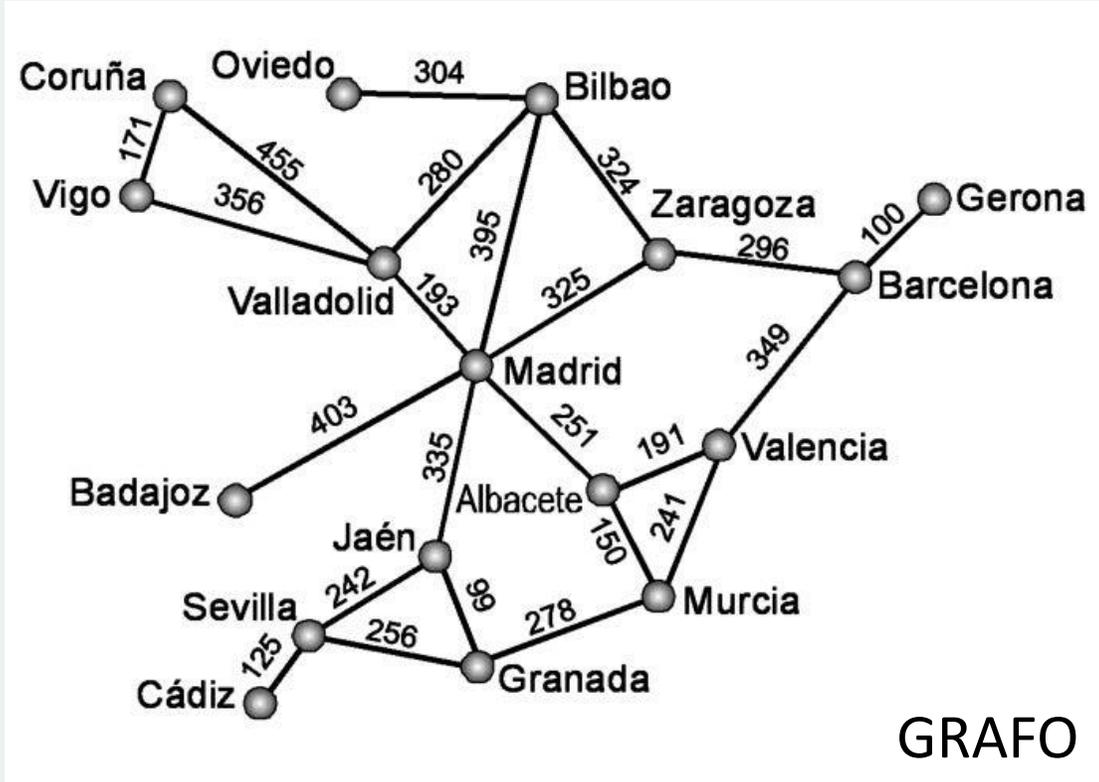
ADDING MORE STOPS TAKES LONGER AND LONGER AND LONGER TO FIGURE IT OUT

sketchplanations



Estructura de grafo

Hay que traducir el problema al lenguaje de las matemáticas, en este caso, un problema de optimización



Viajante de comercio

Problema de optimización

Problema QUBO

(Quadratic Unconstrained Binary Optimization)

Es un tipo de problema de optimización donde se busca **minimizar o maximizar** una función **cuadrática** de **variables binarias**: solo pueden tomar los valores 0 o 1.

$$f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 + 2x_1x_2$$

Ejemplo

$$f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 + 2x_1x_2$$

Selección de tareas:

- Si $x_1 = 1 \rightarrow$ Hacer ejercicio por la mañana.
- Si $x_2 = 1 \rightarrow$ Leer un libro por la mañana.

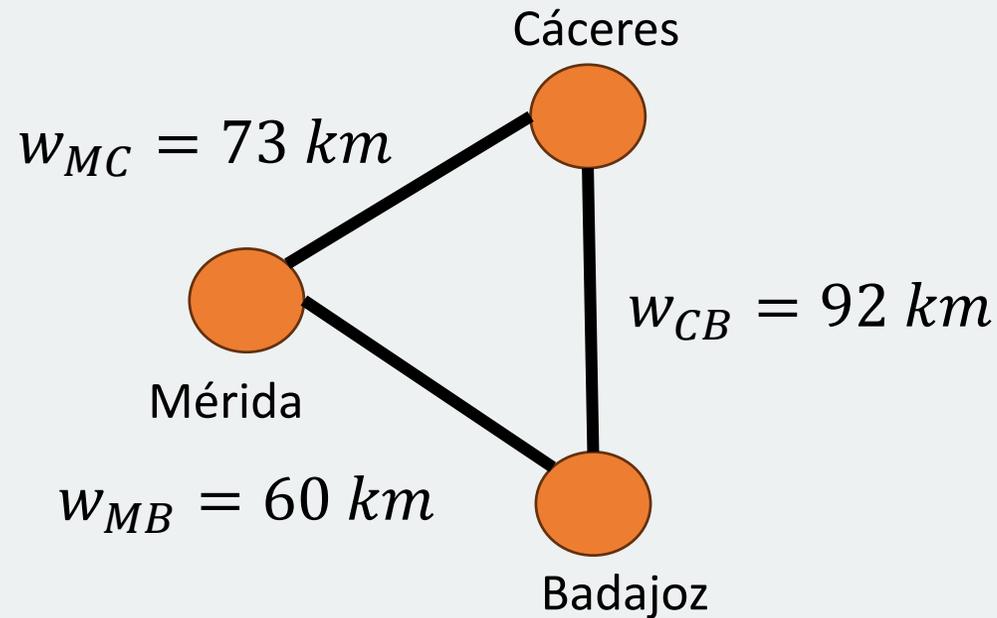
Leer y hacer ejercicio: $f(1,1) = 4$

Leer o hacer ejercicio $f(1,0) = f(0,1) = 1$

Estar en el sofá $f(0,0) = 0$

1^{er} paso: Definición de elementos

w_{jk} : distancia entre las ciudades j, k



$x_{jl} = 1$ si en la posición l del recorrido se visita la ciudad j

$x_{jl} = 0$ si no es así

Coste total del recorrido: suma de distancias w_{jk} entre las ciudades j y k , multiplicado por variables binarias x_{jl} , que indican si la ciudad j se visita en la posición l .

$$\sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^m w_{jk} x_{jl} x_{kl+1}$$

$$m = n - 1$$

$$n = n^{\circ} \text{ ciudades}$$

Se usan **dos variables** $x_{jl} x_{kl+1}$ para representar el hecho de pasar de la ciudad j a la ciudad k en **posiciones consecutivas** del recorrido.

El **producto** $x_{jl} x_{kl+1} = 1$ **solo si** la ciudad j está en la posición l y la ciudad k está justo después, en la posición $l + 1$.

2º paso: Restricciones

- Cada **ciudad** se visita **una sola vez**

$$\sum_{l=0}^m x_{jl} = x_{M\u00e9rida,0} + x_{M\u00e9rida,1} + x_{M\u00e9rida,2} = 1$$

- En **cada posición** del recorrido haya **una \u00fanica ciudad**

$$\sum_{j=0}^m x_{jl} = x_{M\u00e9rida,0} + x_{Badajoz,0} + x_{C\u00e1ceres,0} = 1$$

3^{er} paso: Ecuación final

$$f = \sum_{l=0}^{m-1} \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^m w_{jk} x_{jl} x_{kl+1} + B \sum_{j=0}^m \left(\sum_{l=0}^m x_{jl} - 1 \right)^2 + B \sum_{l=0}^m \left(\sum_{j=0}^m x_{jl} - 1 \right)^2$$

Coste del recorrido

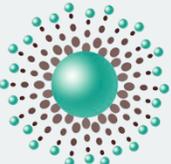
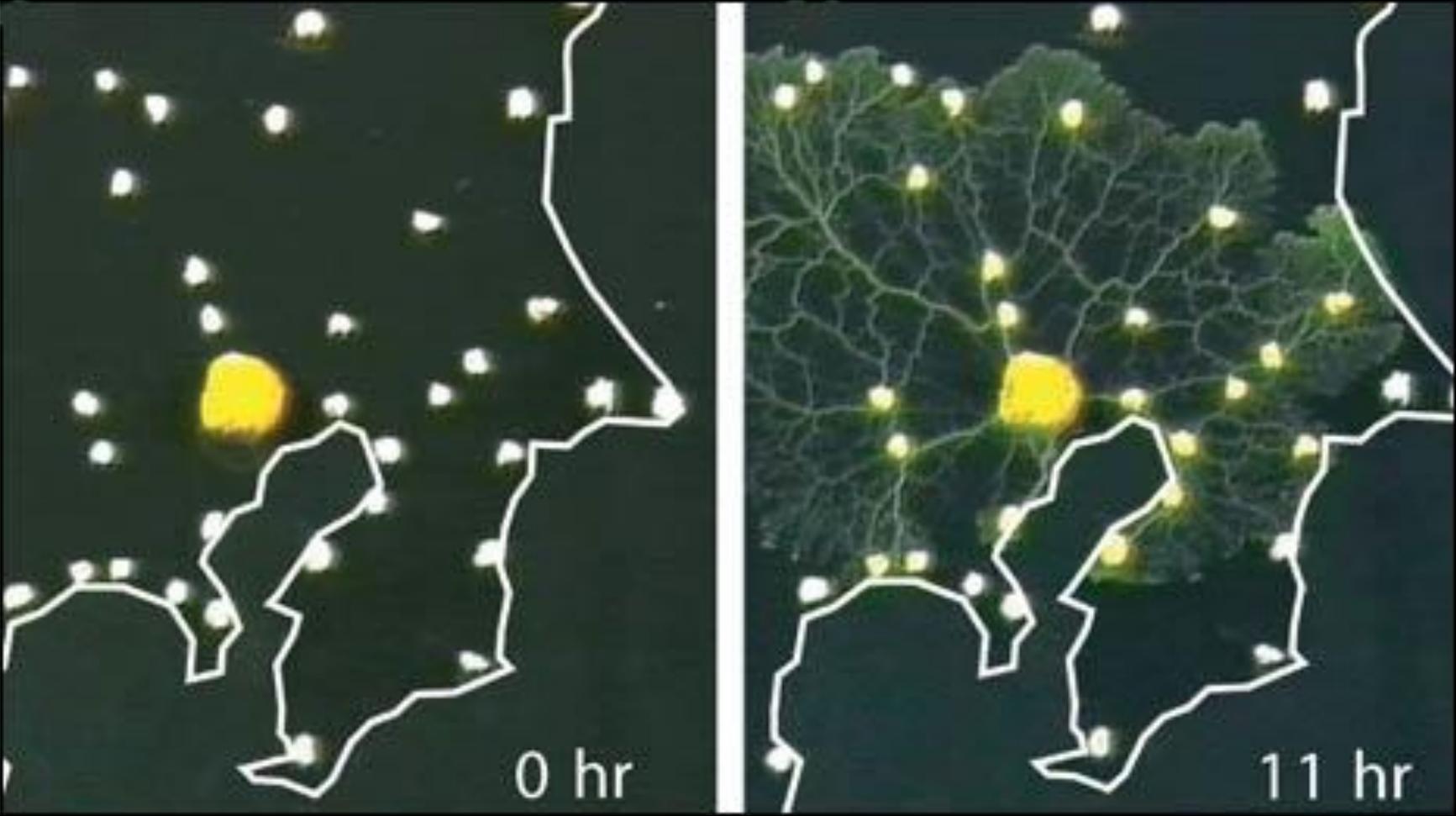
Cada ciudad una vez

En cada posición, una ciudad

B se elige tal que garantice que cualquier solución inválida (que no cumpla con las restricciones) tendrá un coste mayor que cualquier solución válida

$$B = 1 + \sum_{j,k=0}^m w_{jk}$$

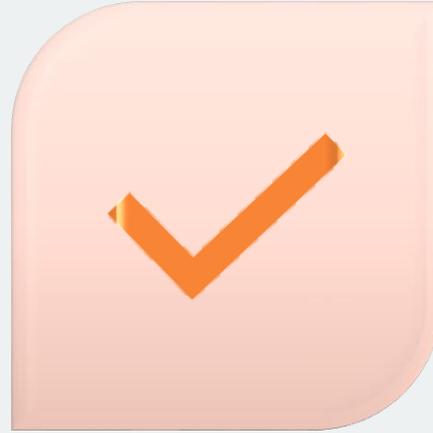
Ciudades que rodean Tokio. El hongo optimiza la ruta.



Resumen



Establecer la **ecuación coste** a minimizar

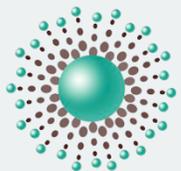
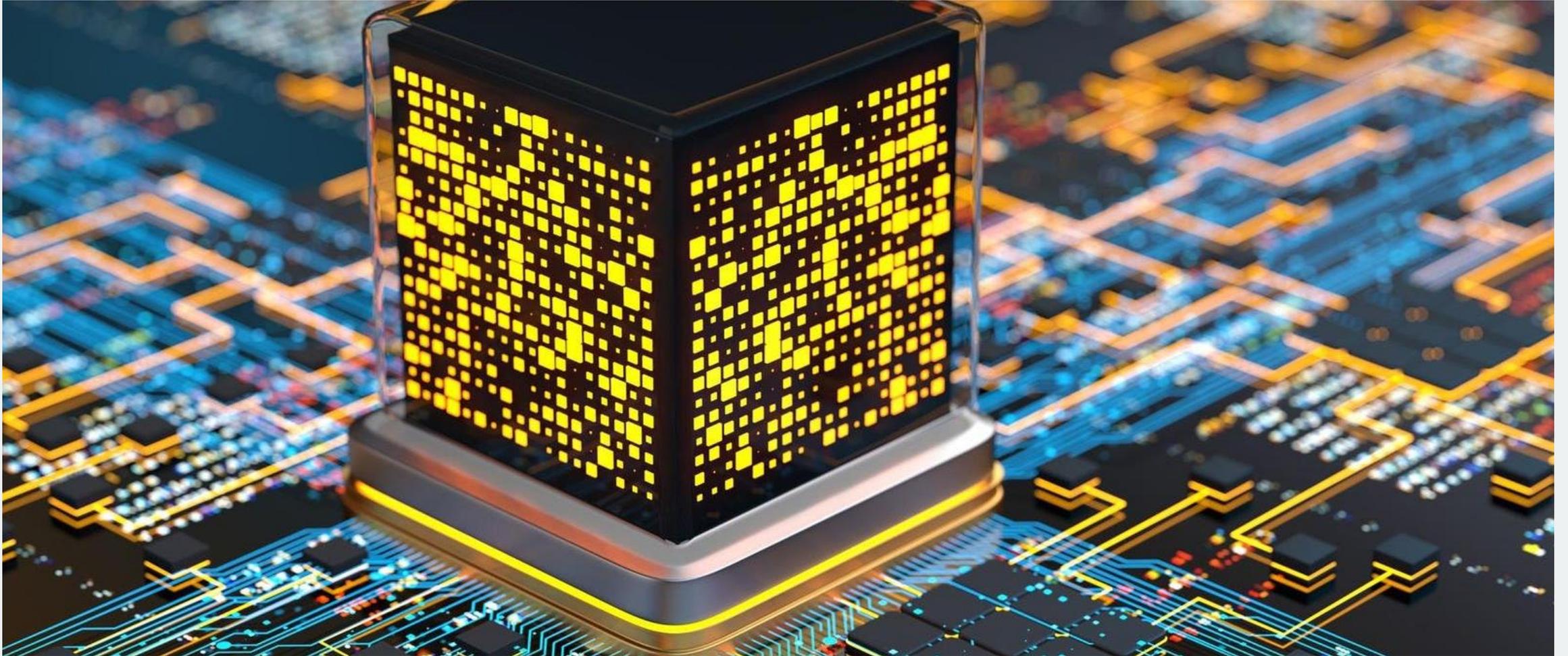


Definir las **restricciones**



Escribir la ecuación final en **formato QUBO**

ANNEALERS



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

Annealers

Ordenador cuántico basado en la **evolución adiabática** de un **sistema de qubits** cuya **disposición** representa el problema de optimización que se quiera resolver.

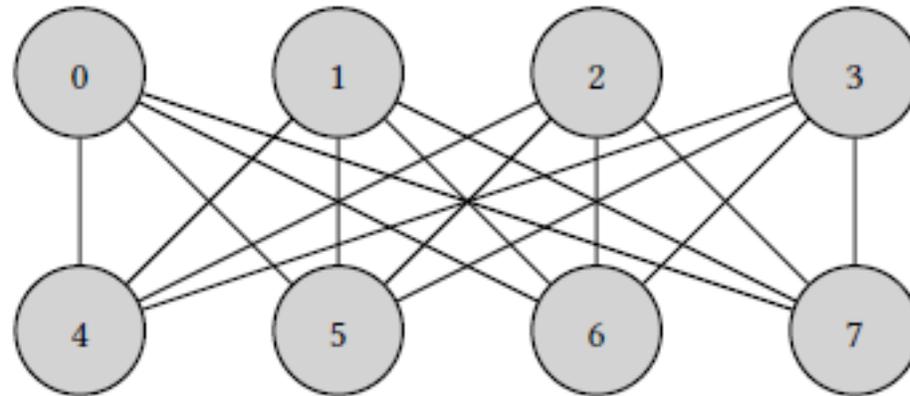


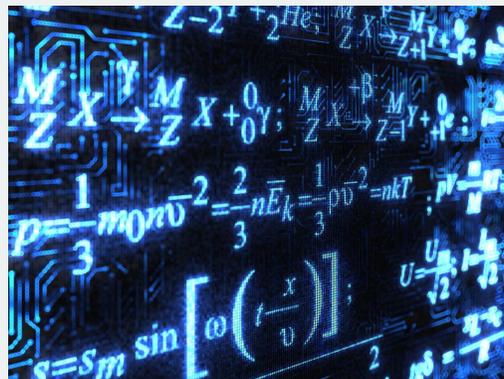
Figure 4.1: Qubit connections in a Chimera cell



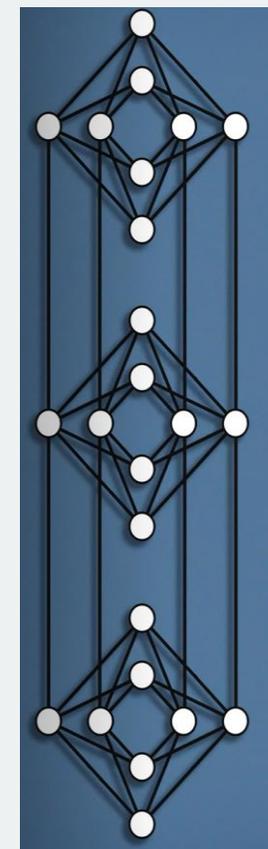
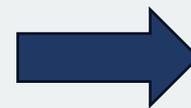
Viajante de comercio



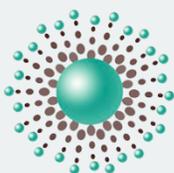
Grafo



Ecuaciones

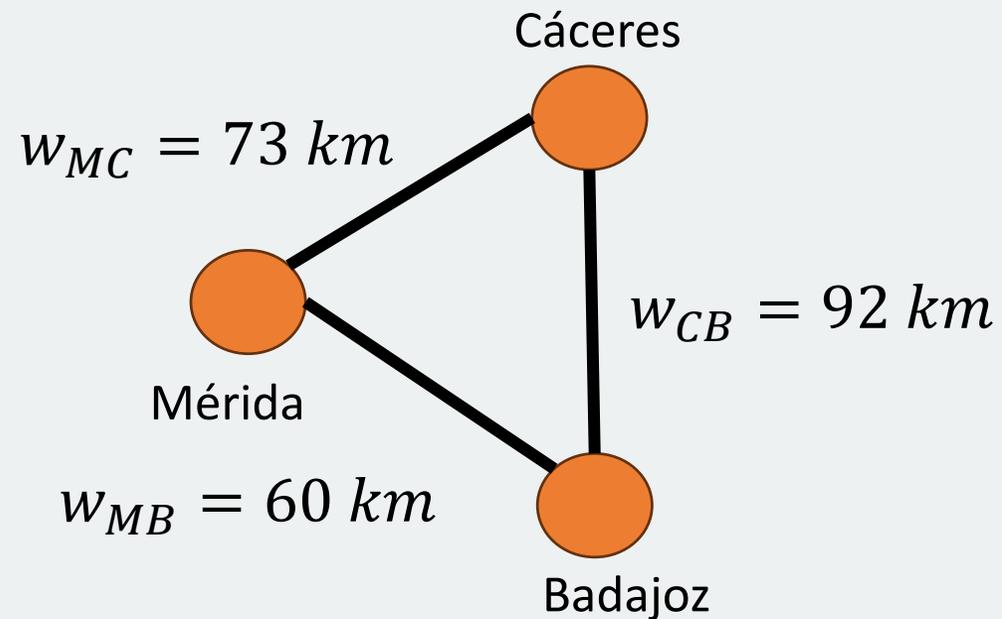


Distribución de qubits en un annealer



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

Se define el Hamiltoniano que represente nuestro problema y tenga carácter físico para trasladarlo al conjunto de qubits del annealer:



$$H = 73x_0x_1 + 92x_1x_2 + 60x_2x_0$$

Hamiltoniano

El **Hamiltoniano** es una función matemática que describe la **energía total** de un sistema físico o modelo computacional. Para un problema de optimización binaria, el Hamiltoniano H puede ser:

$$H = \sum_i h_i x_i + \sum_{i < j} J_{ij} x_i x_j$$

Minimizar H equivale a encontrar la mejor combinación de variables que resuelve el problema → MINIZAMOS EL COSTE DEL RECORRIDO DEL VIAJANTE



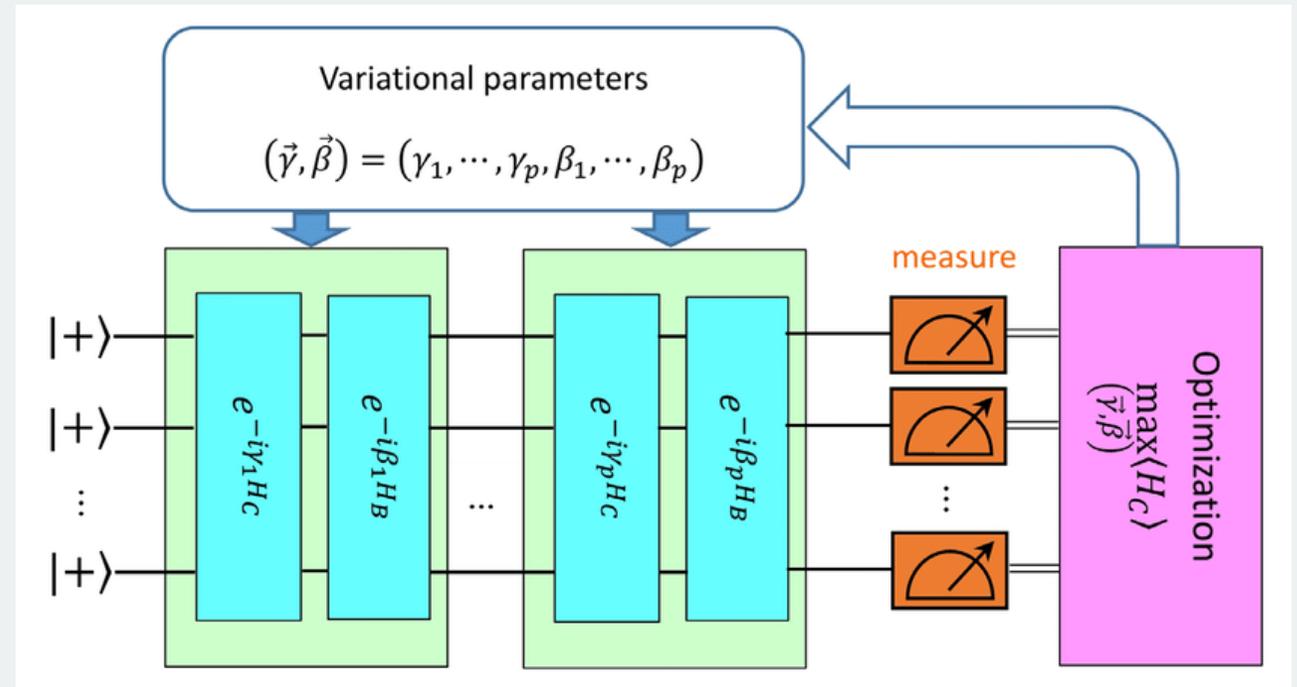
El sistema de qubits **evoluciona** adiabáticamente desde H_0 (estado inicial conocido) a H_1 (estado final de interés). Después, se **mide**. El **resultado** de la medición devolverá el estado fundamental asociado a H_1 , que coincide con la **solución** a nuestro **problema de optimización**.

Resumen

- Definición del problema: viajante de comercio.
- Se formula como un problema QUBO: ecuación.
- Se define el Hamiltoniano que representa el problema QUBO.
- Se disponen los qubits del annealer siguiendo el Hamiltoniano.
- Se mide para obtener la solución del problema.

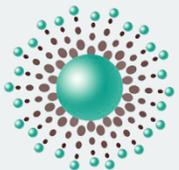
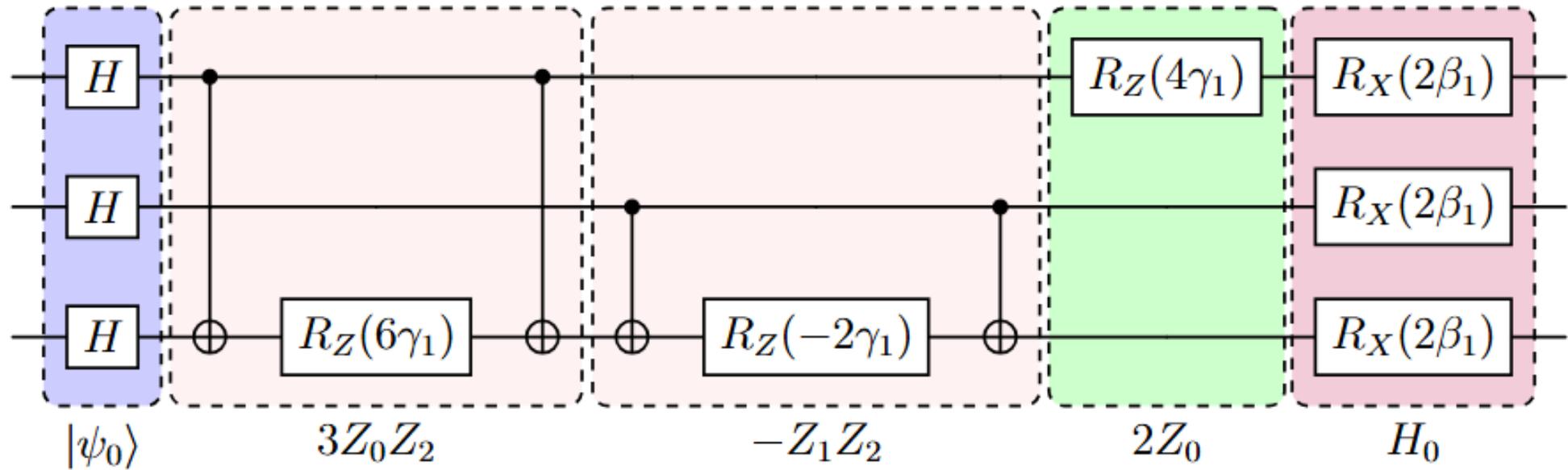
QAOA (Quantum approximate optimization algorithm)

1. **Traducción** de un problema QUBO a un ordenador cuántico basado en puertas.
2. Se **discretiza el Hamiltoniano** para pasar de una evolución continua a pasos discretos mediados por los parámetros α y β .
3. Se mide el sistema y se **ajustan parámetros clásicamente** para mejorar la solución en iteraciones sucesivas.



Ejemplo QAOA

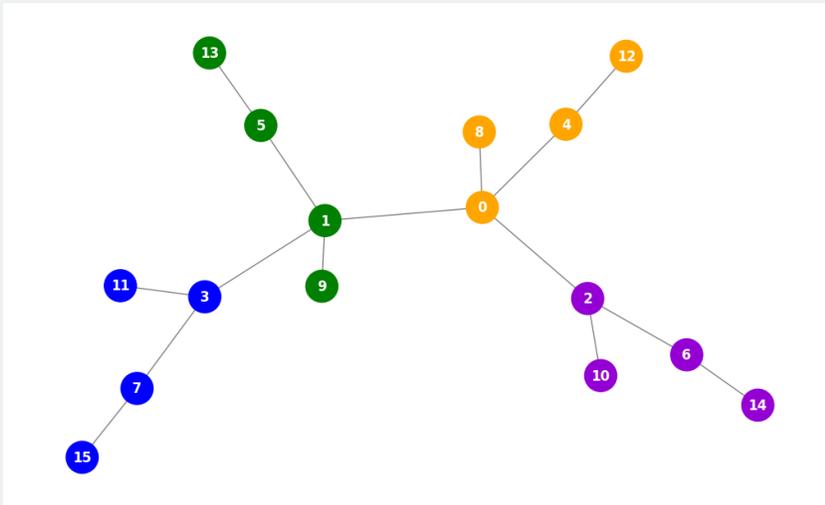
EJEMPLO: $H = H_0 + H_1 = -\sum_j X_j + 3Z_0Z_2 - Z_1Z_2 + 2Z_0$, con $p = 1$:



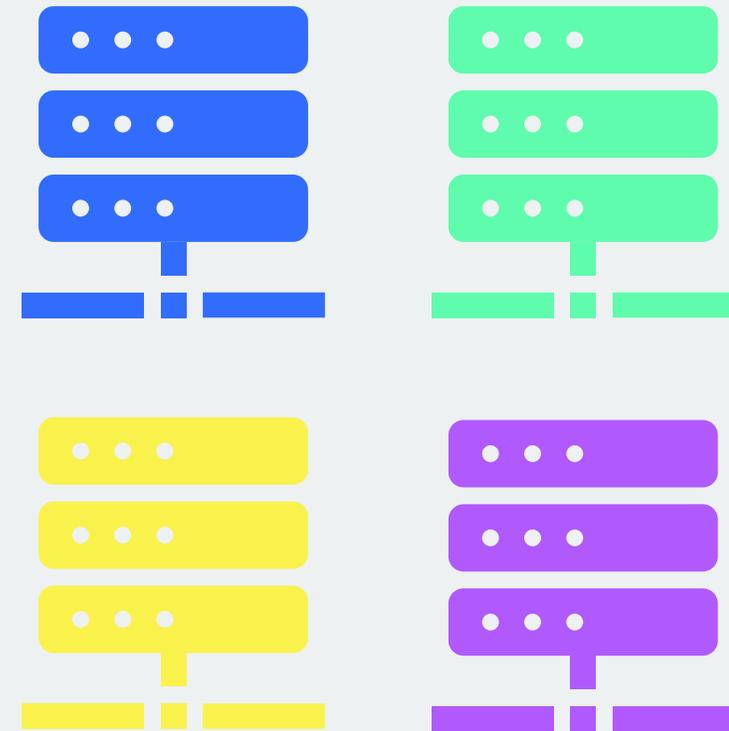
RESULTADOS: Computación distribuida

Objetivo: los procesos de una aplicación se distribuyan entre nodos de la forma óptima.

Aplicación



Nodos



Ecuaciones asociadas

Objective: minimize $\sum_{(i,j)} \sum_p x_{(i,p)} + x_{(j,p)} - 2 * x_{(i,p)} * x_{(j,p)}$

Función coste a minimizar

Constraint 1: $\sum_k x_{(i,p)} = 1$, for each node i

Cada proceso en un nodo

Constraint 2: $\sum_i x_{(i,p)} = N/k$, for each partition p .

Todos los nodos tengan el mismo numero de procesos

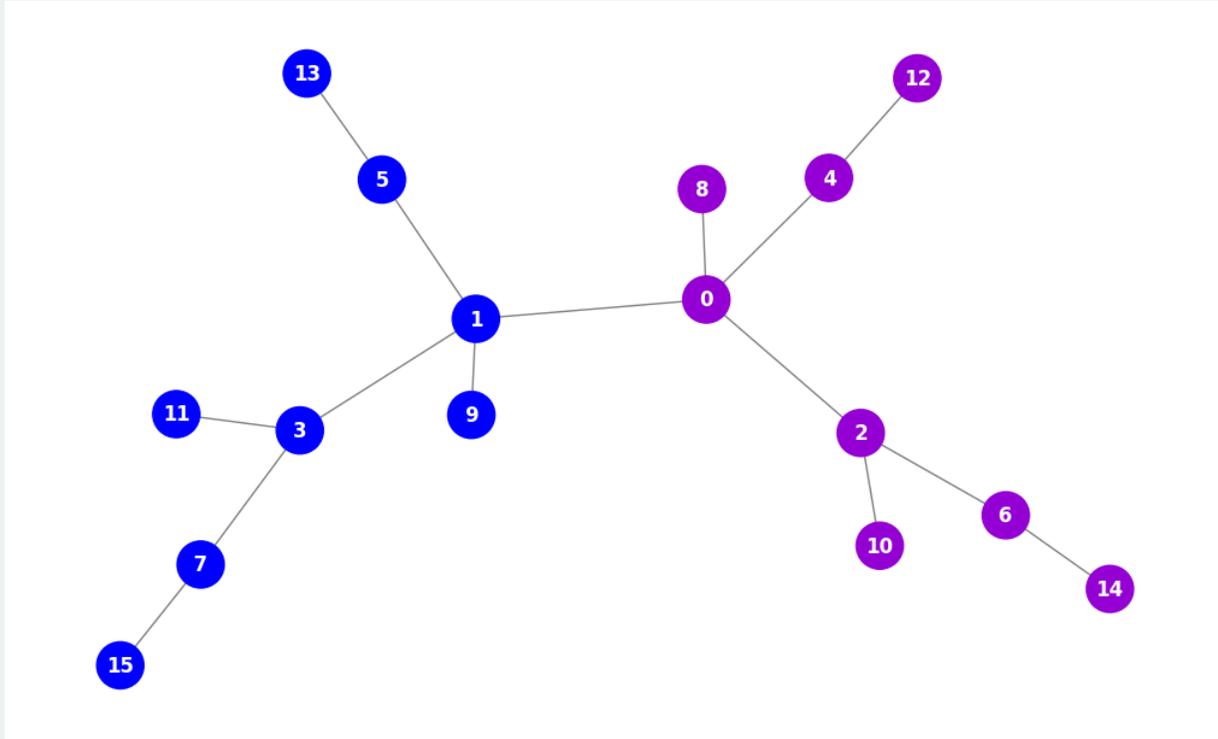


TABLE 1. Binomial graph $n = 16, m = 2$

$m = 0$	0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14
$m = 1$	1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15

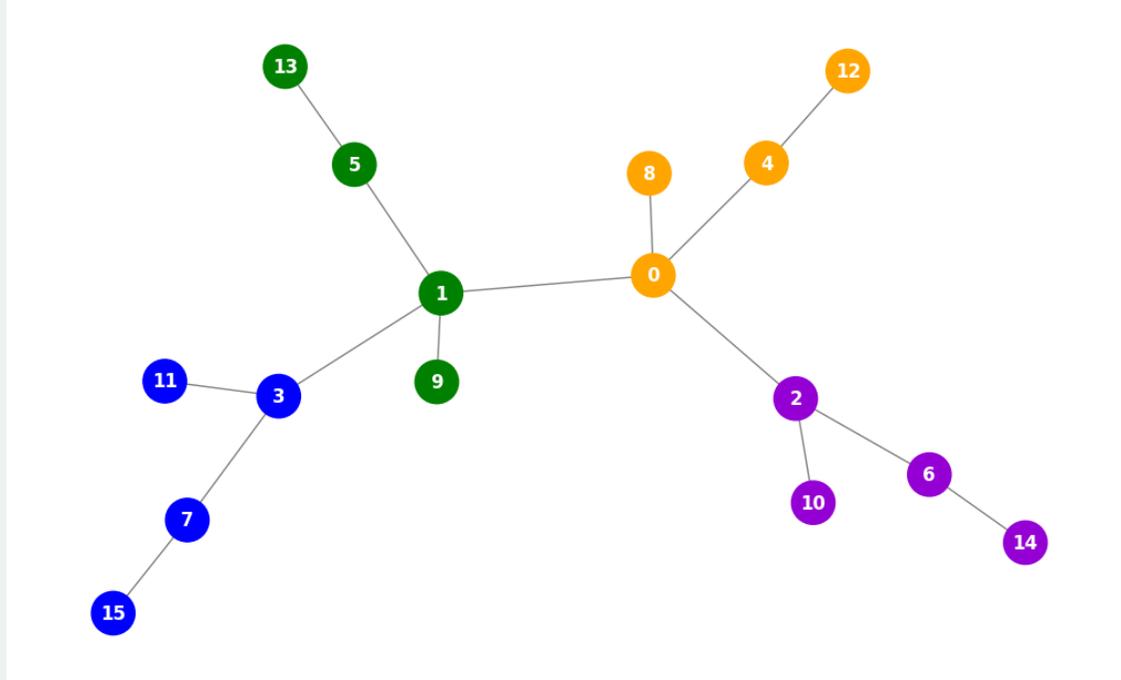


TABLE 2. Binomial graph $n = 16, m = 4$

$m = 0$	3, 7, 11, 15
$m = 1$	2, 6, 10, 14
$m = 2$	1, 5, 9, 13
$m = 3$	0, 4, 8, 12

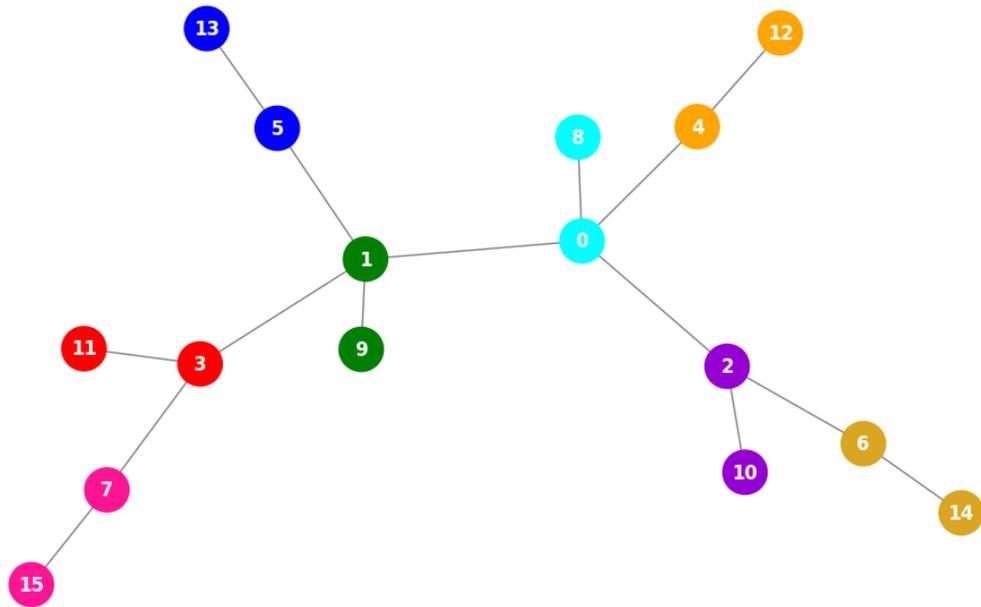


TABLE 3. Binomial graph $n = 16, m = 8$

$m = 0$	4, 12
$m = 1$	6, 14
$m = 2$	2, 10
$m = 3$	7, 15
$m = 4$	0, 8
$m = 5$	1, 9
$m = 6$	3, 11
$m = 7$	5, 13

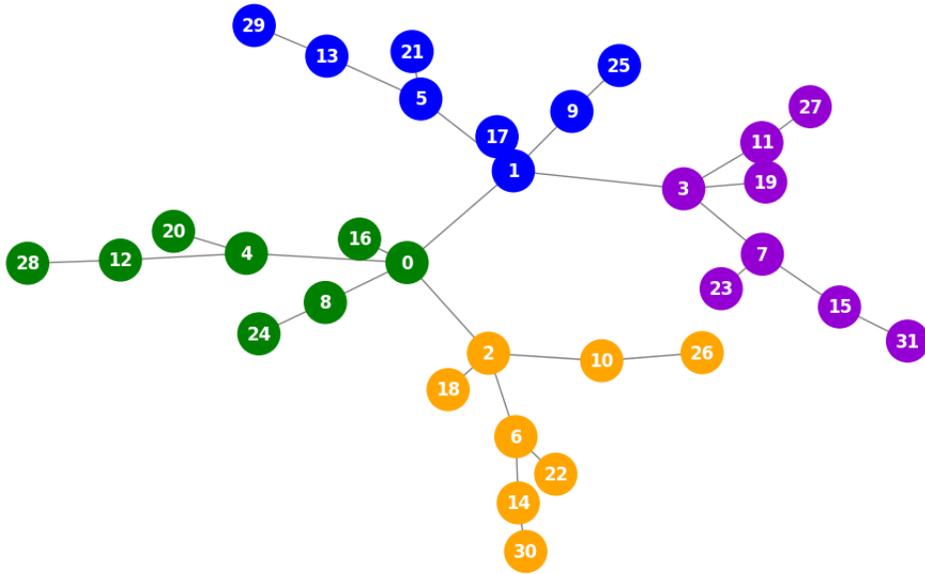


TABLE 4. Binomial graph $n = 32, m = 4$

$m = 0$	1, 5, 9, 13, 17, 21, 25, 29
$m = 1$	3, 7, 11, 15, 19, 23, 27, 31
$m = 2$	0, 4, 8, 12, 16, 20, 24, 28
$m = 3$	2, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30

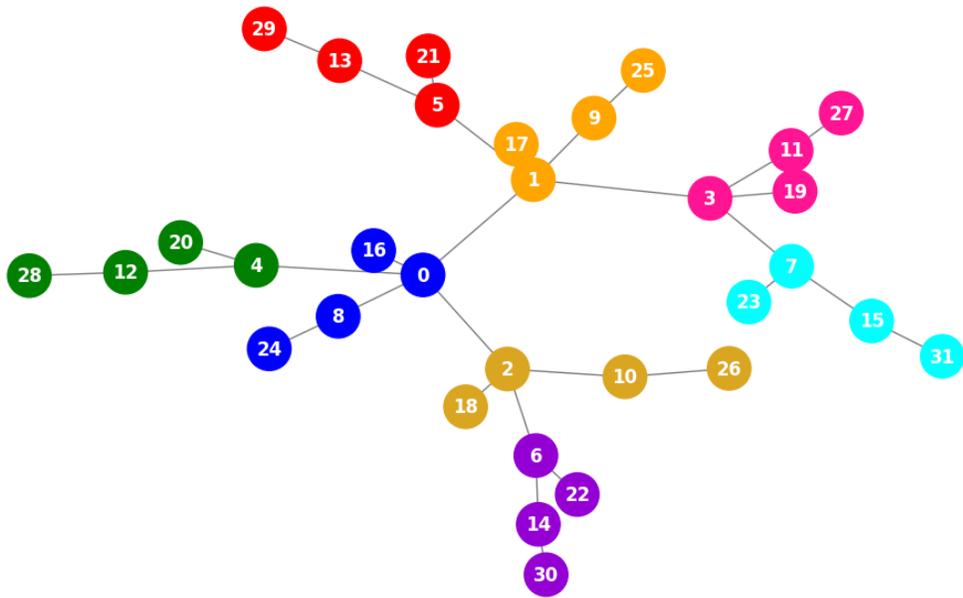


TABLE 5. Binomial graph $n = 32, m = 8$

$m = 0$	0, 8, 16, 24
$m = 1$	6, 14, 22, 30
$m = 2$	4, 12, 20, 28
$m = 3$	1, 9, 17, 25
$m = 4$	5, 13, 21, 29
$m = 5$	7, 15, 23, 31
$m = 6$	2, 10, 18, 26
$m = 7$	3, 11, 19, 27

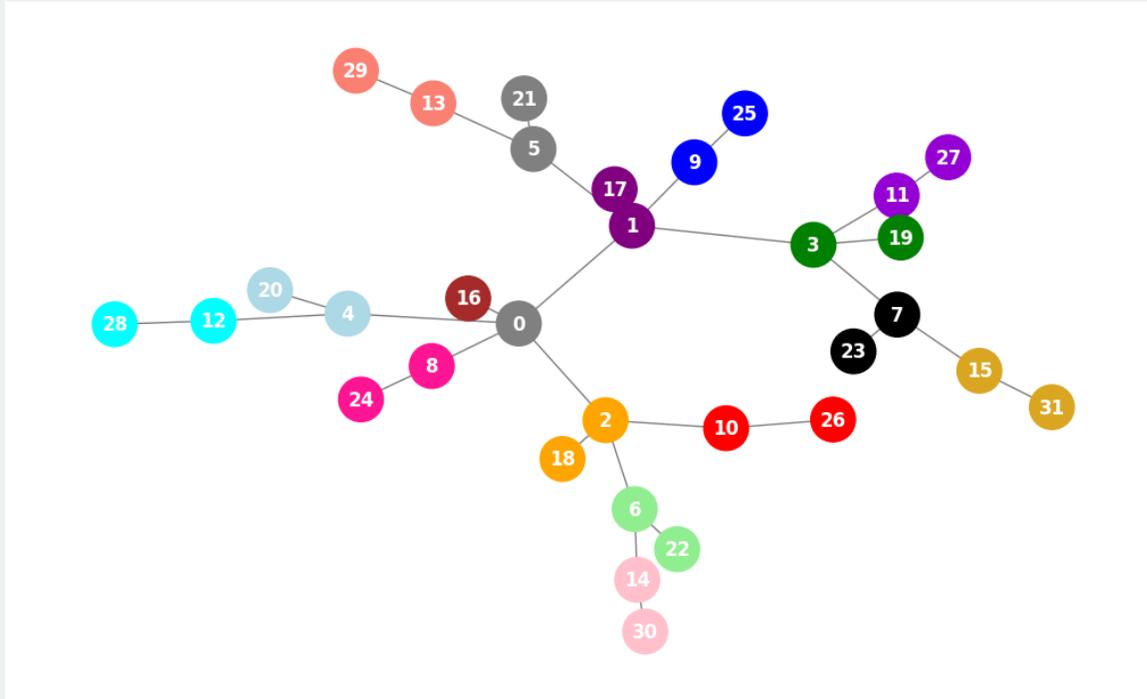


TABLE 6. Binomial graph $n = 32, m = 16$

$m = 0$	9, 25
$m = 1$	11, 27
$m = 2$	3, 19
$m = 3$	2, 18
$m = 4$	10, 26
$m = 5$	12, 28
$m = 6$	15, 31
$m = 7$	8, 24
$m = 8$	4, 20
$m = 9$	6, 22
$m = 10$	13, 29
$m = 11$	1, 17
$m = 12$	16
$m = 13$	14, 30
$m = 14$	5, 21
$m = 15$	7, 23

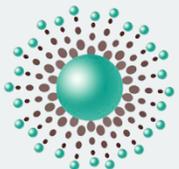
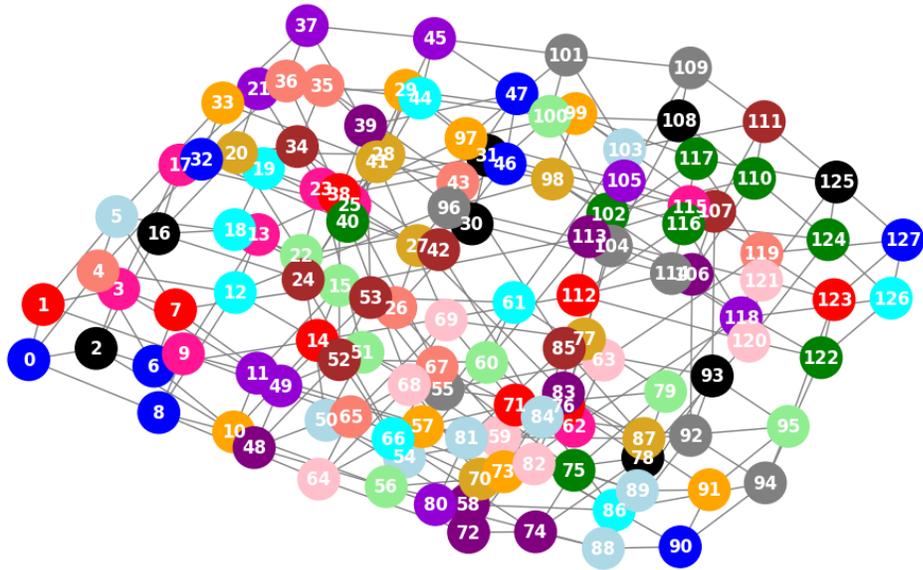


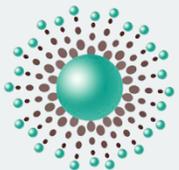
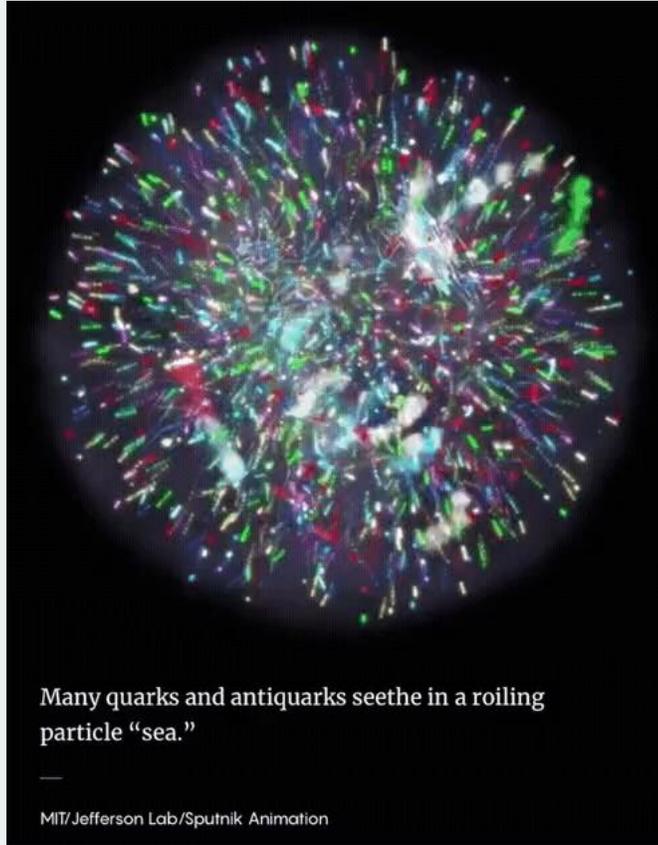
TABLE 7. Binomial graph $n = 128, m = 16$

$m = 0$	0, 6, 8, 32, 46, 47, 90, 127
$m = 1$	11, 21, 37, 45, 49, 80, 105, 118
$m = 2$	40, 75, 102, 110, 116, 117, 122, 124
$m = 3$	10, 29, 33, 57, 73, 91, 97, 99
$m = 4$	1, 7, 14, 38, 71, 76, 112, 123
$m = 5$	12, 18, 19, 44, 61, 66, 86, 126
$m = 6$	20, 27, 28, 41, 70, 77, 87, 98
$m = 7$	3, 9, 13, 17, 23, 25, 62, 115
$m = 8$	5, 50, 54, 81, 84, 88, 89, 103
$m = 9$	15, 22, 51, 56, 60, 79, 95, 100
$m = 10$	4, 26, 35, 36, 43, 65, 67, 119
$m = 11$	39, 48, 58, 72, 74, 83, 106, 113
$m = 12$	24, 34, 42, 52, 53, 85, 107, 111
$m = 13$	59, 63, 64, 68, 69, 82, 120, 121
$m = 14$	55, 92, 94, 96, 101, 104, 109, 114
$m = 15$	2, 16, 30, 31, 78, 93, 108, 125



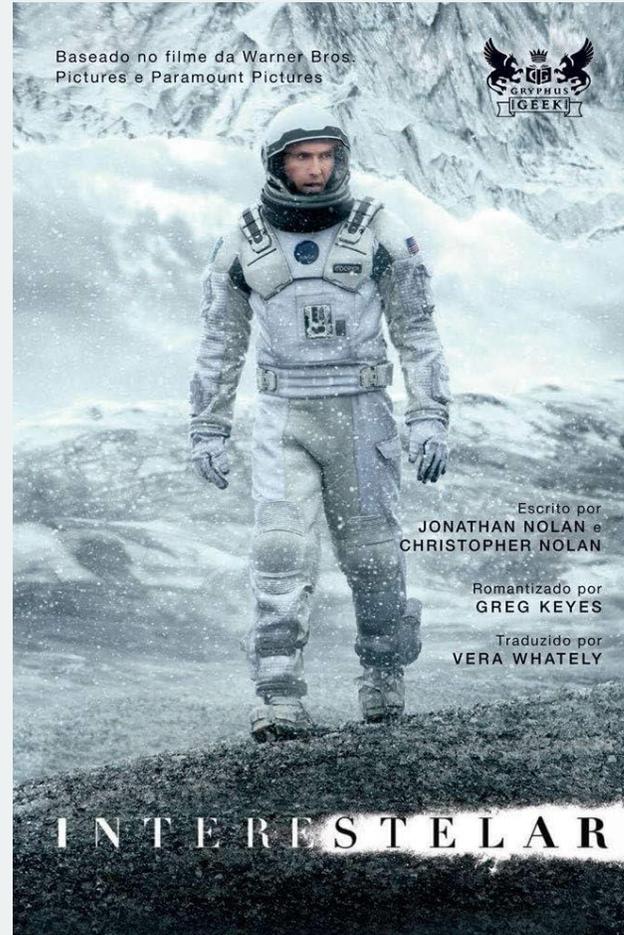
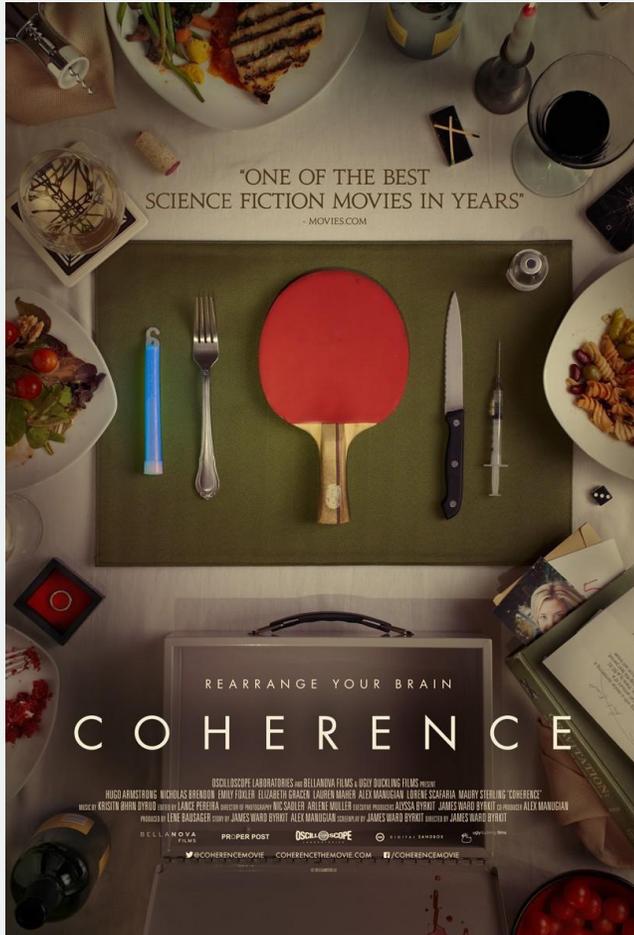
Más allá del núcleo atómico

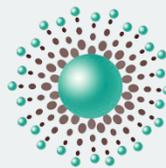
El vacío no está vacío



COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center

DIVULGACIÓN





COMPUTAEX
Extremadura Supercomputing
Center



@cenits



Fundación
COMPUTAEX



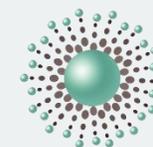
Fundación
COMPUTAEX

Paloma Rodríguez Oliver

paloma.rodriguez@computaex.es



Quantum
SPAIN



COMPUTAEX

Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"

JUNTA DE EXTREMADURA

Consejería de Educación, Ciencia y Formación Profesional
Secretaría General de Ciencia, Tecnología e Innovación



Unión Europea