

Bases para la resolución del problema del viajero (TSP) con un solo qubit

Dr. José Luis Lucio Martínez¹,1, Eliu Barocio Padilla¹,2, Katia Natalí Núñez Guía¹,3, Ángel Salvador Hernández Martínez¹,4,Karim Gibran Hernández Chahin¹,5, Antonio J. Moctezuma Castillo¹,6

¹Departamento de Física, DCI, Universidad de Guanajuato jllucio@ugto.mx ¹ e.barociopadilla@ugto.mx ² kn.nunezguia@ugto.mx ³ as.hernandez.martinez@ugto.mx ⁴ kg.hernandez@ugto.mx ⁵ adj.moctezumacastillo@ugto.mx ⁶

Resumen

Se describe el tratamiento del problema del agente viajero presentada en el artículo "Solving The Travelling Problem Using a Single Qubit". Se describen las herramientas y las bases conceptuales requeridas para resolverlo con un solo qubit. Se reconstruye la implementación para cuatro ciudades, los resultados cualitativos son similares a los reportados en el artículo. Las diferencias en lo cuantitativo surgen de una interpretación. La valoración del trabajo nos lleva a pensar en alternativas de tratamiento y generalizaciones.

Palabras clave: TSP; estado cuántico; principio de superposición; qubit; rotaciones; esfera de Bloch.

Introducción

El Problema del Agente Viajero (TSP por sus siglas en inglés), es un problema de optimización combinatoria conocido y relevante. El objetivo de este problema es encontrar el camino óptimo para viajar entre un número definido de ciudades pasando una vez por cada una de ellas y volviendo a la ciudad inicial, buscando la ruta más corta de acuerdo la distancia [1].

Desde el siglo XVII problemas similares al TSP han sido estudiados por matemáticos como Sir William Rowan Hamilton y Thomas Penyngton Kirkman [2], y siendo formulado matemáticamente en el siglo XIX por el matemático irlandés William Rowan Hamilton y el matemático británico Thomas Kirkman. Sin embargo, no es hasta 1954 que George Dantzig, Delbert Fulkerson y Selmer Johnson proponen una solución al expresar el TSP como un problema de programación lineal entera mixta (MILP) [1], esta formulación es conocida como DFJ. Otra formulación notable para la resolución del TSP es la propuesta por Miller, Tucker y Zemlin, conocida como MTZ [5]. la cual expresa este problema como un programa lineal entero.

A pesar de que la formulación para el TSP pueda ser sencilla, es un problema complicado de resolver, pues pertenece a la clase de problemas NP-completo [3]. Dado n ciudades a visitar, el número total de rutas posibles es (n - 1) ! [3], lo que implica que la cantidad de rutas posibles entre ciudades crece de manera exponencial, y el tiempo computacional para encontrar la solución óptima aumenta al tener que analizar un grupo de caminos cada vez mayor, por lo que es necesario encontrar maneras de resolver este problema que minimicen el costo computacional. Una alternativa es combinar el uso de la computación cuántica con un algoritmo de optimización clásico.

En este contexto, el presente trabajo es una revisión del artículo "Solving The Traveling Salesman Problem Using a Single Qubit" [8] en el que se plantea la metodología de resolución de TSP utilizando la representación de las ciudades y sus costos en estados cuánticos representados en la esfera de Bloch. Se accede a cada estado cuántico mediante rotaciones en la esfera de Bloch y se aplica el principio de superposición como una ventaja frente a las resoluciones no cuánticas de TSP permitiendo explorar múltiples rutas de manera simultánea.

Además, el estudio destaca la importancia de poder usar solo un qubit, mencionando las limitaciones técnicas de diversas implementaciones. Como señalan los autores: "Typically, current quantum algorithms have a success probability of less than 90% for a 4-city TSP [...] which decreases with increasing problem size. The quantum algorithm [...] for encoding 9 and 10-city problems on a D-wave quantum architecture requires 73 logical qubits or 5436 physical qubits" [8]. La elevada cantidad de qubits utilizados exige vías más compactas de plantear y resolver el problema, en este caso mediante la resolución de TSP con un solo qubit.



Objetivo

Entender y explicar la metodología de resolución cuántica de TSP para un solo qubit.

Herramientas matemáticas y físicas

En mecánica cuántica un sistema cuántico, es representado por un vector de estado $|\psi>$ denominado **ket** que contiene toda la información física del sistema, el cual pertenece a un espacio vectorial complejo. Si este espacio vectorial es de dimensión n, el ket $|\psi>$ puede ser representado como combinación lineal de los vectores de una base (ortogonal) de dicho espacio vectorial

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i |i\rangle. \tag{1}$$

El ket $|\psi\rangle$ se representa como un vector columna, $|\psi\rangle = (\alpha_0 \ \alpha_1 \dots \alpha_n)^T$. Para calcular el producto interno con otro ket $|\phi\rangle = (\beta_0 \ \beta_1 \dots \beta_n)^T$ es necesario definir el **bra** $\langle \psi|$, que se obtiene tomando el conjugado transpuesto del ket $|\psi\rangle$, $\langle \psi| = (\alpha^*_0 \ \alpha^*_1 \dots \alpha^*_n)$. Por lo tanto, el producto interno de los kets $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ queda definido como:

$$\langle \psi \mid \phi \rangle = \alpha_0^* \beta_0 + \alpha_1^* \beta_1 + \dots + \alpha_n^* \beta_n. \tag{2}$$

Si $\langle \psi \mid \phi \rangle$ es igual a cero, ambos estados son ortogonales. La matriz de densidad ρ describe el estado de un sistema cuántico, tanto si está en un estado puro como en un estado mezcla. Para un estado puro $|\psi>$, la matriz de densidad se representa mediante la ecuación:

$$\rho = |\psi \rangle \langle \psi|,\tag{3}$$

mientras que para una mezcla de estados $\{|\psi_i>\}$ con poblaciones p_i respectivamente, la matriz de densidad adopta la forma:

$$\rho = \sum_{i}^{n} p_i |\psi_i \rangle \langle \psi_i|. \tag{4}$$

Distancias

Una vez definidos los estados cuánticos, es necesario introducir la noción de la distancia entre dos estados. Consideramos un estado normalizado $|\psi(\lambda)>$, que depende de un conjunto de parámetros $\lambda=(\lambda_1,\ldots,\lambda_n)\in R^n$. La forma general para definir la métrica de estados infinitesimalmente cercanos [4] es:

$$ds^{2} = \langle \partial_{i} \psi(\lambda) | \partial_{j} \psi(\lambda) \rangle d\lambda_{i} d\lambda_{j} con \partial_{i} = \frac{\partial}{\partial \lambda_{i}},$$
 (5)

donde el producto interno entre estos dos estados infinitesimalmente cercanos es un número escalar complejo, el cual en toda generalidad puede expresarse como

$$\langle \partial_i \psi(\lambda) | \partial_i \psi(\lambda) \rangle = \gamma(\lambda)_{ij} + i\sigma(\lambda)_{ij} \tag{6}$$

se tiene que



www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ji} \quad ; \quad \sigma_{ij} = -\sigma_{ji}, \tag{7}$$

esto es una consecuencia de que $<\psi|\phi>=(<\psi|\phi>)^*$, entonces la métrica está dada por la parte real y se obtiene como

$$ds^2 = g_{ij}d\lambda_i d\lambda_j \quad ; \quad g_{ij} = \gamma_{ij}. \tag{8}$$

Por otra parte, sabemos que en mecánica cuántica los estados están definidos hasta una fase

$$|\psi'(\lambda)\rangle = e^{i\alpha}(\lambda) |\psi(\lambda)\rangle,$$
 (9)

es decir, esos dos estados son equivalentes, sin embargo, vemos que la noción de métrica introducida previamente no es invariante ante dicha transformación, y por lo tanto no es correcta. Para corregir esa deficiencia se modifica la definición de la siguiente manera:

$$g_{ij} = \gamma_{ij}(\lambda) - \beta_i(\lambda)\beta_i(\lambda), \tag{10}$$

donde $\beta_i(\lambda) = -i \langle \psi(\lambda) | \partial_i \psi(\lambda) \rangle$ es la conexión de Berry. Por tanto, la forma final de la métrica es

$$ds^{2} = g_{ij} d\lambda_{i} d\lambda_{j} = \langle d\psi | d\psi \rangle - \langle d\psi | \psi \rangle \langle \psi | d\psi \rangle. \tag{11}$$

Una métrica comúnmente utilizada en mecánica cuántica es la métrica de Bures. Esta métrica introduce varios aspectos importantes para hacer mediciones entre estados, uno de ellos es la distancia de Bures, definida como

$$D_B^2(\rho_1, \rho_2) = 2[1 - \sqrt{F(\rho_1, \rho_2)}]. \tag{12}$$

Donde $F(\rho_1,\rho_2)$ es la Fidelidad. Ésta es una medida de cercanía entre dos estados cuánticos definidos por sus respectivas matrices de densidad y está dada por la expresión

$$F(\rho_1, \rho_2) = \left[Tr(\sqrt{\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}})^2 \right]. \tag{13}$$

Además, de esta métrica se obtiene el Ángulo de Bures definida en la expresión (14), que se usa también para medir la distancia entre dos estados bajo el contexto de la esfera de Bloch y es una medida de la distancia estadística [7]

$$D_A(\rho_1, \rho_2) = \arccos(\sqrt{F(\rho_1, \rho_2)}. \tag{14}$$



www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

El ángulo de Bures será relevante en la resolución del problema del viajero dado que se estará trabajando en la esfera de Bloch.

Principio de Superposición Cuántica

Como se explicó anteriormente, los estados físicos de un sistema se describen mediante vectores de estado, $|\psi>$. Una de las características más sorprendentes de estos estados es que pueden combinarse linealmente para formar nuevos estados válidos. Este fenómeno se conoce como el principio de superposición.

Dados dos estados cuánticos de la misma dimensión $|\psi_1>$ y $|\psi_2>$, se construye el estado $|\psi>$ como la combinación lineal de estos dos estados

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle,$$
 (15)

donde c_1 y c_2 son coeficientes complejos. Esta es una propiedad fundamental de la mecánica cuántica, consecuencia de la linealidad de la ecuación de Schrodinger.

De acuerdo con los postulados de la mecánica cuántica un observable no tiene un valor definido hasta que se realiza una medición. Antes de la medición, el sistema se encuentra en una superposición de todos los posibles estados propios del observable. Al realizar la medición, el estado colapsa a uno de los estados propios del observable medido. La probabilidad de obtener un resultado específico está dada por el cuadrado del módulo del coeficiente correspondiente en la superposición es

$$P_i = |c_i|^2. (16)$$

Sin embargo, esta interpretación probabilística depende de que los estados involucrados formen una base ortonormal. Si los estados utilizados en la descomposición no son ortogonales entre sí, entonces forman una base sobredimensionada. Una base sobredimensionada permite representar una mayor variedad de combinaciones de estados dentro de un solo qubit. No obstante, esta propiedad implica que los coeficientes c_i obtenidos en la descomposición del estado no puedan interpretarse como probabilidades en el sentido estricto, en cambio los valores se utilizan como indicadores de la contribución relativa de cada estado en la superposición final.

El principio de superposición es esencial para entender fenómenos cuánticos como la interferencia, el entrelazamiento y la computación cuántica. Su formulación matemática simple encierra profundas implicaciones experimentales.

Qubit

Un qubit es la unidad fundamental de la computación cuántica, este es un sistema cuántico de 2 niveles, análogo a un bit clásico que puede tomar los valores 0 o 1, pero con la diferencia fundamental de que un qubit puede estar en superposición de ambos estados:



$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,\tag{17}$$

donde α y β son números complejos y cumplen la condición de normalización

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. {(18)}$$

El espacio vectorial complejo asociado a un qubit es un espacio de dimensión 2, cuya base ortonormal se conoce como base computacional. Los vectores que conforman esta base son:

$$|0> = (1 \ 0)^T$$
 y $|1> = (0 \ 1)^T$ (19)

La matriz de densidad de un qubit esta descrita por

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \nu \cdot \sigma),\tag{20}$$

donde I es la matriz identidad 2x2, $\sigma=(\sigma_x \ \sigma_y \ \sigma_z)$ es el vector de matrices de Pauli y $\nu=(\nu_x \ \nu_y \ \nu_z)$ es el vector de Bloch.

La esfera de Bloch es la representación geométrica de un qubit en donde cada estado es representado por un punto asociado a un vector de Bloch, si $|\nu|=1$ el estado es puro y se encuentra como un punto en la superficie de la esfera, por otro lado, si $|\nu|<1$ el estado es mixto y se representa por un punto en el interior de la esfera. Cada estado puro con coordenadas (x,y,z) en la esfera de Bloch, es representada en la base computacional como

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle, \tag{21}$$

 $\mathrm{donde}\; \phi = \arccos(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}})\; \mathrm{y}\; \theta = \cos^{-1} z\; \mathrm{donde}\; 0 \leq \theta \leq \pi\; \mathrm{y}\; 0 \leq \phi \leq 2\pi.$

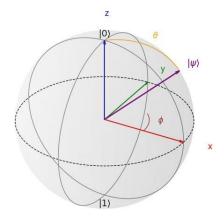


Figura 1. Esfera de Bloch.



www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Si dos estados están representados por dos puntos de la esfera de Bloch diametralmente opuestos, se trata de dos estados ortogonales, es decir, su producto interno es cero. Esto se observa en los estados |0>y|1>, que son representados en el polo norte y sur, respectivamente, y son ortogonales entre sí puesto que <0|1> = 0.

Para poder transitar en la esfera de Bloch de un estado puro $|\psi_1>$ a otro estado puro $|\psi_2>$, se requiere una rotación U_{1-2} . El ángulo de rotación es $\delta=2cos^{-1}(<\psi_1|\psi_2>)$ y el eje de rotación está dado por el vector unitario \hat{n} que es perpendicular a $|\psi_1>$ y $|\psi_2>$. La rotación U_{1-2} es un operador unitario $(U_{1-2}^{\dagger}U_{1-2}=I)$ dado por,

$$U_{1-2} = \cos(\frac{\delta}{2})I - i\operatorname{sen}(\frac{\delta}{2})(\hat{n} \cdot \sigma), \tag{22}$$

al aplicarlo al estado $|\psi_1\rangle$, se obtiene el estado $|\psi_2\rangle$, es decir:

$$U_{1-2}|\psi_1>=|\psi_2>. (23)$$

METODOLOGÍA

MATRIZ DE COSTO

La matriz de costo Sij representa el costo que se requiere para viajar de la ciudad i a la ciudad j. Cada elemento de la matriz de costo está escalado en el intervalo (de cero a 1) que corresponde a la distancia relativa. Se usará la siguiente matriz de costo para 4 ciudades:

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0.57 & 0.78 & 0.55 \\ 0.57 & 0 & 0.41 & 0.90 \\ 0.78 & 0.41 & 0 & 0.30 \\ 0.55 & 0.90 & 0.30 & 0 \end{pmatrix}. \tag{24}$$

EL TSP CLÁSICO

Actualmente se utilizan dos formulaciones clásicas para resolver el TSP: el DFJ y MTZ. La base matemática de ambas es similar. Estas formulaciones se basan en una función de costo, la cuál es la suma de las distancias entre ciudades, dependiendo del recorrido realizado. En ambas se utilizan diferentes variables y restricciones para que el recorrido realizado sea coherente y sea posible encontrar la función de costo mínima y real [5].

La ruta en la que se transita por todas las ciudades sin repetirse y volviendo a la ciudad inicial, se le denomina ciclo hamiltoniano H_b . Para un TSP de n ciudades, existen (n-1)! ciclos hamiltonianos. Se define la función de costo como:

$$D = \min\left(\sum_{\{c_i, c_j\} \in H_b} S_{ij}\right). \tag{25}$$

Cada costo que se tenga del viaje entre ciudades se irá sumando en la función de costo a partir de la matriz de costo S_{ij} e individualmente para cada ciclo hamiltoniano que esté recorriendo en el momento, con el objetivo de minimizar esta función D. Aquel ciclo hamiltoniano que minimice la función de costo es la solución del TSP.



www. jovenesenlaciencia.ugto.mx

Para cuatro ciudades que tienen como matriz de costo la matriz (24), existen seis ciclos hamiltonianos válidos

$$\begin{split} H_1 \colon C_1 - C_3 - C_2 - C_4 - C_1 \ , \\ H_2 \colon C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_1, \\ H_3 \colon C_1 - C_3 - C_4 - C_2 - C_1, \\ H_4 \colon C_1 - C_2 - C_4 - C_3 - C_1, \\ H_5 \colon C_1 - C_4 - C_3 - C_2 - C_1, \\ H_6 \colon C_1 - C_4 - C_2 - C_3 - C_1, \end{split}$$

cuyos costos son

$$\begin{split} H_1: D &= S_{13} + S_{32} + S_{24} + S_{41} = 2.64, \\ H_2: D &= S_{12} + S_{23} + S_{34} + S_{41} = 1.83, \\ H_3: D &= S_{13} + S_{34} + S_{42} + S_{21} = 2.55, \\ H_4: D &= S_{12} + S_{24} + S_{43} + S_{31} = 2.55, \\ H_5: D &= S_{14} + S_{43} + S_{32} + S_{21} = 1.83, \\ H_6: D &= S_{14} + S_{42} + S_{23} + S_{31} = 2.64. \end{split}$$

Los ciclos hamiltonianos que minimizan el costo y por lo tanto son solución corresponden a H_2 y H_5 ya que ambos representan el mismo viaje, pero en direcciones opuestas.

Al tratar de visualizar este problema originalmente clásico en una perspectiva cuántica, se deberá resolver el mismo problema de minimización de una función de costo, esta vez utilizando recursos de la mecánica cuántica, utilizando un solo qubit y manteniendo en mente que la implementación experimental justamente reproduce el fenómeno cuántico, incluyendo el proceso de medición.

MAPEO DE LA MATRIZ DE COSTO EN LA ESFERA DE BLOCH

Cada ciudad C_1 , C_2 , C_3 y C_4 se representa por los estados puros $|P_{ii}>$, los cuales se parametrizan como

$$|P_{ii}\rangle = cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i\phi_{ii}} sen \frac{\pi}{4} |1\rangle,$$
 (26)

donde el ángulo $\theta_{ii} = \frac{2\pi \cdot i}{n}$ y n=4 el número total de ciudades. Cada estado $|P_{ii}>$ está representado en el ecuador de la esfera de Bloch y son equidistantes entre sí.



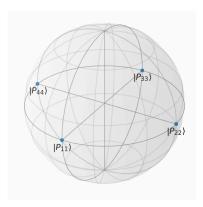


Figura 2. Representación de las cuatro ciudades en la esfera de Bloch.

Para representar las distancias relativas entre las ciudades, se mapean los elementos no diagonales de la matriz de costo Sij (con $i \neq j$) como estados puros |Pij> en la esfera de Bloch, que se parametrizan como:

$$|P_{ij}\rangle = \cos\frac{\theta_{ij}}{2}|0\rangle + e^{i\phi_i} \operatorname{sen}\frac{\theta_{ij}}{2}|1\rangle, \tag{27}$$

donde $\theta_{ij}=\frac{\pi}{2}(1-S_{ij})$. Cada estado $|P_{ij}>$ se encuentra sobre el mismo meridiano que conecta el estado |0> con los estados $|P_{ii}>$ asociados a las ciudades C_i . Para cada ciudad C_i , el costo de viajar a otra ciudad C_j está representado como la distancia entre los estados $|P_{ii}>$ y $|P_{ij}>$. Por ejemplo, los costos $S_{12}=0.57$, $S_{13}=0.78$ y $S_{14}=0.55$ son representados de forma correcta en la esfera de Bloch puesto que el estado más alejado de $|P_{11}>$ es $|P_{13}>$ y el más cercano es $|P_{14}>$ (Fig. 3).

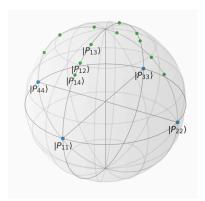


Figura 3. Representación de los estados $|P_{1j}>$ en la esfera de Bloch. Se etiquetan los estados $|P_{12}>$, $|P_{13}>$ y $|P_{14}>$ cuyas distancias al estado $|P_{11}>$ representan los costos de viajar de la ciudad C_1 a las ciudades C_2 , C_3 y C_4 .

Para transitar entre estados se distinguen dos tipos de rotaciones: up y down. La rotación up U^u_{ii-ij} permite partir de los estados $|P_{ii}>$ que representan la ciudad C_i y terminar en el estado $|P_{ij}>$ que representa el costo de viajar de la ciudad C_i a la ciudad C_i .

La rotación down U^d_{ij-jj} se usa para partir de cualquier estado $|P_{ij}>$ y terminar en el estado $|P_{jj}>$, que representa la ciudad C_j que es donde se inicia el siguiente viaje. A diferencia del operador up este no representa un costo de viaje.





www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Solución por fuerza bruta

Para solucionar el TSP a través de una aproximación cuántica se puede emplear la fuerza bruta o la superposición de estados (es importante hacer notar que ambos casos se pueden implementar en una computadora cuántica, en este caso de un solo qubit, y obviamente los protocolos para ambos tratamientos son diferentes). En el caso de la fuerza bruta se utilizan los operadores de rotación up y down para llegar a los estados $|P_{ii}>$ que representan a las ciudades y los puntos que se encuentran en los meridianos $|P_{ij}>$. Primero se elige una ciudad $|P_{ii}>$ como punto inicial y utilizando las rotaciones se va siguiendo uno de los ciclos hamiltonianos, por ejemplo, para el caso de 4 ciudades en donde se sigue el ciclo hamiltoniano

$$H_2$$
: $C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_1$,

Se tiene la siguiente transitada por medio de las rotaciones up y down:

$$|P_{11}> \rightarrow \ U^u_{11-12} \ \rightarrow |P_{12}> \rightarrow \ U^d_{12-22} \ \rightarrow |P_{22}> \rightarrow \ U^u_{22-23} \ \rightarrow |P_{23}> \rightarrow \ U^d_{23-33} \ \rightarrow |P_{33}> \rightarrow \ U^u_{33-34} \ \rightarrow |P_{34}> \rightarrow \ U^d_{34-44} \ \rightarrow |P_{44}> \rightarrow \ U^u_{44-41} \ \rightarrow |P_{41}> \rightarrow \ U^d_{41-11} \ \rightarrow |P_{11}>.$$

Una vez que se tiene el algoritmo para seguir este camino con las restricciones correspondientes, es necesario encontrar la ruta más corta para el recorrido a realizar, es decir, el ciclo Hamiltoniano óptimo. En este caso se define una función a minimizar T, tal que

$$T = \min_{b} \sum_{\{P_{ii}, P_{ji}\} \in H_b} \tau^b_{ii-ij}, \tag{28}$$

en donde

$$\tau_{ii-ij}^b = \cos^{-1} < P_{ij} | P_{ii} >, \tag{29}$$

es el ángulo de Bures de los estados $|P_{ii}>y|P_{ij}>$, la cual representa el costo de viajar de la ciudad C_i a la ciudad C_j . Para el ciclo hamiltoniano H_2 la función T es:

$$T = \cos^{-1} < P_{12}|P_{11} > + \cos^{-1} < P_{23}|P_{22} > + \cos^{-1} < P_{34}|P_{33} > + \cos^{-1} < P_{41}|P_{44} >,$$

$$T = 0.45 + 0.32 + 0.24 + 0.43 = 1.44$$
.

Está solución a pesar de utilizar el qubit y la esfera de Bloch para la solución del TSP, se le llama solución por fuerza bruta porque se debe de realizar una iteración del proceso para cada uno de los posibles caminos del problema y es análogo al TSP clásico, lo que sigue teniendo un costo computacional que incrementa exponencialmente al momento de aumentar el número de ciudades, por tanto, el número de rutas posibles.

Solución Cuántica

Siguiendo a los autores de "Solving The Travelling Problem Using a Single Qubit" [8], se desarrolló una implementación computacional en Qiskit ya sea para la simulación cuántica como para su realización en una computadora cuántica y el algoritmo de optimización estocástico SPSA para el caso de 4 ciudades. Esta implementación permite resolver instancias del Problema del Viajero con un solo qubit, aprovechando la superposición cuántica para explorar múltiples rutas simultáneamente.

Circuito cuántico y evolución del qubit



VOLUMEN 37 XXX Verano De la Ciencia

ISSN 2395-9797

www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Para facilitar la imagen de cómo se recorren los caminos en la formulación cuántica se realizó un diagrama de enrutamiento (Figura 4), el cual representa cómo se exploran las posibles soluciones del TSP tomando el estado $|P_{11}>$ (ciudad C_1) como la ciudad de origen. A diferencia del enfoque clásico, donde cada ruta se evalúa de forma secuencial, en el enfoque cuántico se aprovecha de la superposición cuántica para recorrer múltiples caminos simultáneamente creando el estado en superposición $|g_i>$. En el diagrama de enrutamiento cada círculo azul representa los estados $|P_{ij}>$ y los cuadrados verdes representan los estados $|P_{ii}>$ (ciudades). Las flechas representan rotaciones up o down y se distinguen de la siguiente manera: si la flecha parte de un cuadrado verde y apunta a un círculo azul, se trata de una rotación up, por otro lado, si la flecha parte de un círculo azul y apunta a un cuadrado verde, se trata de una rotación down. Para atravesar las rutas del diagrama de enrutamiento se divide el diagrama en 2n+1=9 capas L_i que tiene asociado un estado en superposición $|g_i>$ donde cada capa representa una etapa del recorrido del viajero incluyendo el regreso a la ciudad inicial, como se señala en la Figura 4.

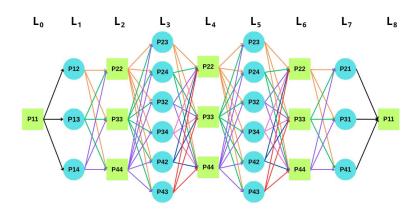


Figura 4. Diagrama de enrutamiento para 4 ciudades aprovechando la superposición cuántica, inicializado en el estado $|P_{11}>$ (ciudad de origen). Los círculos azules representan los estados $|P_{ij}>$ y los cuadrados verdes representan los estados $|P_{ii}>$.

Comenzamos el recorrido en la capa L_0 etiquetando el primer estado $|P_{11}>=|g_0>$ e comenzando el circuito en Qiskit con un solo un qubit inicializado en $|P_{11}>$. Por cada capa del diagrama se aplica una combinación lineal de rotaciones (flechas) ponderados por coeficientes α_k , que actúan como parámetros de control en el estado inicial

$$U_a^{(i)} = \sum_k \alpha_k^{(i)} U^{(k)}, \tag{30}$$

donde i indica la capa o etapa del circuito cuántico y k es un índice de suma que recorre los diferentes operadores de rotación posibles en la capa. Cada combinación lineal $U_g^{\ (i)}$ es una matriz 2x2 que debe ser unitarizada reescribiendo sus columnas como vectores normales

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{u_{11}}{\sqrt{u_{11}^2 + u_{21}^2}} & \frac{u_{11}}{\sqrt{u_{11}^2 + u_{21}^2}} \\ \frac{u_{21}}{\sqrt{u_{11}^2 + u_{21}^2}} & \frac{u_{12}}{\sqrt{u_{12}^2 + u_{22}^2}} \end{pmatrix}. \tag{31}$$

Cada operador unitario $\left.U_g^{(i)}\right.$ es aplicado en el estado inicial del circuito desde $\left.U_g^{(1)}\right.$ hasta $\left.U_g^{(7)}\right.$

www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

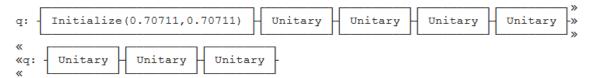


Figura 5. Circuito inicializado en el estado $|P_{11}>$. Cada operador "Unitary" corresponde a $U_a^{(1)}$ desde $U_a^{(1)}$ hasta $U_a^{(7)}$

La evolución del qubit a través del circuito genera un estado final $|g_{2n-1}>=|g_7>$ que contiene información sobre las rutas recorridas. El proceso de medición juega un papel central en la mecánica cuántica y en la simulación o cuando se implementa el código en la computación cuántica, se realiza una tomografía para lo cual se debe definir el conjunto de observables, ya sea una medición proyectiva o bien un conjunto de observables positivos (POVM por sus siglas en ingles). No incluiremos más detalles de este tema, aunque durante la estancia si se discutió.

El diagrama de enrutamiento no solo facilita la visualización del proceso cuántico, sino que también permite ajustar los parámetros del algoritmo para mejorar la eficiencia de la búsqueda. Así, por ejemplo, en el primer paso o primera capa, lo que el diagrama representa es que el viajero puede ir a cualquiera de las tres restantes ciudades $(2, 3 \ o \ 4)$, cada una con un peso α_k (esos parámetros se fijan con la optimización clásica).

Optimización con SPSA

Para encontrar la ruta óptima, se utiliza el algoritmo SPSA (Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation), que ajusta los coeficientes α_k para minimizar la función de costo total D. El algoritmo se ejecuta con una configuración de 33 parámetros libres reales (todos los α_k) los cuales logran reconstruir la ruta óptima con alta precisión. Este algoritmo parte de 33 parámetros aleatorios y se ejecuta 1000 veces para encontrar los que nos den como resultado la ruta óptima. El estado final del qubit se descompone en los estados $|P_{j1}>$ correspondientes a las ciudades que regresan al origen. Esta descomposición se realiza mediante una combinación lineal

$$|g_{2n-1}\rangle = \sum_{j=2}^{n} \beta_{j1}|P_{j1}\rangle. \tag{32}$$

La razón por la que se detiene el circuito en la penúltima capa para alcanzar el estado superpuesto $|g_{2n-1}>$ se debe a que la contribución β_{j1} de los estados $|P_{j1}>$ codifican la información requerida para un ciclo hamiltoniano válido. Los coeficientes β_{j1} se obtienen resolviendo un sistema lineal. Para la implementación de cuatro ciudades, los estados $|P_{j1}>$ son:

$$|P_{21}> = 0.94|0> +0.33i|1>$$

$$|P_{31}> = 0.98|0> -0.17|1>$$

$$|P_{41}>=0.93|0>-0.35i|1>$$

de acuerdo con la ecuación (32).



www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Como los estados $|P_{j1}>$ forman una base sobre completa y no ortogonal, lo coeficientes β_{j1} obtenidos al descomponer el estado final sobre estos estados no pueden interpretarse como amplitudes de probabilidad, en lugar de eso los valores $|\beta_{j1}|^2$ se utilizan como indicadores de contribución relativa de cada ciudad en la ruta reconstruida, en este contexto el orden descendente de estos valores permite inferir la ruta más probable pero no garantiza una interpretación probabilística.

Para nuestro caso con n=4 ciudades, una vez optimizados los 33 coeficientes α_k , el estado final del qubit fue descompuesto en los estados $|P_{j1}\rangle$ correspondientes al regreso a la ciudad inicial. Los coeficientes asociados a cada ciudad fueron

$$|\beta_{21}|^2 = 0.1438, |\beta_{31}|^2 = 0.1224, |\beta_{41}|^2 = 0.1018.$$
 (33)

Estos valores indican la contribución relativa de cada ciudad en la ruta final, y permiten reconstruir el orden de visita. Ordenando estos coeficientes en orden descendente, se reconstruye la ruta óptima como

$$C_1 - C_2 - C_3 - C_4 - C_1. (34)$$

La función de costo asociada a la ruta óptima fue

$$D = 1.83.$$
 (35)

Lo que indica que se alcanzó la solución mínima posible para esta instancia del problema. Estos resultados demuestran que el algoritmo cuántico es capaz de encontrar rutas óptimas utilizando únicamente un qubit, lo cual representa una mejora significativa en eficiencia de recursos respecto a otros enfoques cuánticos que requieren múltiples qubits. Además, la metodología permite explorar múltiples rutas simultáneamente, aprovechando el principio de superposición cuántica y reconstruir la solución óptima mediante técnicas basadas en la descomposición del estado final.

Conclusión

La revisión del artículo "Solving The Travelling Problem Using a Single Qubit" [8] nos lleva a las siguientes conclusiones: a) el resultado cualitativo es el mismo, b) cuantitativamente no son iguales, en particular lo que resultados que reportamos en la ec.(33) difiere de su resultado, a diferencia de lo que los autores reportan, nuestros coeficientes no suman a la unidad. La suma a la unidad es necesaria cuando se considera la expansión de un estado en una base dada, este no es el caso que se está analizando. Usar un solo qubit para resolver el problema planteado aprovecha la ventaja que ofrece la superposición de estados, sin embargo no es *natural* en el sentido que se lleva un problema del plano a la superficie de una esfera, de ahí la importancia de estudiar la geometría de otros estados cuánticos.

Bibliografía

- [1] Klanšek, U. (2011). Using the TSP solution for optimal route scheduling in construction management. Organization, technology & management in construction: an international journal, 3(1), 243-249.
- [2] Matai, Rajesh & Singh, Surya & Mittal, M.L.. (2010). Traveling Salesman Problem: an Overview of Applications, Formulations, and Solution Approaches. 10.5772/12909.
- [3] Hahsler, M., & Hornik, K. (2008). TSP—infrastructure for the traveling salesperson problem. Journal of Statistical Software, 23, 1-21.



www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

- [4] Provost, J.P., Vallee, G. Riemannian structure on manifolds of quantum states. Commun.Math. Phys. 76, 289–301 (1980). https://doi.org/10.1007/BF02193559
- [5] Desrochers, M., & Laporte, G. (1991). Improvements and extensions to the Miller-Tucker-Zemlin subtour elimination constraints. Operations Research Letters, 10(1), 27-36.
- [7] Alsing, P. M., Cafaro, C., Felice, D., & Luongo, O. (2024). Geometric aspects of mixed quantum states inside the Bloch sphere. *Quantum Reports*, 6(1), 90-109.
- [8] Goswami, K., Veereshi, G. A., Schmelcher, P., & Mukherjee, R. (2024). Solving the travelling salesman problem using a single qubit. arXiv preprint arXiv:2407.17207.