(19) OFICINA ESPAÑOLA DE PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

(11) Número de publicación: **3 010 697**

(51) Int. CI.:

G06N 10/60 (2012.01)

(12) TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA T3

(86) Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **05.08.2022 PCT/EP2022/072120**

(87) Fecha y número de publicación internacional: **08.02.2024 WO24027933**

(96) Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **05.08.2022 E 22762023 (4)**

(97) Fecha y número de publicación de la concesión europea: **25.12.2024 EP 4341870**

(54) Título: **Método de computación cuántica para resolver problemas de optimización combinatoria**

(45) Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
04.04.2025

(73) Titular/es:

FRIEDRICH-ALEXANDER-UNIVERSITÄT ERLANGEN-NÜRNBERG (100.00%)
Schlossplatz 4
91054 Erlangen, DE

(72) Inventor/es:

HARTMANN, MICHAEL y
SCHMID, MATHIAS

(74) Agente/Representante:

DEL VALLE VALIENTE, Sonia

DESCRIPCIÓN

Método de computación cuántica para resolver problemas de optimización combinatoria

Campo de la invención

La presente invención se refiere a un método de computación cuántica para obtener una solución óptima de un problema de optimización combinatoria y a un sistema de computación cuántica correspondiente.

Antecedentes de la invención

Los problemas de optimización combinatoria se producen en muchas áreas de la industria y de la logística. Ejemplos típicos incluyen los problemas de máxima satisfacción (MaxSat), tal como el problema del vendedor ambulante, el problema del taller de trabajo o el problema de la programación de los empleados. Cada uno de estos problemas puede expresarse en la búsqueda de una cadena de bits, es decir, una secuencia de ceros y unos, que minimiza la función de coste del problema correspondiente. El número de cadenas de bits posibles crece exponencialmente con la longitud de la cadena de bits, lo que determina el tamaño del sistema. Por lo tanto, encontrar una solución exacta ya es inviable para sistemas de tamaño moderado. Sin embargo, las plataformas de procesamiento de información cuántica pueden ofrecer opciones para algoritmos que son más rápidos que los ordenadores clásicos.

Actualmente, se aplican dos enfoques principales para resolver problemas de optimización combinatoria.

Un primer enfoque se denomina recocido cuántico o computación cuántica adiabática.

En el recocido cuántico, la función de coste del problema se formula como un operador de Hamilton de mecánica cuántica cuyo estado fundamental corresponde a la solución del problema. El estado fundamental se prepara mediante un enfriamiento o una dinámica adiabática. Actualmente, hay dispositivos con varios miles de bits cuánticos (qubits) que implementan el recocido cuántico. Sin embargo, no está claro si los qubits de estos dispositivos funcionan correctamente, es decir, si hacen un uso real de las propiedades cuánticas.

Un segundo enfoque, el algoritmo de optimización aproximada cuántica (QAOA), tiene como objetivo generar el estado fundamental del operador de Hamilton a través de una secuencia de puertas cuánticas en un ordenador cuántico digital. Al hacerlo, se prepara un estado en forma de superposición mecánica cuántica de todas las cadenas de bits posibles y se utiliza una secuencia de compuertas parametrizada para filtrar los mejores candidatos para esta solución a partir de la superposición mecánica cuántica. La medición del valor esperado de energía en el estado preparado proporciona información sobre la proximidad del estado preparado al estado fundamental buscado. Esta información se aprovecha para optimizar los parámetros de la secuencia de puertas con el fin de maximizar la aproximación.

La desventaja de ambos métodos conocidos, el recocido cuántico y el QAOA, es que el procesador cuántico requiere tantos bits cuánticos como el número de bits de la cadena de bits. En el caso de que la secuencia de cadenas de bits comprenda cien ceros y unos, por ejemplo, encontrar la solución óptima requiere cien qubits. En la práctica, las aplicaciones relevantes en las industrias se basan en varios miles de variables binarias distintas, de modo que las cadenas de bits correspondientes comprenden varios miles de bits. Como consecuencia, el requisito del número de qubits de los métodos cuánticos conocidos es una fuerte limitación siempre que las plataformas de procesamiento de información cuántica comprendan mucho menos de miles de qubits que funcionen correctamente. El documento GARY J MOONEY Y OTROS: “Mapping NP-Hard Problems to Restricted Adiabatic Quantum Architectures”, ARXIV.ORG, CORNELL UNIVERSITY LIBRARY, 201 OLIN LIBRARY CORNELL UNIVERSITY ITHACA, NY 14853, 1 de noviembre de 2019, se refiere a un método de computación cuántica para obtener una solución óptima de un problema con múltiples variables discretas, en donde el problema se representa mediante una función de coste y se genera una estructura de grafos a partir de la función de coste.

Los ordenadores cuánticos actualmente solo comprenden alrededor de cien qubits o menos. Además, las puertas, es decir, el mecanismo para manipular los qubits, no son perfectas y el sistema de información cuántica es susceptible al ruido. En el desarrollo del hardware cuántico, la corrección de errores es un tema de investigación en curso que aún requerirá algún tiempo y se desconoce si alguna vez estarán disponibles ordenadores cuánticos con corrección total de errores y de un tamaño prácticamente relevante. La implementación de un único qubit con corrección de errores ya es muy compleja y requiere varios qubits. Por lo tanto, los ordenadores cuánticos con errores corregidos comprenden un número aún menor de qubits con errores corregidos.

Objeto de la invención

Por lo tanto, el objeto de la presente invención es proporcionar un método cuántico que permita encontrar soluciones para problemas de optimización combinatoria en aplicaciones prácticas en ordenadores cuánticos cuya capacidad está muy limitada con respecto al tamaño del problema.

Solución según la invención

La solución según la invención es un método de computación cuántica tal como se especifica en la reivindicación independiente 1. Realizaciones preferidas y/o ventajosas se especifican en las reivindicaciones dependientes.

En consecuencia, se proporciona un método de computación cuántica para obtener una solución óptima de un problema con múltiples variables discretas. El problema está representado por una función de coste. El método comprende:

- Generar una estructura de grafos a partir de la función de coste,

- Dividir la estructura de grafos en al menos dos estructuras de subgrafos disyuntivas, en donde cada estructura de subgrafos comprende un subconjunto de las múltiples variables discretas,

- Asignar cada estructura de subgrafos a una función de coste local representada como hamiltoniano de coste local,

- Determinar, para cada hamiltoniano de coste local, todos los estados propios correspondientes a una energía por debajo de una energía de corte predeterminada mediante un dispositivo de procesamiento cuántico, en donde cada variable del subconjunto de múltiples variables discretas esté representada por un qubit del dispositivo de procesamiento cuántico,

- Recombinar los estados propios determinados, y

- Aproximar un estado fundamental a partir de los estados propios recombinados, en donde el estado fundamental representa la solución óptima.

La etapa de aproximación a un estado fundamental puede ejecutarse varias veces.

La función de coste que representa el problema con múltiples variables discretas asigna un valor de coste a cada combinación de las múltiples variables discretas. Para los tamaños típicos de los problemas que ocurren en las industrias, es decir, miles o más variables discretas, hay tantas combinaciones posibles de variables que un cálculo de fuerza bruta, que determine todos los valores de coste posibles, es inviable, incluso en los sistemas de supercomputación más modernos.

Sin embargo, se encontró que la función de coste normalmente se puede representar en una estructura de grafos. Generar esta representación de la estructura del grafo tiene la ventaja de que se pueden aplicar métodos de agrupamiento al grafo para dividir la estructura del grafo y, por lo tanto, el tamaño del problema original en estructuras de subgrafos disjuntas más pequeñas. Cada estructura de subgrafos que comprende un subconjunto de las múltiples variables discretas se puede resolver de forma independiente. Por lo tanto, el método según la invención está adaptado para superar las limitaciones del hardware de procesamiento cuántico actual y a corto plazo. Si bien el problema original con la gran cantidad de variables discretas es demasiado grande para un hardware de procesamiento cuántico actual y a corto plazo, la división en subconjuntos más pequeños permite resolver cada uno de los subconjuntos de forma independiente en un dispositivo de procesamiento cuántico.

Sin embargo, se descubrió que los problemas típicos de optimización combinatoria son intrínsecamente frustrados. Debido a la frustración en la estructura del grafo, los subgrafos no pueden considerarse totalmente desacoplados unos de otros. Por lo tanto, la solución óptima del problema original no se puede encontrar en el conjunto que comprende la mejor solución de cada una de las estructuras de subgrafos.

Fueron los inventores quienes descubrieron por primera vez que el problema de la frustración de la función de coste puede resolverse no solo determinando la mejor solución para cada estructura de subgrafos, es decir, el estado fundamental de cada hamiltoniano de coste local, sino también todos los estados propios correspondientes a una energía por debajo de una energía de corte predeterminada. Se descubrió que la determinación de todos los estados propios correspondientes a una energía por debajo de la energía de corte predeterminada se puede realizar utilizando el QAOA sin modificaciones adicionales de sus operaciones cuánticas, que comprenden las puertas y mediciones cuánticas, siendo la única modificación en las funciones de coste evaluadas de forma clásica. Por lo tanto, la implementación del método según la invención en las plataformas actuales de procesamiento de información cuántica se facilita en gran medida.

Al recombinar los estados propios determinados de todos los subgrafos, el problema de optimización combinatoria original con múltiples variables discretas se puede reducir a un problema de los estados propios determinados. Por lo tanto, el número de variables discretas del problema original se reduce de manera efectiva al número de estados propios determinados. Al determinar el estado fundamental del sistema en la base del estado propio recombinado, se puede aproximar la solución óptima al problema de optimización combinatoria.

Las al menos dos estructuras de subgrafos están interconectadas. El acoplamiento de una estructura de subgrafos a una estructura de subgrafos adyacente se cuantifica mediante una fuerza de acoplamiento. La energía de corte predeterminada se determina para cada estructura de subgrafos sumando la fuerza de acoplamiento de cada uno de sus acoplamientos.

Se descubrió que la fuerza de acoplamiento proporciona una escala de energía útil para determinar cuál de los estados propios del coste local hamiltoniano de una estructura de subgrafos debe mantenerse. Esta determinación de la energía de corte tiene la ventaja de que el método según la invención se puede aplicar a cualquier tipo de problema de optimización combinatoria, siempre que se conozcan y/o puedan determinarse las fuerzas de acoplamiento entre cada estructura de subgrafos.

Los estados propios determinados se recombinan generando una representación de la función de coste en un espacio de Hilbert reducido abarcado por los estados propios determinados.

El espacio de Hilbert se puede considerar como un espacio vectorial con un producto escalar modificado. En el espacio reducido de Hilbert, la base está formada por los estados propios determinados y, por lo tanto, es finita. Los estados propios determinados pueden considerarse combinaciones específicas de las múltiples variables discretas de una estructura de subgrafos.

Esta recombinación de estados propios determinados tiene la ventaja de que el número de variables discretas del problema original se reduce de manera efectiva al número de estados propios determinados. Al aproximar el estado fundamental en el espacio reducido de Hilbert, se obtiene la solución óptima.

En un ejemplo, después de recombinar los estados propios determinados en el espacio de Hilbert reducido, se genera una estructura de grafos reducida a partir de la representación de la función de coste en el espacio de Hilbert reducido. La estructura de grafos reducida puede dividirse en al menos dos estructuras de subgrafos disjuntas y procesarse según las etapas del método descritas anteriormente.

Preferiblemente, las al menos dos estructuras de subgrafos disyuntivos se determinan usando un método de agrupamiento heurístico a partir de un grupo de métodos, comprendiendo el grupo al menos el método de Lovaina.

En un ejemplo, el hamiltoniano de coste local para cada estructura de subgrafos comprende un término de penalización, en donde el término de penalización se adapta para añadir un valor de penalización predeterminado a un valor esperado para la energía de cada estado cuántico que tenga una energía por debajo de la energía de corte, de modo que el dispositivo de procesamiento cuántico se adapte para determinar primero todos los estados propios correspondientes a las energías por debajo de la energía de corte. El término de penalización tiene la estructura de un operador de proyección, en donde la suma abarca todos los estados cuánticos que tienen una energía por debajo de la energía de corte y en donde cada sumando se escala según un valor de penalización que depende del estado cuántico correspondiente. Esta estructura tiene la ventaja de que el término de penalización no requiere ninguna modificación de las puertas cuánticas reales utilizadas en el QAOA. En cambio, el término de penalización simplemente añade un valor de energía a la energía determinada correspondiente a un estado cuántico, de modo que se priorice la determinación de los estados cuánticos con energías por debajo del límite de energía. Este efecto se debe a la forma en que los valores esperados, en particular, el valor esperado de energía, se calculan en la mecánica cuántica.

Preferiblemente, el dispositivo de procesamiento cuántico está adaptado para llevar a cabo un QAOA adicional para aproximar el estado fundamental de la función de coste en el espacio reducido de Hilbert.

De manera similar a la determinación de los estados propios del coste local hamiltoniano, también el coste hamiltoniano en el espacio de Hilbert reducido o renormalizado se puede determinar utilizando el dispositivo de procesamiento cuántico. El QAOA utilizado para la determinación del estado fundamental en el espacio reducido de Hilbert difiere del primer QAOA en que las puertas y los circuitos se configuran sobre la base de los estados propios recombinados.

En un ejemplo, la función de coste que representa el problema se puede representar mediante un modelo de vidrio giratorio de Ising, caracterizándose el modelo de vidrio giratorio de Ising por una interacción por pares entre cuerpos (interacción de dos cuerpos), en donde los cuerpos vienen dados por los vértices de la estructura de grafos a la que se asignó la función de coste.

El modelo de vidrio giratorio de Ising se caracteriza por una interacción por pares entre cuerpos, la llamada interacción de dos cuerpos. En este caso, los cuerpos vienen dados por los vértices de la estructura de grafos a la que se asignó la función de coste. A cada vértice se le asigna un conjunto de dos estados, por ejemplo, |0> y |1> o |abajo> y |arriba>, y el valor de acoplamiento define una fuerza de interacción/acoplamiento entre dos vértices. En otras palabras, cada vértice del modelo de vidrio giratorio de Ising representa una variable discreta del problema de optimización combinatoria.

Cada una de las al menos dos estructuras de subgrafos está restringida de manera que la cardinalidad de su subconjunto de las múltiples variables discretas es menor o igual a un número de qubits del dispositivo de procesamiento cuántico.

Esta restricción tiene la ventaja de que cada estructura de subgrafos es lo suficientemente pequeña como para poder resolverse utilizando el QAOA en el dispositivo de procesamiento cuántico.

En un ejemplo, cada una de las al menos dos estructuras de subgrafos está restringida de manera que la cardinalidad de su subconjunto de las múltiples variables discretas es menor o igual a un número de qubits corregidos por error del dispositivo de procesamiento cuántico.

En una realización, la estructura de grafos comprende una pluralidad de vértices, en donde la pluralidad de vértices está conectada por una pluralidad de conexiones. Cada vértice representa una variable discreta y cada conexión representa una interacción entre al menos dos variables discretas.

Esta estructura de grafos es capaz de representar no solo la interacción de dos cuerpos entre los vértices, sino también las conexiones en el sentido de la interacción de tres o más cuerpos entre tres o más vértices.

Breve descripción de las figuras

Algunas realizaciones de la invención se explican a continuación con referencia a las figuras. Estas muestran lo siguiente:

La figura 1 una visualización esquemática de las etapas del método para obtener la solución óptima de un problema de optimización combinatoria;

la figura 2 una visualización de la reducción promedio de qubits según una realización del método de la invención usando dos etapas de iteración para tamaños de sistema que varían de 12 a 32 variables discretas.

Descripción detallada de la invención

A continuación, se destaca la base técnica del método según la invención introduciendo brevemente los conceptos clave de la computación cuántica.

En la computación clásica, la unidad fundamental de información es el bit, tomando los valores de 0 o 1. En la computación cuántica, la unidad fundamental de información está codificada en bits cuánticos, o qubit en pocas palabras. La implementación de los qubits en el mundo real es un tema muy investigado en este momento. Los objetivos clave son qubits que sean resistentes al ruido, ajustables y fáciles de producir en grandes cantidades. Una versión destacada de los qubits se realiza en un régimen superconductor. Otras tecnologías se basan en iones atrapados o átomos neutros.

Al igual que un bit, el qubit también comprende un primer estado y un segundo estado, sin embargo, los dos estados del qubit son estados cuánticos. Por lo tanto, el qubit también puede tomar cualquier estado superposicional construido a partir de estos dos estados. Un estado superposicional se construye mediante la suma de los dos estados, en donde cada estado se escala mediante una amplitud de probabilidad que es un número complejo. Las amplitudes de probabilidad están normalizadas, lo que significa que sus valores cuadrados suman 1. Debe tenerse en cuenta que la información completa codificada en un estado superposicional de un qubit no se puede recuperar simplemente mediante una medición, a diferencia de los bits clásicos, de los que la información se puede leer simplemente. Más bien, un qubit debe prepararse en el mismo estado una y otra vez y medirse varias veces. La amplitud de probabilidad para el primer estado puede entonces aproximarse, por ejemplo, por el número de observaciones del primer estado dividido por el número de mediciones totales. De manera similar, la probabilidad de observar el segundo estado puede aproximarse.

Se puede demostrar que el qubit, mientras no se mida, puede evolucionar continuamente con el tiempo en la llamada esfera de bloque, tomando así cualquiera de los infinitos estados posibles limitados por la esfera de bloque. Las variables continuas se tienen en cuenta por naturaleza y pueden explotarse en las plataformas de procesamiento de información cuántica.

Al combinar dos o más qubits en un sistema compuesto, se pueden obtener estados cuánticos más complejos. La dimensión del sistema compuesto viene dada por el producto de las dimensiones de cada subsistema. Por lo tanto, para un sistema compuesto que comprende n qubits, la dimensión se escala con 2^n. En otras palabras, el número de variables continuas que se procesan en paralelo según la naturaleza cuántica, aumenta exponencialmente en el recuento de qubits. En 500 qubits, el número de dimensiones ya es mayor que el número de átomos en el universo visible. Este hecho constituye la base para una aceleración computacional significativa de un ordenador cuántico en comparación con cualquier ordenador clásico de última generación, lo que se denomina ventaja cuántica.

El estado cuántico de un sistema de qubits presentado anteriormente evoluciona continuamente sin medición, de modo que se pueden procesar exponencialmente muchas amplitudes de probabilidad en paralelo. En los cálculos clásicos, los bits se manipulan a través de puertas lógicas. Para los cálculos cuánticos, se introdujo un principio similar a través de las llamadas puertas cuánticas. Dado que el operador de evolución temporal en la mecánica cuántica es unitario, las puertas para manipular los qubits también tienen que cumplir este requisito, es decir, la evolución de un estado cuántico tiene que ser reversible.

En la computación cuántica, las puertas de los qubits se pueden representar mediante cualquier matriz de 2 x 2 que sea unitaria, en particular, las matrices de Pauli. Por ejemplo, la matriz X de Pauli puede crear una puerta NOT para un solo qubit. Para las puertas de varios qubits, es decir, puertas que actúan sobre varios qubits, un ejemplo destacado es la puerta de NOT controlada, a menudo también llamada CNOT. Todas las demás puertas de qubits múltiples se pueden descomponer en CNOT y puertas de un solo qubit, de modo que en realidad se requiere una cantidad limitada de puertas de un solo qubit para lograr un conjunto de puertas universal, como se conoce en la computación clásica.

Para la computación cuántica, los qubits y las puertas utilizadas para manipularlos se combinan en circuitos cuánticos completos. En resumen, los circuitos cuánticos siguen un esquema similar al de sus homólogos clásicos:

- Preparar el estado de entrada inicial, por ejemplo, enfriando el sistema a las temperaturas adecuadas;
- Aplicar una secuencia de puertas cuánticas;
- Medir el estado de algunos o todos los qubits.

A continuación, se construye un puente entre los problemas de optimización combinatoria que ocurren a diario en las industrias y los ordenadores cuánticos. Se explicará cómo se puede formular un problema de optimización combinatoria para resolverlo en un ordenador cuántico. La optimización combinatoria puede ser una muy buena candidata para las aplicaciones de los ordenadores cuánticos, ya que estas tienen la capacidad de explorar el espacio de Hilbert, es decir, el espacio de soluciones traducido al mundo cuántico, con superposición de estados básicos. En otras palabras, los ordenadores cuánticos pueden procesar muchos posibles candidatos para soluciones en paralelo.

Un problema de optimización combinatoria se caracteriza por una función de coste que asigna un conjunto contable de soluciones a valores reales, a menudo denominados valores de coste. El objetivo del proceso de optimización es encontrar una solución del conjunto de soluciones de manera que la función de coste devuelva el valor de coste más bajo. A continuación, nos centraremos en los problemas de optimización cuyas soluciones son cadenas de bits de longitud *n.* Para resolver el problema de optimización combinatoria utilizando ordenadores cuánticos, la función de coste clásica debe convertirse en una función hamiltoniana. Un hamiltoniano es un operador que asigna valores de energía a los estados cuánticos de un sistema. El estado cuántico con la energía más baja de un hamiltoniano se llama estado fundamental. Por lo tanto, al convertir la función de coste clásica en una hamiltoniana, el problema de optimización combinatoria se traduce en un problema de encontrar el estado fundamental del hamiltoniano correspondiente.

El problema de aproximar el estado fundamental de un hamiltoniano se puede resolver con solucionadores cuánticos variacionales. Un posible algoritmo para la optimización variacional es el QAOA, que se aproxima al estado fundamental de un sistema.

El estado fundamental de un sistema se caracteriza por que se le asigna el valor energético más bajo del sistema a través del operador de Hamilton. La optimización variacional se basa en el principio variacional de Ritz-Rayleigh: Seleccionar una función de onda arbitraria basándose en los estados propios exactos del operador de Hamilton. Se puede demostrar que el valor esperado de energía de esta función de onda seleccionada es mayor o igual a la energía del estado fundamental. Por lo tanto, al parametrizar la función de onda seleccionada en términos de uno o más parámetros, los parámetros se pueden optimizar de manera que el valor esperado de energía de la función de onda sea mínimo. Por lo tanto, la función de onda caracterizada por los parámetros en los que el valor esperado de energía es mínimo puede considerarse como el estado fundamental aproximado del hamiltoniano. Por lo tanto, el valor de energía que corresponde al hamiltoniano que actúa en el estado fundamental aproximado se considera energía del estado fundamental. Dependiendo de la parametrización de la función de onda, el estado fundamental aproximado puede incluso corresponder al estado fundamental exacto.

En QAOA, la parametrización de la función de onda se basa en dos vectores de parámetros. El valor esperado de la función de onda preparada se aproxima mediante su medición repetida en la base computacional realizada por el circuito cuántico.

Luego, los mejores parámetros se determinan llamando iterativamente a un optimizador clásico, lo que convierte a QAOA en realidad en un algoritmo híbrido.

Como se ha descrito anteriormente, las funciones de coste de los problemas de optimización combinatoria pueden representarse mediante un hamiltoniano. El hamiltoniano, en general, tiene la forma de una suma de todos los qubits activos, en donde la suma recorre todos los productos entre las puertas Z de Pauli que actúan sobre los qubits.

Por lo tanto, el término hamiltoniano puede comprender un término de identidad que solo da lugar a una fase global y, por lo tanto, puede pasarse por alto. El hamiltoniano puede comprender además un término lineal, que tampoco contiene información significativa. El primer término relevante en el hamiltoniano es el término cuadrático. El término cuadrático define una suma de todos los pares de dos puertas Z escaladas según un valor de acoplamiento que depende de las puertas Z involucradas. Por lo tanto, el valor de acoplamiento codifica una interacción de dos cuerpos entre dos qubits. Los hamiltonianos que contienen solo el término cuadrático se denominan modelos de vidrio girado de Ising. Se sabe que encontrar configuraciones que den el estado fundamental de un modelo de vidrio girado de Ising es un polinomio no determinista (NP) difícil en casos generales. Muchos problemas de optimización muy relevantes en las industrias pueden atribuirse a un hamiltoniano de este tipo, tal como el problema del vendedor ambulante y el problema del corte máximo. El hamiltoniano de cristal giratorio de Ising puede entonces mapearse en un grafo o representarse mediante un grafo, lo que nos permite utilizar herramientas de la teoría de grafos en nuestro beneficio.

El hamiltoniano puede comprender además términos cúbicos o de orden superior, que comprenden valores de acoplamiento que representan una interacción de tres o varios cuerpos. Además, dichos hamiltonianos pueden dividirse en grupos y, por lo tanto, pueden resolverse usando la invención.

Un grafo comprende varios vértices, también llamados nodos, y conexiones entre los vértices. En el caso de un hamiltoniano cuadrático, las conexiones se reducen a bordes entre los vértices. A continuación se considera una realización de la invención con un término cuadrático del hamiltoniano. No obstante, el concepto que se analiza a continuación se aplica de manera similar a los hamiltonianos que comprenden términos cúbicos y de orden superior.

En el caso de un hamiltoniano cuadrático, cada arista comprende un par de vértices, también llamados puntos finales, que están conectados a través de una arista respectiva. Además, se asigna una ponderación a cada borde del grafo. La ponderación viene dada por el valor de acoplamiento entre dos puntos finales respectivos. Cada término del coste hamiltoniano se convierte en un borde no dirigido que tiene la ponderación correspondiente al valor de acoplamiento. Además, los vértices se asignan como atributo de estado para representar el estado de la variable discreta. Como resultado, el problema de optimización combinatoria original se mapea completamente en el grafo, que luego se puede usar para determinar las energías asignadas a sus estados cuánticos. En caso de que el coste hamiltoniano comprenda un término lineal adicional, este término se puede tener en cuenta asignando a cada vértice una constante local adicional definida por el factor de escala de este término lineal.

Una vez mapeado el problema de optimización en el grafo, el objetivo es dividir la estructura del grafo en subsistemas. Posteriormente, los subsistemas también se denominan estructuras de subgrafos o comunidades del grafo. Por lo general, los grafos pretenden tener conjuntos de vértices que se agrupan y actúan de forma relativamente independiente de los demás vértices del grafo. Esta propiedad se encontró particularmente en el caso de grafos que representan redes sociales y puede explotarse dividiendo el grafo en subconjuntos disjuntos, llamados comunidades. Si bien los vértices de un subconjunto están densamente conectados, las comunidades solo tienen unas pocas conexiones entre sí. La unión de todas las comunidades da como resultado el grafo completo.

Para dividir la estructura del grafo en subsistemas, se puede usar un algoritmo que divida el grafo en comunidades. Un algoritmo particularmente útil es el algoritmo de Lovaina, que se basa en una optimización de la modularidad. La modularidad es una medida que cuantifica qué tan buena es la división de un grafo en diferentes comunidades. Debe tenerse en cuenta que las comunidades pueden tener un tamaño ilimitado, por lo que no basta con minimizar solo los bordes intercomunitarios. La modularidad se normaliza entre 0 y 1, donde un valor de 0 expresa que la modularidad no es mejor que la asignación de comunidades de forma aleatoria y un valor cercano a 1 indica una estructura de comunidad sólida.

El método de Lovaina es un método heurístico que se utiliza para extraer estructuras comunitarias de grafos grandes en poco tiempo computacional. Por el contrario, la optimización exacta de la modularidad es difícil desde el punto de vista computacional. Otros métodos, en particular los métodos heurísticos, se pueden aplicar de manera similar para dividir la estructura del grafo en comunidades disjuntas.

La **figura 1** muestra una descripción general esquemática de las etapas del método de una realización del método según la invención que utiliza un hamiltoniano de coste cuadrático.

En primer lugar, el problema de optimización combinatoria, expresado por (χ, C), donde χ indica el espacio de soluciones y C la función de coste, se asigna a un hamiltoniano de coste H_C como se ha descrito anteriormente. En este ejemplo, el coste hamiltoniano H_C tiene una forma cuadrática y, por lo tanto, representa un modelo de vidrio girado de Ising. Después de mapear el coste hamiltoniano en una estructura de grafos, la gráfica se divide en comunidades utilizando los métodos descritos anteriormente. Cada comunidad se le asigna un hamiltoniano de coste local indicado H_{c1}, H_{c2},..., H_{cn}. Después de agrupar el grafo, el coste original hamiltoniano se puede expresar como una suma entre cada uno de los costes locales hamiltonianos y un término intercomunitario.

En cambio, para cada subsistema con coste local hamiltoniano utilizamos QAOA para encontrar todos los estados cuánticos con energías por debajo de una energía de corte predeterminada. Estos estados cuánticos comprenden el estado fundamental de cada subsistema y algunos estados excitados. Al hacerlo, los estados propios del subsistema respectivo se eligen para que sean los estados de base computacional. Por lo tanto, el *k-ésimo* estado excitado se puede encontrar de manera eficiente modificando el coste local hamiltoniano añadiendo una penalización a todos los estados cuánticos con energías por debajo del *k-ésimo* estado excitado. Dado que el circuito cuántico generado por el QAOA no depende de qué estado propio sea el estado de menor energía, el hamiltoniano de coste local modificado, incluido el término de penalización, se puede implementar exactamente con la misma secuencia de puertas que el hamiltoniano de coste local original. El término de penalización solo modifica la evaluación energética clásica del estado base computacional medido.

Dado que no solo nos interesa el estado de salida *k*, sino también todos los estados cuánticos inferiores, este procedimiento iterativo proporciona cierta solidez en los casos en que el QAOA no puede encontrar inmediatamente el estado cuántico más bajo posible. El término de penalización se adapta para cada iteración, dependiendo del estado excitado en que se encuentre.

Por ejemplo, cuando se intentan encontrar los cuatro estados de energía más bajos de un subsistema, en donde en la segunda iteración de QAOA encuentra el tercer estado cuántico en lugar del segundo estado cuántico, el coste local que hamiltoniano aplicó para la tercera iteración incluye los términos de penalización del estado fundamental y el tercer estado cuántico, pero no del segundo estado cuántico. Por lo tanto, en la tercera iteración de QAOA, se puede encontrar el segundo estado cuántico faltante. Este procedimiento iterativo continúa hasta que se alcanza un cierto umbral, es decir, una energía asignada a un estado cuántico que supera la energía de corte.

Al término de penalización se le asigna una magnitud mediante un valor de penalización. Por un lado, el valor de penalización debe ser lo suficientemente grande como para que no se encuentre el mismo estado cuántico dos veces y, por otro lado, la elección de un valor de penalización demasiado grande cambia el panorama energético, lo que tiene un impacto negativo en el proceso de optimización. Se encontró que el valor de penalización es óptimo cuando se determina a partir de la diferencia entre la energía asignada al estado cuántico que se va a penalizar y la energía del estado fundamental de la comunidad más una energía de corte.

El límite de energía para cada grupo no solo depende de la propia comunidad, sino que resulta más útil cuando se basa en los límites intercomunitarios. Por lo tanto, al determinar un intervalo útil para el corte de energía, el término intercomunitario del coste original, hamiltoniano, puede servir para encontrar una condición de límite superior.

Se descubrió que el límite de energía para una comunidad seleccionada viene dado por la suma de la fuerza de acoplamiento de cada extremo intercomunitario que está conectado a esta comunidad específica. Por lo tanto, una configuración de qubits, es decir, un estado cuántico dentro de esta comunidad específica que tenga una energía que supere la suma de la energía del estado fundamental y la energía de corte de esta comunidad específica, no puede formar parte del estado fundamental de todo el sistema. Esto se debe al hecho de que las comunidades, con la excepción de los bordes intercomunitarios, están aisladas unas de otras. La contribución de estos bordes intercomunitarios añade como máximo un término energético dado por la energía de corte. Como resultado, el estado fundamental |GS> se encuentra en el conjunto de todas las combinaciones de estados encontrados F_{ci} dentro del intervalo de energía de corte de cada comunidad.

A continuación, se recombinan los estados cuánticos determinados.

Según la invención, los estados cuánticos determinados se recombinan de manera que el QAOA se puede aplicar al problema recombinado para encontrar el estado fundamental del hamiltoniano de coste. Para ello, los estados cuánticos determinados de cada estructura de subgrafos se asignan a nuevos estados de qubits. El número de qubits necesarios crece de forma logarítmica con el número de estados cuánticos determinados F_{ci} en cada comunidad c_i. Los estados de qubit recién asignados abarcan un espacio de Hilbert reducido. En otras palabras, los estados cuánticos determinados de las estructuras de los subgrafos forman los estados base del espacio de Hilbert reducido.

El coste hamiltoniano representado en la base del espacio reducido de Hilbert, que posteriormente también se denominó coste hamiltoniano renormalizado, consta de dos términos. El primer término del coste hamiltoniano se calcula sobre las diferentes comunidades, en donde la suma es una matriz diagonal en la que los elementos diagonales vienen dados por los niveles de energía determinados en la comunidad respectiva. Por lo tanto, cada entrada asigna la energía correspondiente de los estados cuánticos determinados encontrados en el proceso de optimización anterior a los estados de qubits reducidos. El segundo término suma todos los pares de comunidades en los que el sumador es una matriz diagonal en la que las entradas diagonales asignan una ponderación de acoplamiento intercomunitario a cada par de estados de qubits reducido. A partir de este coste renormalizado hamiltoniano, se pueden generar las puertas para el QAOA. Las matrices diagonales se conmutan de manera que las puertas correspondientes a los sumandos se pueden aplicar por separado en la secuencia de puertas de un algoritmo QAOA. En lugar de resolver el coste renormalizado hamiltoniano directamente, también se puede considerar repetir las etapas del método anterior para el coste renormalizado hamiltoniano. En otras palabras, se puede mapear el coste renormalizado hamiltoniano

en una estructura de grafos. Posteriormente, la estructura de grafos puede dividirse en varias estructuras de subgrafos disjuntas, en las que a cada estructura de subgrafos se le asigna un hamiltoniano de coste local. Para cada estructura de subgrafos, se resuelve un hamiltoniano de coste local derivado del hamiltoniano de coste renormalizado, es decir, se determinan todos los estados propios que tienen una energía por debajo de una energía de corte predeterminada. El nuevo límite de energía viene dado nuevamente por la suma de todos los acoplamientos intercomunitarios. Los estados cuánticos determinados de cada comunidad se recombinan y se determina un hamiltoniano renormalizado adicional en un espacio de Hilbert aún más reducido. Este proceso puede repetirse hasta que se encuentre el estado fundamental del coste hamiltoniano. En particular, para grafos con estructuras comunitarias jerárquicas sólidas, el proceso iterativo es ventajoso.

Por lo tanto, el método se puede resumir de la siguiente manera:

1. Dada una instancia de problema de optimización combinatoria, se elige el número de iteraciones;

2. Se convierte la función de coste del problema de optimización combinatoria en un grafo;

3. Se utiliza un algoritmo de agrupamiento para dividir el grafo en subgrafos;

4. Se determinan las energías de corte para cada subgrafo;

5. Se resuelve el coste local hamiltoniano de cada estructura de subgrafos para determinar los estados cuánticos que tienen energías por debajo de la energía de corte;

6. Se representa el estado cuántico determinado de forma reducida;

7. Se calcula el hamiltoniano renormalizado en la base reducida;

8. Si su iteración actual no es la última, se va a la etapa 2;

9. Se resuelve el sistema completo, es decir, se determina el estado fundamental del hamiltoniano renormalizado correspondiente a la solución óptima del problema de optimización combinatoria.

Los inventores demostraron que el método según la invención puede determinar el estado fundamental del coste hamiltoniano para diferentes estructuras gráficas.

La figura 2 muestra un diagrama que representa la reducción promedio de qubits cuando se usa el método según la invención con dos etapas de iteración.

En esta simulación, el número de variables discretas oscila entre 12 y 32, lo que resulta en 12 a 32 vértices en cada gráfica. Para 12 y 16 vértices, el resultado se promedió en 1000 muestras de datos cada uno. Para los recuentos de vértices más altos, el promedio incluye 100 muestras de datos cada una. Las barras que apuntan en la dirección Y representan la desviación estándar.

Se descubrió que, en el caso de grafos de 3 niveles regulares, la reducción de qubits oscila entre aproximadamente el 39 % y el 49 %. En la estructura de grafos de Erdos-Rényi, menos densamente conectada, se detectó una reducción de aproximadamente el 53 % hasta el 60 %.

También se probó para reducir la energía de corte en un 50 % para reducir la cantidad de estados cuánticos determinados transmitidos por cada comunidad. Para la versión con energía de corte reducida, las reducciones en el número de qubits oscilan entre aproximadamente el 56 % y el 68 % en los grafos de 3 niveles regulares y entre aproximadamente el 59 % y el 66 % en los grafos de Erdős-Rényi.

Estos resultados indican una reducción considerable de los requisitos de hardware en las plataformas de procesamiento de información cuántica. Se indica una clara tendencia a una reducción aún mayor hacia sistemas de mayor tamaño. Cabe destacar que los grafos de 3 niveles regulares y los grafos de ErdősRényi suelen tener estructuras comunitarias débiles. Por lo tanto, se espera un potencial de reducción de qubits aún mayor para las estructuras gráficas que son naturalmente divisibles en comunidades.

REIVINDICACIONES

1. Método de computación cuántica para obtener una solución óptima de un problema con múltiples variables discretas, en donde el problema está representado por una función de coste, comprendiendo el método:

-generar una estructura de grafos a partir de la función de coste,
-dividir la estructura de grafos en al menos dos estructuras de subgrafos disyuntas, en donde cada estructura de subgrafos comprende un subconjunto de las múltiples variables,
-mapear cada estructura de subgrafos a una función de coste local representada como hamiltoniano de coste local,
-determinar, para cada hamiltoniano de coste local, todos los estados propios correspondientes a una energía por debajo de una energía de corte predeterminada utilizando un dispositivo de procesamiento cuántico, en donde cada variable del subconjunto de múltiples variables está representada por un qubit del dispositivo de procesamiento cuántico, en donde las al menos dos estructuras de subgrafos están interconectadas, en donde el acoplamiento de una estructura de subgrafos a una estructura de subgrafos adyacente se cuantifica mediante una fuerza de acoplamiento, y en donde la energía de corte predeterminada se determina para cada estructura de subgrafos sumando la fuerza de acoplamiento de cada uno de sus acoplamientos, y en donde cada una de las al menos dos estructuras de subgrafos está restringida de tal manera que la cardinalidad de su subconjunto de múltiples variables es menor o igual a un número de qubits del dispositivo de procesamiento cuántico,
-recombinar los estados propios determinados, en donde los estados propios determinados se recombinan generando una representación de la función de coste en un espacio de Hilbert reducido (hamiltoniano de coste) que abarca los estados propios determinados, consistiendo el hamiltoniano de coste en dos términos,
-en donde el primer término del coste hamiltoniano suma las diferentes comunidades, en donde la suma es una matriz diagonal en la que los elementos diagonales vienen dados por los niveles de energía determinados en la comunidad respectiva, y
-en donde el segundo término suma todos los pares de comunidades, en donde el sumador es una matriz diagonal en la que las entradas diagonales asignan una ponderación de acoplamiento intercomunitario a cada par de estados de qubits reducido, y
-aproximar un estado fundamental a partir de los estados propios recombinados, en donde el estado fundamental representa la solución óptima.

2. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el dispositivo de procesamiento cuántico está adaptado para llevar a cabo un primer algoritmo de optimización aproximada cuántica para determinar los estados propios de cada hamiltoniano de coste local.

3. Método de computación cuántica según la reivindicación anterior, que genera además una estructura gráfica reducida a partir de la representación de la función de coste en el espacio de Hilbert reducido, y repite recursivamente las etapas del método de la reivindicación 1 para la estructura de grafos reducida.

4. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde las al menos dos estructuras de subgrafos disyuntas se determinan usando un método de agrupamiento heurístico.

5. Método de computación cuántica según la reivindicación anterior, en donde el método de agrupamiento heurístico es el método de Lovaina.

6. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde el coste local hamiltoniano para cada estructura de subgrafos comprende un término de penalización, en donde el término de penalización se adapta para añadir una constante de penalización predeterminada al valor energético de cada estado cuántico que tenga una energía inferior a la energía de corte, de modo que el dispositivo de procesamiento cuántico esté adaptado para determinar todos los estados propios correspondientes a energías por debajo de la energía de corte.

7. Método de computación cuántica según la reivindicación 2, en donde el dispositivo de procesamiento cuántico está adaptado para llevar a cabo otro algoritmo de optimización aproximada cuántica para aproximar el estado fundamental de la función de coste en el espacio reducido de Hilbert.

8. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la función de coste que representa el problema se puede representar mediante un modelo de vidrio giratorio de Ising, estando **caracterizado** el modelo de vidrio giratorio de Ising por una interacción por pares entre cuerpos (interacción de dos cuerpos), en donde los cuerpos vienen dados por los vértices de la estructura de grafos a la que se asignó la función de coste.

9. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde cada una de las al menos dos estructuras de subgrafos está restringida de tal manera que la cardinalidad de su subconjunto de múltiples variables es menor o igual a un número de qubits corregidos por error del dispositivo de procesamiento cuántico.

10. Método de computación cuántica según cualquiera de las reivindicaciones anteriores, en donde la estructura gráfica comprende una pluralidad de vértices, en donde la pluralidad de vértices está conectada por una pluralidad de conexiones, en donde cada vértice representa una variable discreta y cada conexión representa una interacción entre al menos dos variables discretas.

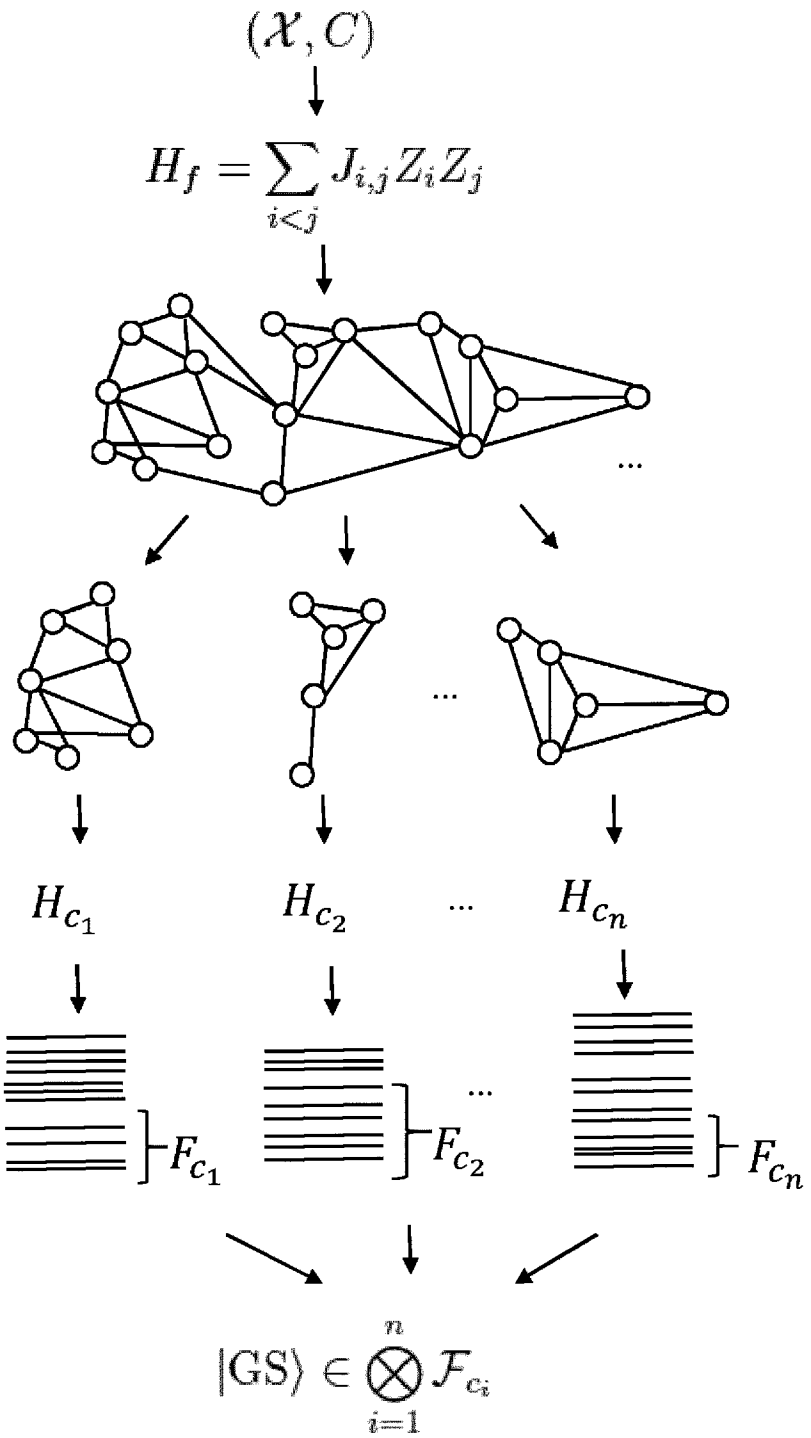
$(\mathcal{X}, C)$
$H_f = \sum_{i<j} J_{i,j} Z_i Z_j$
...
H_{c_1}
H_{c_2}
...
H_{c_n}
F_{c_1}
F_{c_2}
F_{c_n}
$|\mathrm{GS}\rangle \in \bigotimes_{i=1}^{n} \mathcal{F}_{c_i}$

Figura 1

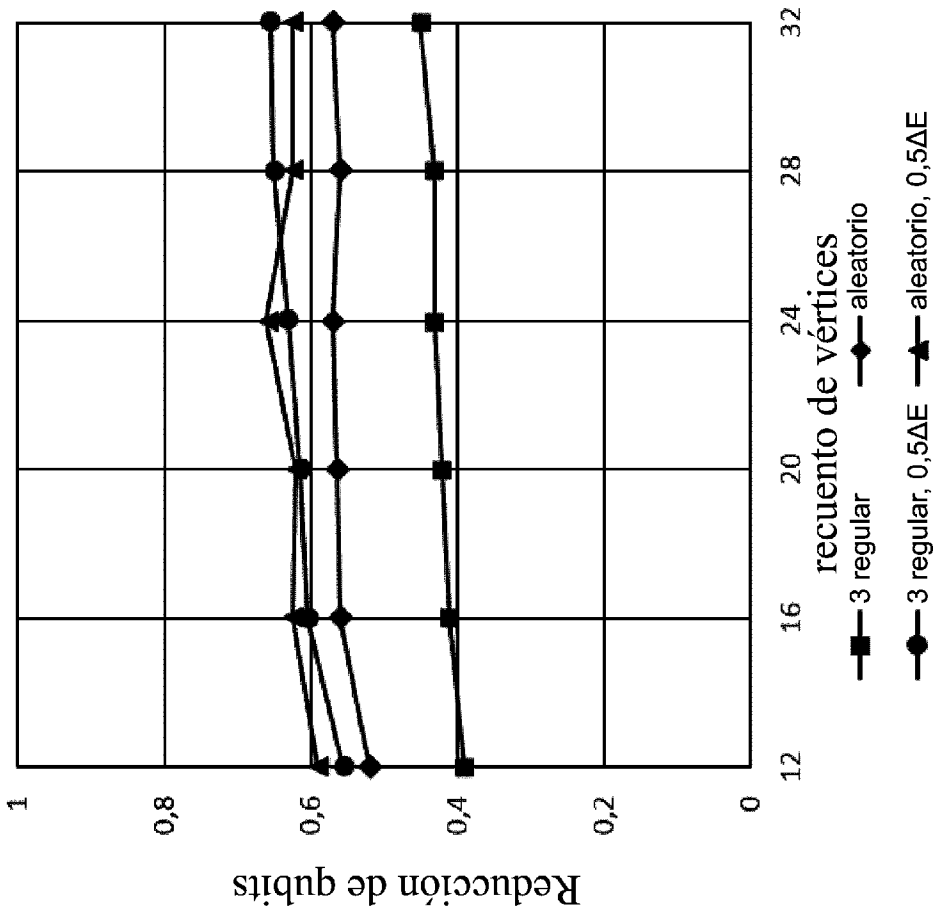
Reducción de qubits
1
0,8
0,6
0,4
0,2
0
12
16
20
24
28
32
recuento de vértices
3 regular
aleatorio
3 regular, 0,5ΔE
aleatorio, 0,5ΔE

Figura 2