



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Treball final de grau

GRAU D'ENGINYERIA
INFORMÀTICA

Facultat de Matemàtiques i Informàtica
Universitat de Barcelona

Quantum Machine Learning: Fonaments i Implementacions Pràctiques

Autor: Josep Arnau Belmonte Juliachs

Director: Albert Catalán Tatjer

Realitzat a: Departament de Matemàtiques i Informàtica

Barcelona, 10 de juny de 2025

Abstract

This work explores the foundations and practical implementations of Quantum Machine Learning (QML), an emerging field at the intersection of quantum computing and machine learning. The study begins by analyzing the limitations of classical learning algorithms, particularly in problems with algebraic structure, such as classification based on the discrete logarithm — a task considered intractable under classical complexity assumptions.

After introducing the principles of quantum computing, including qubits, gates, circuits, and entanglement, the work focuses on how quantum feature maps and variational circuits can be used to build hybrid learning models. The Qiskit library is used as the main development framework, with simulations carried out in both ideal and noisy environments, as well as using primitives like `Sampler` and `Estimator` introduced in Qiskit 2.0.

Two supervised learning models are implemented: a Quantum Kernel Estimator (QKE) inspired by the work of Liu et al. (2020), and a Variational Quantum Classifier (VQC) trained on the Breast Cancer Wisconsin dataset. While the quantum models did not outperform classical counterparts in practice, the experiments highlight the challenges of building expressive circuits and the sensitivity of quantum algorithms to noise.

Overall, this project offers a rigorous and critical understanding of current QML techniques, emphasizing their theoretical potential, current limitations, and the importance of future research in more robust encodings, entanglement-based circuits, and hardware-level experimentation.

Resum

Aquest treball explora els fonaments i les implementacions pràctiques del *Quantum Machine Learning* (QML), una disciplina emergent que combina la computació quàntica amb l'aprenentatge automàtic. Es parteix de la limitació dels models clàssics per abordar certs problemes, com el de classificació basada en el logaritme discret, i s'analitza com la codificació quàntica pot superar aquestes barreres mitjançant espais de característiques no accessibles clàssicament.

La memòria inclou una anàlisi teòrica de la computació quàntica —amb especial atenció als qubits, portes quàntiques, circuits i fenòmens com l'entrellaçament i la decoherència— i introdueix els components clau del QML: codificació de dades, mapes de característiques quàntics i circuits variacionals. També es descriu l'ecosistema de desenvolupament amb Qiskit, incloent simuladors amb i sense soroll, així com l'ús de primitives modernes com `Sampler` i `Estimator`.

A nivell pràctic, es presenten dos experiments principals: un model de *Quantum Kernel Estimation* (QKE) aplicat a un problema algebraicament estructurat, i un *Variational Quantum Classifier* (VQC) entrenat sobre dades reals de càncer de mama. Tot i que els resultats no han demostrat un avantatge empíric clar sobre

models clàssics, el treball posa en relleu les dificultats reals associades al desenvolupament de models quàntics útils i valida la viabilitat tècnica de construir, executar i optimitzar aquests sistemes en simuladors.

Aquesta investigació proporciona una base sòlida per a futures exploracions en QML, destacant la necessitat de circuits més expressius, millor accés a hardware quàntic i estratègies d'entrenament més robustes. Més enllà dels resultats concrets, el treball contribueix a entendre el potencial del QML com a eina complementària per abordar problemes d'aprenentatge que romanen difícils per a la computació clàssica.

Índex

1	Introducció	1
2	Quan el Machine Learning clàssic falla: una porta per al Quantum Machine Learning	3
2.1	Limitacions del Machine Learning clàssic	3
2.2	Avantatge formal del Quantum Machine Learning	3
2.3	Un problema de classificació intractable clàssicament	3
2.4	Codificació quàntica i separació en espais de Hilbert	4
2.5	Resultat formal: avantatge robust del model quàntic	5
2.6	Valor teòric del resultat i motivació per al QML	5
3	Fonaments de computació quàntica	6
3.1	Introducció general	6
3.2	El qubit: unitat fonamental d'informació quàntica	6
3.3	Superposició: multiplicació de l'espai d'estats	6
3.4	L'entrellaçament: correlacions no clàssiques	7
3.5	Portes quàntiques i operadors unitaris	7
3.6	Portes quàntiques i operadors unitaris	8
3.7	Circuits quàntics: estructures de càlcul	9
3.8	Decoherència i errors quàntics	9
3.9	Conclusió	9
4	Introducció a Quantum Machine Learning	11
4.1	Definició i Motivació	11
4.2	Tècniques Híbrides i Variacionals	11
4.3	Codificació de Dades Clàssiques	11
4.4	Mapes de Característiques Quàntiques (Quantum Feature Maps) . .	12
4.5	Tipus d'Algorismes en Quantum Machine Learning	13
5	Ecosistema actual de la computació quàntica	15
5.1	Panoràmica de llibreries i plataformes	15
5.2	Simuladors: execució local i amb soroll	15
5.3	Primitives: execució estàndard moderna	16
5.4	Exemple conceptual: Sampler i Estimator sobre un circuit de Bell .	17

5.5	Conclusió	18
6	Kernel Quàntic	21
6.1	Definició	21
6.2	Implementació	21
6.3	Experiment inspirat en [10]	22
6.4	Anàlisi i resultats	25
7	Algorisme Variational Quantum Classifier (VQC)	26
7.1	Descripció conceptual i formal	26
7.2	Implementació pràctica amb dades reals	26
7.2.1	Preprocessat i codificació	27
7.2.2	Arquitectura del circuit VQC	27
7.2.3	Entrenament amb optimització clàssica	27
7.2.4	Resultats preliminars i visualització	28
7.3	Simulació amb soroll i comparació	29
7.3.1	Evolució de la funció de cost	29
7.3.2	Visualització de la classificació	30
7.3.3	Probabilitat de mesura i errors	31
8	Conclusions	32
8.1	Conclusions generals	32
8.2	Limitacions	32
8.3	Línies futures de treball	32
	Annexos	36

1 Introducció

La computació quàntica ha esdevingut un dels camps més prometedors de la ciència i la tecnologia contemporànies. En contrast amb la computació clàssica, els ordinadors quàntics aprofiten fenòmens com la superposició, l'entrellaçament i la interferència per tractar informació de manera fonamentalment diferent. Aquestes propietats obren la porta a algoritmes amb avantatges potencials en termes de velocitat i eficiència per a certs problemes que, fins ara, han estat considerats intractables per a arquitectures tradicionals. Tot i trobar-se encara en una etapa inicial, les seves aplicacions s'estenen a camps tan diversos com la criptografia, la simulació molecular i l'optimització.

D'altra banda, l'aprenentatge automàtic (ML) ha transformat la manera com es processa i interpreta la informació en àmbits com la visió per computador, el diagnòstic mèdic o la predicció de tendències. Tanmateix, a mesura que els conjunts de dades esdevenen més grans i complexos, els algoritmes clàssics pateixen limitacions importants, tant pel que fa a la capacitat de generalització com al cost computacional associat. És precisament en aquest context on emergeix l'oportunitat de combinar els avantatges teòrics de la computació quàntica amb els paradigmes d'aprenentatge automàtic: una disciplina coneguda com a *Quantum Machine Learning* (QML).

El QML explora la integració de circuits quàntics en processos d'aprenentatge supervisat, no supervisat i generatiu, amb l'objectiu de superar els límits dels models clàssics. Diversos autors han contribuït a establir els fonaments d'aquesta disciplina. En particular, l'estudi de Liu [10], demostra que existeixen funcions de classificació binària intractables per a algorismes clàssics que, no obstant això, poden ser apreses eficientment amb models quàntics. Aquest tipus de resultats ha estimulat l'interès per analitzar escenaris en què la codificació quàntica, els mapes de característiques i els circuits variacionals poden proporcionar un avantatge real. En aquest treball, ens proposem explorar de manera pràctica aquest avantatge mitjançant la comparació entre models clàssics i quàntics sobre problemes de classificació amb estructura algebraica oculta.

Per tal d'estructurar aquest treball de manera clara i progressiva, començarem introduint les limitacions de l'aprenentatge automàtic clàssic i la motivació per explorar alternatives quàntiques. A continuació, es presentaran els fonaments de la computació quàntica, incloent-hi el funcionament dels qubits, les portes quàntiques i els circuits, així com els principals reptes tecnològics com la decoherència. Un cop establerts aquests conceptes bàsics, s'introduirà el marc general del Quantum Machine Learning, incloent-hi les tècniques de codificació de dades, els mapes de característiques i les arquitectures híbrides. Finalment, es detallarà l'ecosistema actual de programació quàntica i es presentaran les implementacions pràctiques desenvolupades, amb anàlisi de resultats i discussions sobre l'impacte del soroll i la viabilitat dels models quàntics actuals.

Per estudiar i endinsar-nos al camp del Quantum Machine Learning, ens centrarem en dos tipus de models supervisats: els basats en estimació de *kernel* quàntic

(Quantum Kernel Estimation) i els classificadors quàntics variacionals (VQC). A partir de problemes inspirats en estructures matemàtiques difícils com el logaritme discret, analitzarem si els models quàntics poden detectar patrons que els models clàssics no poden capturar. Tot i que, com veurem, els resultats pràctics no sempre són concloents, aquest treball proporciona una anàlisi rigorosa dels fonaments del QML, les seves aplicacions actuals i les seves limitacions tecnològiques. Finalment, explorarem el funcionament dels simuladors quàntics, l'ús de primitives modernes com **Sampler** i **Estimator**, i discutirem els resultats obtinguts mitjançant experiments simulats, posant èmfasi en el valor formatiu i exploratori del QML dins del panorama actual de la computació.

2 Quan el Machine Learning clàssic falla: una porta per al Quantum Machine Learning

2.1 Limitacions del Machine Learning clàssic

L'aprenentatge automàtic clàssic ha demostrat una gran eficàcia en una àmplia gamma de tasques. No obstant això, existeixen problemes per als quals, sota certes hipòtesis de complexitat computacional, cap algoritme clàssic eficient pot oferir bons resultats. En aquest context, la computació quàntica ofereix eines capaces de transformar l'espai de dades de manera que patrons inaccessibles per a l'aprenentatge automàtic clàssic esdevenen linealment separables.

2.2 Avantatge formal del Quantum Machine Learning

L'estudi de Liu, Arunachalam i Temme (2020) [10] presenta un exemple paradigmàtic d'aquest avantatge. Els autors construeixen un problema de classificació binària sobre dades codificades a l'espai modular Z_p^* , vinculat al problema del logaritme discret (DLP). En aquest cas, s'estableix una separació formal entre l'aprenentatge clàssic i quàntic, basada en la intractabilitat del DLP per mètodes clàssics i la seva resolubilitat per algoritmes quàntics.

2.3 Un problema de classificació intractable clàssicament

Els autors defineixen una classe de funcions de classificació $C = \{f_s\}$ sobre el grup multiplicatiu $Z_p^* = \{1, 2, \dots, p-1\}$, on p és un nombre primer i g un generador d'aquest grup. Cada funció f_s etiqueta els elements segons la seva posició en el cicle generat per g :

$$f_s(x) = \begin{cases} +1 & \text{si } \log_g x \in [s, s + (p-3)/2] \pmod{p-1} \\ -1 & \text{altrament} \end{cases}$$

Tot i que aquesta funció és fàcilment computable si es coneix el valor de $\log_g x$, aquest càlcul és considerat intractable per a un algorisme clàssic sota la hipòtesi de dificultat del problema del logaritme discret (DLP). Per tant, des del punt de vista d'un classificador clàssic, els exemples d'entrenament semblen etiquetats de manera aleatòria, i no existeix cap patró accessible sense resoldre el DLP.

Aquesta intractabilitat es formalitza al **Teorema 1** de l'article, el qual estableix que cap algoritme clàssic probabilístic pot assolir una precisió en test superior a:

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{\text{poly}(n)} \quad \text{on } n = \log_2 p$$

Això implica que cap mètode clàssic eficient pot aprendre la funció f_s amb èxit, fins i tot amb accés a exemples etiquetats.

Notació 1. La notació $\text{poly}(n)$ fa referència a una funció polinòmica de la variable n . Així, una expressió com $\frac{1}{\text{poly}(n)}$ indica una quantitat que decreix com $\frac{1}{n^c}$ per algun enter positiu c . Aquesta notació s'utilitza sovint en complexitat computacional per indicar que un valor és negligible en comparació amb una escala polinòmica.

En el context del **Teorema 1**, la desigualtat

$$\text{precisió} \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{\text{poly}(n)} \quad \text{on } n = \log_2 p$$

Això vol dir que cap algorisme clàssic no pot classificar millor que l'atzar, llevat d'una lleugera millora. Aquesta limitació s'explica directament per la complexitat computacional del problema del logaritme discret (DLP).

2.4 Codificació quàntica i separació en espais de Hilbert

En el problema definit per Liu et al. [10], cap algorisme clàssic no és capaç d'aprendre la funció de classificació sota la hipòtesi de la dificultat del problema del logaritme discret. Tot i això, els autors mostren que definint una codificació quàntica de les dades és possible recuperar la separabilitat del problema en un altre espai.

La codificació proposada transforma cada dada $x \in \mathbb{Z}_p^*$ en un estat quàntic de la forma:

$$|\phi(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^k}} \sum_{i=0}^{2^k-1} |x \cdot g^i \bmod p\rangle$$

Aquest estat és una superposició quàntica de valors consecutius en l'espai multiplicatiu modular, centrada entorn de la posició logarítmica de x . Aquesta codificació preserva informació sobre $f_s(x)$ i, com demostren els autors, permet separar els estats corresponents a les dues classes amb un marge.

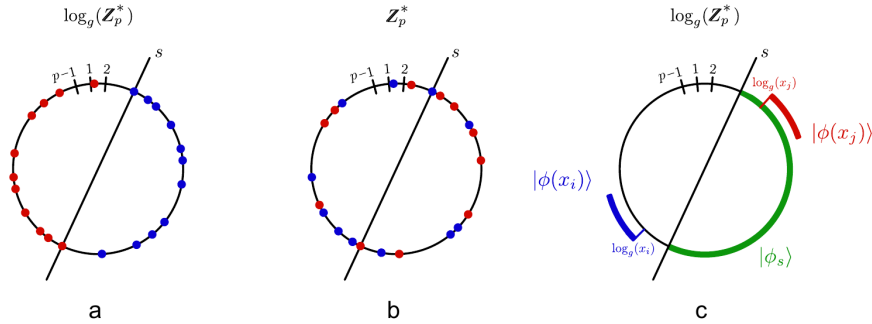


Figura 1: Visualització de la codificació quàntica i separació de les classes a l'espai del logaritme discret (a), espai original (b), i espai de codificació quàntica (c). Font: adaptat de [10].

2.5 Resultat formal: avantatge robust del model quàntic

Liu et al. estableixen dues afirmacions centrals al seu treball. En primer lloc, cap algoritme clàssic pot aprendre la funció f_s amb una precisió sobre el conjunt de prova millor que $1/2 + 1/\text{poly}(n)$, on $n = \log_2 p$, tal com es formalitza en el seu **Teorema 1**.

En segon lloc, al **Teorema 2**, es demostra que un model quàntic basat en la codificació anterior pot aprendre f_s amb alta precisió. En concret, s'estableix que per a qualsevol concepte $f_s \in C$, existeix un algorisme que, amb accés a mostres etiquetades i mitjançant estimació de l'overlap entre estats quàntics codificats, pot construir un classificador amb precisió de test almenys 0.99 en temps polinòmic, amb alta probabilitat.

Aquest resultat constitueix una separació formal entre el rendiment de models clàssics i quàntics per al problema considerat.

2.6 Valor teòric del resultat i motivació per al QML

L'exemple de Liu et al. té un propòsit fonamentalment teòric: demostrar que existeixen problemes d'aprenentatge supervisat per als quals els mètodes quàntics ofereixen un avantatge rigorós i formal sota supòsits estàndard de complexitat.

Malgrat que el problema f_s no prové d'una aplicació pràctica directa, la seva construcció és suficient per establir que els mapes de característiques quàntics poden proporcionar una representació de les dades que fa possible la separació lineal de classes que serien intractables de separar clàssicament.

Aquest treball dona fonament a la línia de recerca en Quantum Machine Learning centrada en la construcció de *quantum feature maps*, i proporciona un marc conceptual per explorar codificacions quàntiques útils en problemes amb estructures complexes o no linealment separables.

3 Fonaments de computació quàntica

3.1 Introducció general

La computació quàntica constitueix una extensió del paradigma computacional clàssic, fonamentada en els principis de la mecànica quàntica [1, 4]. Aquesta disciplina emergeix com una resposta als límits intrínsecs de l'arquitectura de von Neumann, proposant una alternativa per resoldre problemes que es consideren intractables per la computació clàssica. Els ordinadors quàntics exploten fenòmens com la superposició, l'entrellaçament i la interferència quàntica per dur a terme càlculs amb una eficiència potencialment exponencial.

3.2 El qubit: unitat fonamental d'informació quàntica

El qubit (bit quàntic) és l'element bàsic de la computació quàntica. A diferència del bit clàssic, que només pot prendre els valors binaris 0 o 1, un qubit pot existir en una combinació lineal d'ambdós estats, denominada superposició. Matemàticament, s'expressa com:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad \text{on } \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Aquesta representació implica que, fins que no es mesura, el qubit es troba simultàniament en els dos estats, amb probabilitats associades definides pels coeficients α i β [1].

3.3 Superposició: multiplicació de l'espai d'estats

La superposició és un principi clau que permet als ordinadors quàntics gestionar un espai d'estats exponencialment més gran que el dels sistemes clàssics. En un registre de n qubits, l'estat global pot representar fins a 2^n estats base simultàniament, cosa que obre la porta a una exploració paral·lela de solucions [4].

L'esfera de Bloch: Qualsevol estat pur d'un qubit pot representar-se com un punt sobre una esfera tridimensional coneguda com l'esfera de Bloch. Aquest model geomètric permet visualitzar l'estat quàntic com una combinació de rotacions sobre els eixos X , Y i Z .

Un estat arbitrari d'un qubit es pot escriure com:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle$$

on θ i ϕ defineixen la posició del qubit sobre l'esfera de Bloch.

Les portes de rotació corresponen a girs al voltant dels eixos de l'esfera de Bloch i són operacions mitjançant les quals podem controlar i modificar l'estat quàntic.

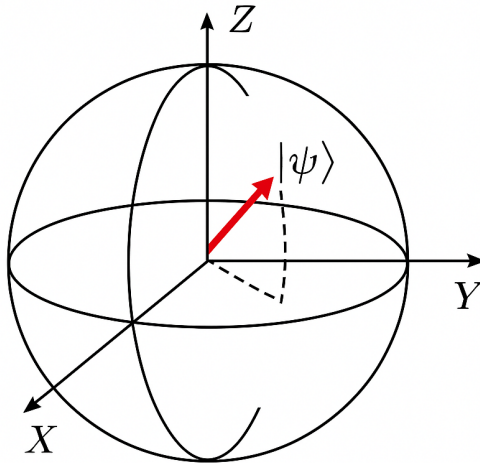


Figura 2: Representació d'un qubit sobre l'esfera de Bloch.

Un estat arbitrari d'un qubit es pot escriure com:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle,$$

on θ i ϕ defineixen la posició del qubit sobre l'esfera de Bloch.

Les portes de rotació corresponen a girs al voltant dels eixos de l'esfera de Bloch i són les operacions mitjançant les quals podem controlar i modificar l'estat quàntic.

3.4 L'entrellaçament: correlacions no clàssiques

L'entrellaçament quàntic és un fenomen pel qual l'estat d'un qubit queda fortament correlacionat amb l'estat d'un altre, de tal manera que la mesura d'un d'ells determina immediatament l'estat de l'altre, independentment de la distància espacial que els separi. Formalment, un estat entrellaçat no es pot expressar com el producte tensorial d'estats individuals. Un exemple clàssic és l'estat de Bell:

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

Aquestes correlacions quàntiques són essencials per a la implementació de la teleportació quàntica, protocols de criptografia quàntica i la computació distribuïda [1].

3.5 Portes quàntiques i operadors unitaris

Les portes quàntiques són operacions reversibles que actuen sobre qubits mitjançant operadors unitaris, assegurant que l'estat resultant conserva la norma unitària.

Aquestes operacions permeten manipular l'estat quàntic generant superposició, entrellaçament i altres fenòmens exclusius de la mecànica quàntica. A diferència de les portes clàssiques, que operen sobre bits discrets (0 o 1), les portes quàntiques poden transformar un qubit en qualsevol superposició complexa dels estats base [1].

Entre les portes fonamentals, cal destacar:

- **Hadamard (H):** Transforma l'estat $|0\rangle$ en una superposició $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, i $|1\rangle$ en $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$.
- **Pauli-X:** Actua com una porta NOT quàntica, intercanviant els estats $|0\rangle$ i $|1\rangle$.
- **CNOT (CX):** Porta controlada que aplica una Pauli-X al qubit objectiu només si el qubit de control és $|1\rangle$.
- **Ry i Rz (Rotacions):** Portes de rotació al voltant dels eixos Y i Z de l'esfera de Bloch, definides per:

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad R_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$$

Aquestes rotacions alteren la posició del qubit sobre l'esfera, permetent un control precís de l'estat.

3.6 Portes quàntiques i operadors unitaris

Les portes quàntiques són operacions reversibles que actuen sobre qubits mitjançant operadors unitaris, assegurant que l'estat resultant continua tenint norma unitària. Aquestes operacions permeten manipular l'estat quàntic creant superposició, entrellaçament i altres fenòmens exclusius de la mecànica quàntica. A diferència de les portes clàssiques, que treballen amb bits discrets (0 o 1), les portes quàntiques poden transformar un qubit en qualsevol superposició d'estats base [1].

Entre les portes fonamentals, cal destacar:

- **Hadamard (H):** Aquesta porta transforma l'estat base $|0\rangle$ en una superposició $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, i $|1\rangle$ en $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$.
- **Pauli-X:** Actua com una porta NOT quàntica, intercanviant els estats $|0\rangle$ i $|1\rangle$.
- **CNOT (CX):** Porta controlada que aplica una Pauli-X al qubit objectiu només si el qubit de control és $|1\rangle$.

A més d'aquestes, també es fan servir portes de rotació:

- **R_y i R_z (Rotacions):** Portes de rotació al voltant dels eixos *Y* i *Z* de l'esfera de Bloch, definides per:

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad R_z(\phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix}$$

Aquestes portes són fonamentals en circuits variacionals [13].

3.7 Circuits quàntics: estructures de càlcul

Un circuit quàntic és un model computacional format per qubits d'entrada, una seqüència de portes quàntiques i una mesura final. Representa de forma explícita un algorisme quàntic i pot descriure tasques com la preparació d'estats, l'evolució d'aquests i l'obtenció de resultats per mitjà de la mesura [1].

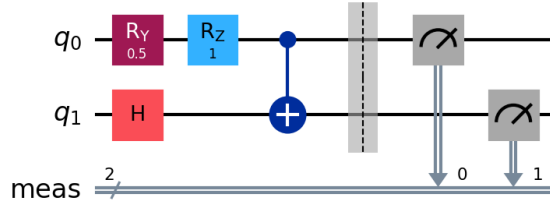


Figura 3: Circuit quàntic exemple amb operacions típiques: primer es fan rotacions R_y i R_z sobre el qubit q_0 , seguides d'una porta Hadamard sobre q_1 . Tot seguit, s'aplica una porta CNOT que crea entrellaçament entre q_0 i q_1 . Finalment, es fa una mesura conjunta dels dos qubits. Aquest tipus de circuits són fonamentals per preparar estats quàntics, manipular-los i llegir resultats en algorismes i models de machine learning quàntic.

3.8 Decoherència i errors quàntics

La decoherència és un dels principals reptes tecnològics de la computació quàntica. És el procés pel qual un sistema quàntic perd la seva coherència a causa de la interacció amb l'entorn. Aquesta degradació afecta la capacitat de càlcul i la fiabilitat dels circuits quàntics.

Per mitigar-ho, s'han desenvolupat protocols de correcció d'errors quàntics, com el codi de Shor o el codi de superfície [1].

3.9 Conclusió

Els fonaments de la computació quàntica proporcionen un marc teòric que redefeix la noció de càlcul. Conceptes com el qubit, la superposició i l'entrellaçament

estableixen les bases per a un nou paradigma amb potencial per abordar problemes fins ara inaccessibles per als sistemes convencionals [3, 13]. No obstant això, el progrés depèn del desenvolupament de tecnologies que minimitzin la decoherència i permetin la correcció d'errors en entorns físics inestables.

4 Introducció a Quantum Machine Learning

4.1 Definició i Motivació

L'aprenentatge automàtic quàntic (QML) és una disciplina emergent que combina la computació quàntica amb l'aprenentatge automàtic per desenvolupar algorismes capaços de processar informació de manera més eficient que els mètodes clàssics. Aquesta integració busca aprofitar les propietats úniques de la mecànica quàntica, com la superposició i l'entrellaçament, per millorar la capacitat de processament i l'eficiència dels algorismes d'aprenentatge.

La motivació principal darrere del QML és superar les limitacions dels algorismes clàssics en termes de velocitat i capacitat de maneig de dades complexes. Per exemple, certs problemes d'optimització i classificació que són computacionalment intensius per als ordinadors clàssics podrien resoldre's més eficientment mitjançant algorismes quàntics. A més, el QML obre la porta a noves aplicacions en camps com la química computacional, la criptografia i la simulació de sistemes físics.

4.2 Tècniques Híbrides i Variacionals

Una de les aproximacions més prometedores en QML és l'ús de circuits quàntics variacionals (VQC), que combinen components quàntics i clàssics en una arquitectura híbrida. En aquest enfocament, un circuit quàntic parametritzat genera estats quàntics que són mesurats, i els resultats s'utilitzen per ajustar els paràmetres del circuit mitjançant un algorisme d'optimització clàssic. Aquesta sinergia permet aprofitar els avantatges de la computació quàntica mentre es manté la flexibilitat dels mètodes clàssics.

Un exemple destacat és el marc Quantum-Train Quantum Fast Weight Programmer (QT-QFWP), que optimitza l'entrenament de VQCs mitjançant actualitzacions de paràmetres impulsades per mecanismes quàntics. Aquest enfocament ha demostrat reduccions significatives en el nombre de paràmetres necessaris sense comprometre la precisió, la qual cosa és especialment rellevant per a dispositius quàntics de mida mitjana amb recursos limitats.

4.3 Codificació de Dades Clàssiques

Per poder aplicar algorismes quàntics a dades clàssiques, és imprescindible traduir aquestes dades a estats quàntics mitjançant tècniques de codificació. Aquesta conversió determina com la informació clàssica entra al sistema quàntic i, per tant, influeix directament en l'eficàcia del model. Hi ha diverses estratègies per fer-ho, i les més utilitzades són:

- **Codificació per angle (angle encoding):** Aquesta tècnica consisteix a codificar cada característica d'un vector de dades com un angle de rotació R_y o R_z aplicada a un qubit. Per exemple, si una mostra té dues característiques

(x_1, x_2) , aquestes es poden codificar aplicant $R_y(x_1)$ al qubit 0 i $R_y(x_2)$ al qubit 1. Aquesta codificació és fàcilment implementable i escalable, ja que només necessita un qubit per característica. És el mètode més utilitzat en models variacionals per la seva simplicitat i compatibilitat amb circuits paramètrics.

- **Codificació per base (basis encoding):** Aquí es representen les dades en la base computacional dels qubits. Per exemple, un vector binari com $(1, 0, 1)$ es codifica directament com $|101\rangle$. Aquest mètode és útil quan es treballa amb dades categòriques o binàries i permet representar l'estat directament. La seva limitació principal és que requereix un qubit per cada bit de dades, cosa que és poc escalable.
- **Codificació per amplitud (amplitude encoding):** Aquesta codificació aprofita les amplituds d'un estat quàntic per representar les dades. Per exemple, un vector (x_0, x_1, x_2, x_3) es pot codificar en un estat com:

$$|\psi\rangle = x_0|00\rangle + x_1|01\rangle + x_2|10\rangle + x_3|11\rangle,$$

sempre que la norma sigui 1. La gran avantatge d'aquest mètode és que pot representar 2^n dades amb només n qubits. Tot i això, preparar aquests estats és complex i sovint ineficient amb l'estat actual del maquinari. “

Cadascun d'aquests mètodes presenta avantatges i inconvenients. La codificació per angle és fàcil d'implementar però requereix tants qubits com característiques. La codificació per amplitud és molt eficient en nombre de qubits però complexa de preparar. La tria de la codificació depèn del problema concret, del nombre de característiques i de la capacitat del hardware quàntic disponible.

4.4 Mapes de Característiques Quàntiques (Quantum Feature Maps)

Els mapes de característiques quàntiques són circuits que transformen dades clàssiques codificades en estats quàntics dins un espai de Hilbert de dimensionalitat elevada. La idea és portar les dades a un espai on els patrons siguin més fàcilment separables, aprofitant la potència de la mecànica quàntica. Aquest concepte és similar al dels kernels en l'aprenentatge automàtic clàssic, però amb la diferència que aquí es treballa amb estats quàntics i es pot aprofitar la superposició i l'entrellaçament.

Un exemple senzill de mapa de característiques seria aplicar rotacions R_y a cada qubit segons els valors de les dades. Tot i això, per obtenir més capacitat expressiva, es poden dissenyar mapes que introdueixin interaccions entre qubits. Per exemple, el *ZZFeatureMap*, molt conegut en la literatura, inclou termes de la forma:

$$\exp(-i \cdot x_i \cdot x_j \cdot Z_i \otimes Z_j),$$

la qual cosa introdueix correlacions no trivials entre les característiques x_i i x_j .

El potencial d'aquests mapes radica en diversos aspectes:

- Permeten portar dades a un espai on siguin més fàcilment linealment separables.
- Aprofiten la superposició per representar múltiples estats simultàniament.
- Utilitzen l'entrellaçament per capturar correlacions complexes entre característiques.

Tanmateix, cal un compromís: un mapa massa senzill pot no tenir suficient expressivitat, mentre que un de massa complex pot requerir circuits profunds difícils d'implementar en maquinari actual. És per això que en la recerca actual s'exploren maneres d'optimitzar automàticament els mapes de característiques, buscant el millor equilibri entre potència expressiva i eficiència computacional.

4.5 Tipus d'Algorismes en Quantum Machine Learning

Els algorismes d'aprenentatge automàtic quàntic es poden classificar en diverses famílies segons l'estructura i el tipus de tasca que resolen. A continuació es destaquen les principals categories utilitzades en la recerca actual:

Mètodes de Kernel Quàntic

Els mètodes de *kernel* quàntic aprofiten circuits quàntics per projectar les dades d'entrada en espais de característiques d'alta dimensionalitat. Un exemple destacat és la *Quantum Support Vector Machine (QSVM)*, que utilitza mapes de característiques quàntiques per calcular la funció kernel de manera eficient. Aquesta família d'algorismes és especialment rellevant perquè pot millorar la separabilitat de dades no linealment separables en l'espai original, aprofitant la complexitat dels espais de Hilbert quàntics.

Xarxes Neuronals Quàntiques (QNN)

Les xarxes neuronals quàntiques són una extensió natural dels models clàssics, on les capes de la xarxa són implementades mitjançant circuits quàntics. Les *Quantum Neural Networks (QNN)* es basen en circuits variacionals que s'optimitzen amb mètodes clàssics [11]. Els circuits variacionals són circuits amb parametres, els quals els ajustem per optimització clàssica. Existeixen adaptacions com les *Quantum Convolutional Neural Networks (QCNN)*, inspirades en les CNN clàssiques, que aprofiten les propietats quàntiques per a l'extracció de característiques jeràrquiques. Aquest tipus d'algorismes té un gran potencial en àrees com la classificació d'imatges quàntiques i la detecció de patrons complexos [12].

Transformers i Models Generatius

Un àmbit emergent és la investigació en *quantum transformers* i altres models generatius quàntics. Aquests models intenten portar la potència dels transformers,

utilitzats en tasques de processament de llenguatge natural i seqüències, cap al context quàntic. També destaquen els *Quantum Autoencoders*, que es fan servir per a compressió i reducció de soroll en dades quàntiques, així com les *Quantum Boltzmann Machines (QBM)*, que modelen distribucions probabilístiques complexes.

Altres Algorismes Híbrids

Finalment, existeix una categoria d'algorismes híbrids que combinen parts clàssiques i quàntiques per aprofitar el millor de cada món. Algorismes com el *Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)*, tot i estar pensats inicialment per a optimització combinatòria, també tenen aplicacions en aprenentatge automàtic, especialment en contextos d'aprenentatge per reforç. Altres enfocaments inclouen *Quantum Reservoir Computing*, útil per al tractament de dades temporals, i mètodes de clustering quàntic, com el *Quantum k-Means*.

5 Ecosistema actual de la computació quàntica

5.1 Panoràmica de llibreries i plataformes

L'accés a la computació quàntica es realitza actualment mitjançant un conjunt creixent de llibreries, SDKs i plataformes cloud. Algunes de les opcions més destacades inclouen:

- **Qiskit** (IBM): llibreria de codi obert amb integració directa a maquinari d'IBM.
- **Cirq** (Google): enfocada a circuits NISQ i maquinari com Sycamore.
- **PennyLane** (Xanadu): forta integració amb machine learning via PyTorch o TensorFlow.
- **Amazon Braket, Azure Quantum**: interfícies cloud amb accés a maquinari divers (IonQ, Rigetti, etc.).

Aquest treball se centrarà en **Qiskit**, tant per la seva maduresa com pel seu ecosistema complet per al desenvolupament, simulació i execució en maquinari real.

5.2 Simuladors: execució local i amb soroll

Els simuladors de Qiskit, proporcionats pel mòdul `qiskit-aer`, permeten l'execució de circuits quàntics de manera eficient i controlada sobre maquinari clàssic. Aquests entorns resulten fonamentals tant per a la fase de desenvolupament com per a l'anàlisi prèvia a l'execució en dispositius físics, especialment dins del context dels ordinadors NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum).

Qiskit ofereix diversos simuladors, cadascun amb característiques específiques:

- **StatevectorSimulator**: retorna el vector d'estat complet del sistema quàntic. És útil per a visualitzar la superposició i amplituds, però no incorpora la noció de mesura.
- **QASM Simulator**: emula mesuraments reals mitjançant l'execució de múltiples `shots`, retornant la distribució de resultats com si el circuit s'hagués executat en maquinari.
- **AerSimulator**: el més complet, amb suport per a múltiples modes (statevector, density matrix, unitary, etc.) i per a afegir models de soroll personalitzats (`NoiseModel`), incloent decoherència, errors de porta, de mesura i crosstalk.

Aquests simuladors poden operar en dues configuracions: sense soroll (ideal) i amb soroll (NISQ-like). En el mode ideal, totes les operacions es consideren perfectes i el comportament del circuit és determinista. En canvi, en el mode amb

soroll, s'introdueixen canals com la despolarització o la relaxació, que degraden l'estat quàntic de manera semblant a com ho faria un ordinador real. Aquesta capacitat permet comparar l'execució ideal amb una execució degradada per errors físics, aportant una comprensió crítica del rendiment i la robustesa dels circuits.

Tots els simuladors de `qiskit-aer` es basen en motors optimitzats en C++ i utilitzen la tècnica de vectorització per aprofitar l'acceleració amb CPU o GPU. A més, permeten controlar el backend via `backend_options`, emular retards entre portes (`delay`) i afegir `noise models` predefinits o personalitzats.

Considerem un circuit de Bell executat primer en un simulador ideal i després amb un model de soroll típic (depolarització + error de mesura):

Ideal: '00': 0.49, '11': 0.51

Amb soroll: '00': 0.42, '01': 0.06, '10': 0.05, '11': 0.47

La diferència entre l'execució ideal i la sorollosa revela com els errors afecten la fidelitat del circuit. Això és especialment rellevant per a circuits de classificació o optimització en QML, on el soroll pot desviar significativament els resultats. Comparant aquestes sortides, es poden estudiar les propietats de robustesa d'un algorisme abans d'executar-lo en maquinari real.

Tot i que els simuladors són essencials per a prototipatge i validació, tenen limitacions. No repliquen totes les fonts de soroll real (com errors temporals, fluctuacions quàntiques no modelades, etc.), i simular circuits grans amb molts qubits pot esdevenir intractable degut al creixement exponencial de la memòria requerida. A més, mentre que els simuladors permeten repetir una execució exacta, això no és sempre possible en maquinari real.

En resum, els simuladors són una eina indispensable en la computació quàntica moderna. Permeten anticipar l'efecte del soroll, ajustar els circuits abans de l'execució en maquinari real i comprendre millor el comportament quàntic. Tanmateix, cal considerar-los com una aproximació, i no com un substitut exacte, dels dispositius quàntics físics. Per això, és fonamental completar el cicle de desenvolupament amb proves sobre hardware real.

5.3 Primitives: execució estàndard moderna

A partir de Qiskit 2.0, les primitives `Estimator` i `Sampler` s'han convertit en el mètode recomanat per interactuar amb els backends, ja sigui en simuladors o en maquinari real. Aquestes primitives encapsulen el procés complet d'execució d'un circuit quàntic i ofereixen una interfície més senzilla, eficaç i alineada amb els fluxos de treball moderns de Quantum Machine Learning.

La primitiva **`Sampler`** s'utilitza per obtenir les probabilitats de mesura d'un circuit quàntic. Quan executem un circuit amb **`Sampler`**, aquest calcula la distribució de resultats que s'obtindria si mesuréssim els qubits en la base computacional (base Z) repetidament. Per exemple, si un circuit crea una superposició com $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, la sortida del **`Sampler`** hauria de reflectir una probabilitat propera a 0.5 per a '00' i '11', i 0 per a '01' i '10'. Aquestes distribucions es retornen

com un diccionari (`quasi_dists`) amb les claus corresponents als resultats binaris i valors entre 0 i 1.

El **Sampler** realitza aquest càlcul executant el circuit múltiples vegades (`shots`) i recollint les freqüències de mesura. En maquinari real, aquestes freqüències reflecteixen les distribucions que efectivament observariem, tenint en compte totes les imperfeccions físiques. Això ens permet obtenir una visió realista de les probabilitats de sortida i comprovar si el circuit genera l'estat esperat.

La primitiva **Estimator**, per altra banda, permet calcular el valor esperat (*expectation value*) d'un operador quàntic sobre un estat generat per un circuit. Aquesta operació és clau per a moltes aplicacions en QML i optimització quàntica. L'**Estimator** executa el circuit, projecta l'estat quàntic i calcula la mitjana del valor d'un observable especificat, que es defineix com una combinació d'operadors de Pauli, com ara $Z \otimes Z$ o $X \otimes I$.

Per exemple, si volem saber com de correlacionats estan dos qubits, podem definir un observable $Z \otimes Z$ i executar l'estimació. Si el valor esperat és pròxim a 1.0, significa que els qubits estan altament correlacionats (com en un estat de Bell). Si és pròxim a 0, vol dir que són pràcticament independents.

Ambdues primitives funcionen d'una manera molt eficient i transparent: el circuit es compila i s'envia al backend (simulador o maquinari real), on s'executa, i els resultats es retornen en forma de distribucions (**Sampler**) o valors reals (**Estimator**).

Aquest enfocament modern redueix la complexitat en el desenvolupament d'aplicacions quàntiques i proporciona una interfície robusta per treballar amb circuits tant en fase de prototipatge com en entorns de producció. **Sampler** i **Estimator** són especialment rellevants en contextos de Quantum Machine Learning, on el flux de treball imita el cicle clàssic d'entrenament: disseny d'un model (circuit), avaluació (valors esperats) i optimització.

5.4 Exemple conceptual: Sampler i Estimator sobre un circuit de Bell

Per validar el funcionament de les primitives de la llibreria `Qiskit Runtime`, s'ha implementat un exemple conceptual clàssic: el circuit de Bell. Aquest circuit genera un estat entrellaçat a partir d'una porta Hadamard aplicada al qubit 0 seguida d'una porta CNOT controlada sobre el qubit 1.

Circuit:

$$|0\rangle \xrightarrow{H} \xrightarrow{CX} \Rightarrow |\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Execució amb Sampler. S'ha executat el circuit sobre tres entorns diferents utilitzant la primitiva **Sampler**, que retorna la distribució de resultats per mesura a la base computacional.

- **Simulador ideal (AerSimulator):** resultats centrats en '00' i '11' amb proporcions aproximadament iguals, com s'espera per l'estat de Bell (vegeu Figura 4).
- **Simulador amb soroll realista:** s'ha utilitzat un backend simulat amb característiques d'un dispositiu real, on apareixen resultats espuris ('01' i '10'), però encara s'observa la dominància de les dues sortides esperades.
- **Maquinari real (IBM Quantum):** la distribució mesurada reflecteix la presència de soroll, però amb una correlació clara entre els qubits, consistent amb la presència d'entrellaçament.

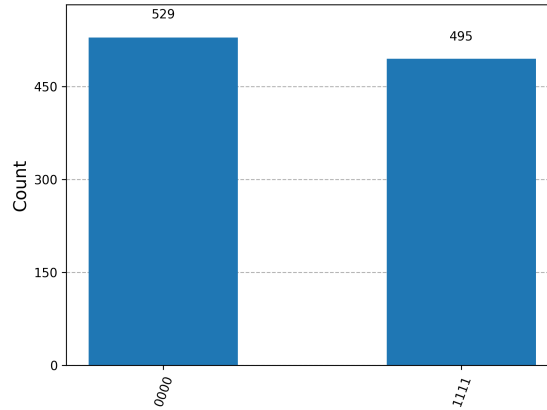


Figura 4: Distribució de resultats obtinguda amb el Sampler sobre el simulador ideal (AerSimulator). Es confirma l'entrellaçament: només apareixen 00 i 11.

Execució amb Estimator. S'ha fet servir la primitiva `Estimator` per avaluar el valor esperat de l'observable $Z \otimes Z$ sobre l'estat entrellaçat generat pel circuit. Teòricament, s'espera un valor de +1, ja que els dos qubits sempre tenen el mateix valor (00 o 11).

El circuit ha estat executat sobre backend simulat amb soroll i també sobre maquinari real. En ambdós casos, s'ha obtingut un valor estimat molt proper a 1.0, la qual cosa indica una correlació forta entre qubits malgrat la presència de soroll:

$$\langle ZZ \rangle \approx 0.923 \quad (\text{simulador amb soroll})$$

Aquest resultat confirma el correcte funcionament de l'estimació d'observables quàntics mitjançant la interfície moderna de Qiskit, i valida l'ús del framework per a experiments més complexos de classificació quàntica.

5.5 Conclusió

L'ecosistema de Qiskit proporciona una base sòlida per al desenvolupament de circuits quàntics, permetent explorar i validar mètodes d'aprenentatge amb simuladors

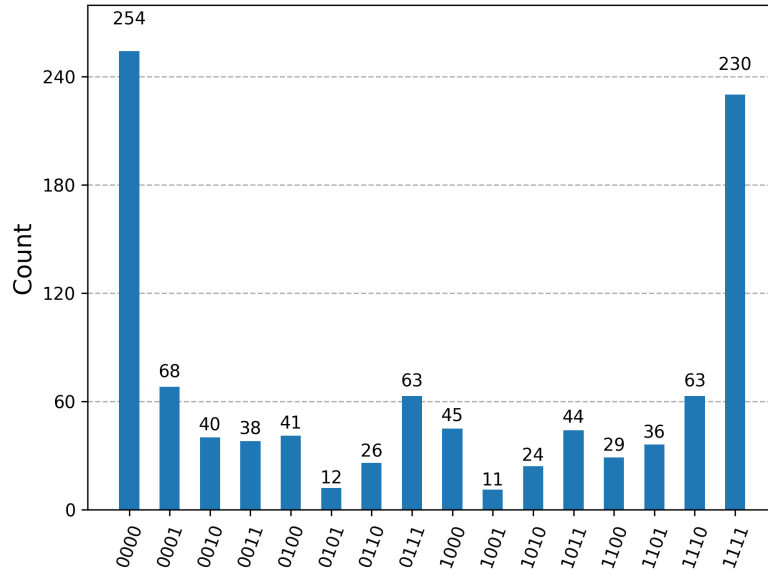


Figura 5: Distribució de resultats obtinguda amb el **Sampler** sobre un simulador amb soroll (**FakeBackend**). Tot i la presència d'errors, es mantenen les sortides dominants 00 i 11, indicant persistència parcial de l'estat entrellaçat.

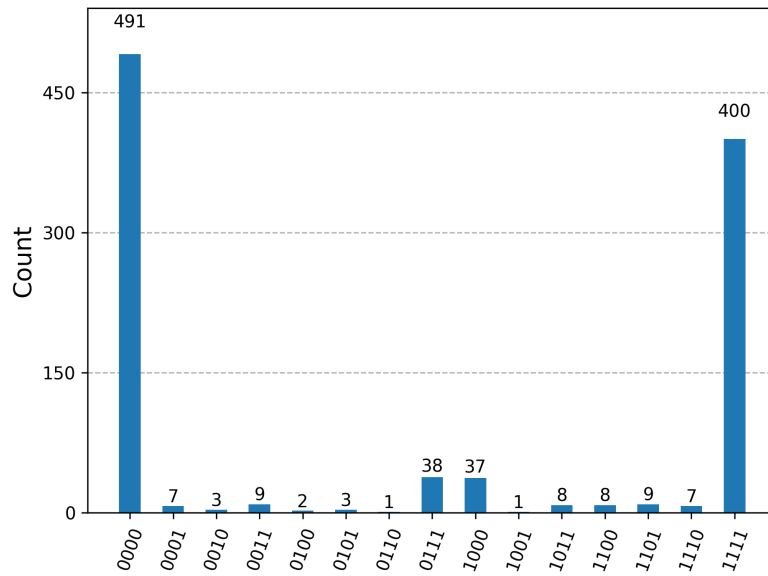


Figura 6: Distribució de resultats obtinguda amb el **Sampler** executat sobre maquinari quàntic real (IBM Quantum). L'aparició de resultats espuris com 01 i 10 reflecteix l'impacte del soroll físic, però es manté una correlació clara entre els qubits.

realistes i accés al maquinari real. Les primitives **Sampler** i **Estimator** ofereixen una interfície clara i eficient per treballar amb QML en entorns NISQ. A més, l'arquitectura modular de Qiskit i la seva integració amb serveis cloud el converteixen en una eina idònia per al desenvolupament i testatge de models quàntics en l'estat actual de la tecnologia.

6 Kernel Quàntic

6.1 Definició

Els algoritmes de classificació basats en *kernel* consisteixen a transformar les dades d'entrada mitjançant una funció no lineal $\phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{H}$, de manera que aquestes siguin linealment separables en un espai de característiques de major dimensionalitat. En comptes de calcular explícitament aquesta transformació, es fa servir una funció *kernel* que calcula el producte escalar implícit:

$$K(\vec{x}, \vec{x}') = \langle \phi(\vec{x}) | \phi(\vec{x}') \rangle.$$

En el context quàntic, aquesta noció es trasllada codificant cada dada $\vec{x}$ en un estat quàntic $|\phi(\vec{x})\rangle$, mitjançant un circuit quàntic. La similitud entre mostres s'avalua a partir de la fidelitat entre estats:

$$K(\vec{x}, \vec{x}') = |\langle \phi(\vec{x}) | \phi(\vec{x}') \rangle|^2.$$

Aquest enfocament, conegut com a *Quantum Kernel Estimation* (QKE), és especialment rellevant quan la codificació quàntica genera espais de característiques que són inaccessibles o costosos de simular clàssicament.

6.2 Implementació

Per implementar el kernel quàntic, s'ha dissenyat un circuit de codificació (*feature map*) sobre dos qubits, compost per rotacions R_y i R_z , seguides d'una porta d'entrelaçament CZ . Aquest circuit transforma vectors de dues característiques en estats quàntics del tipus:

$$|\phi(\vec{x})\rangle = CZ \cdot (R_z(x_1) \otimes R_y(x_0)) |00\rangle.$$

El circuit corresponent és:

```
def feature_map(x):
    qc = QuantumCircuit(2)
    qc.ry(x[0], 0)
    qc.rz(x[1], 1)
    qc.cz(0, 1)
    return qc
```

Per calcular el kernel entre dues mostres, es construeix el circuit compost $U(\vec{x}) \cdot U^\dagger(\vec{x}')$, i s'utilitza la primitiva `EstimatorV2` per estimar el valor esperat d'un observable compost de Pauli. Aquest procés s'optimitza i executa sobre un backend simulat (`FakeAlmadenV2`) que reflecteix les característiques físiques d'un dispositiu real.

6.3 Experiment inspirat en [10]

En aquest experiment he volgut reproduir i explorar un escenari similar al proposat per [10], on es demostra una separació formal entre la capacitat predictiva de models clàssics i quàntics. Els autors proposen un conjunt de dades generat a partir d'una codificació algebraica basada en el logaritme discret dins del grup multiplicatiu $\mathbb{Z}_p^*$, per algun nombre primer p . Aquesta construcció, tot i ser computacionalment intractable per algorismes clàssics en general (sense coneixement del logaritme), permet una representació natural mitjançant circuits quàntics.

Generació del conjunt de dades. A partir d'un primer nombre $p = 199$ i un generador $g = 3$ del grup $\mathbb{Z}_p^*$, es generen les dades com:

$$X = \{1, 2, \dots, p-1\}, \quad y = \text{sign}(\log_g(x) \in I_s)$$

on $\log_g(x)$ és el logaritme discret de x respecte g , i $I_s \subset \mathbb{Z}_{p-1}$ és un interval aleatori que determina la classe de cada mostra. Aquest etiquetatge simula una separació no lineal que, segons [10], és difícil de detectar per mètodes clàssics però fàcilment expressable en espais de característiques quàntics.

Model clàssic. S'ha entrenat un model de regressió logística i un SVM amb kernel RBF sobre el conjunt de dades generat. Després de 20 iteracions amb intervals aleatoris, s'han obtingut les següents millors precisions:

- Regressió logística: **0.533**
- SVM (kernel RBF): **0.550**

La Figura 7 mostra de forma visual la classificació real (esquerra) i les prediccions fetes per ambdós models clàssics. S'hi pot observar que, tot i captar parcialment l'estructura global de les classes, tant la regressió logística com el SVM amb kernel RBF tenen dificultats per separar les regions amb canvi sobtat d'etiquetes. Això es deu al fet que la funció que genera les etiquetes és, per disseny, no lineal i aparentment aleatòria, dificultant l'ajust de qualsevol frontera de decisió suau o basada en derivades.

A més, a la Figura 8 es representa l'evolució de l'accuràcia màxima dels models clàssics en funció del valor del primer nombre p utilitzat per generar les dades. Els resultats mostren clarament una tendència decreixent: a mesura que p augmenta, la classificació esdevé més difícil i la precisió dels models s'apropa progressivament al llindar dels 0.5, corresponent a una classificació aleatòria. Aquesta observació empírica reforça la hipòtesi plantejada per [10], segons la qual problemes amb estructura generada a partir del logaritme discret són intrínsecament difícils per a l'aprenentatge clàssic, fins i tot amb tècniques no lineals com SVM amb kernel RBF.

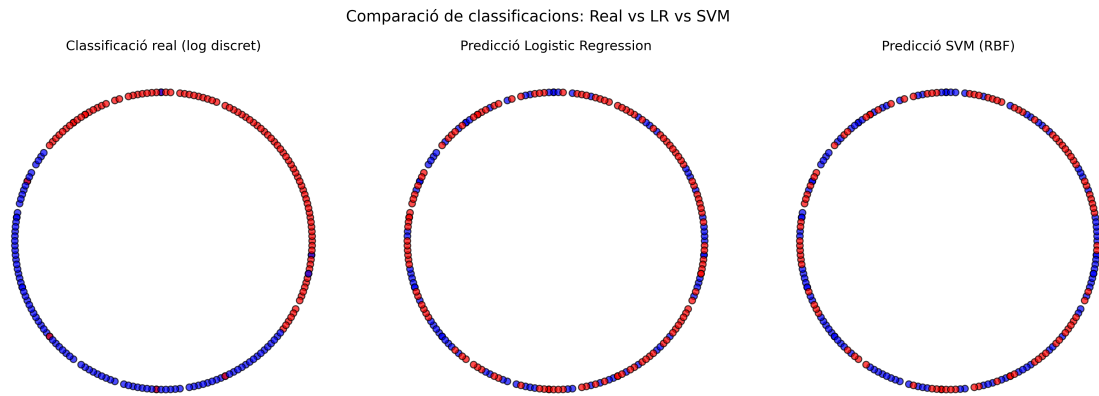


Figura 7: Comparació visual de les classificacions: a l'esquerra, la classificació real generada amb el logaritme discret; al centre, la predicció de la regressió logística; i a la dreta, la predicció del SVM amb kernel RBF. Les dades estan representades sobre el cercle unitari mitjançant l'angle $\theta = 2\pi \cdot \log_g(x)/(p-1)$, aplicant el logaritme discret com a coordenada angular. Els models clàssics tenen dificultats per capturar la frontera no lineal generada de manera pseudorandom.

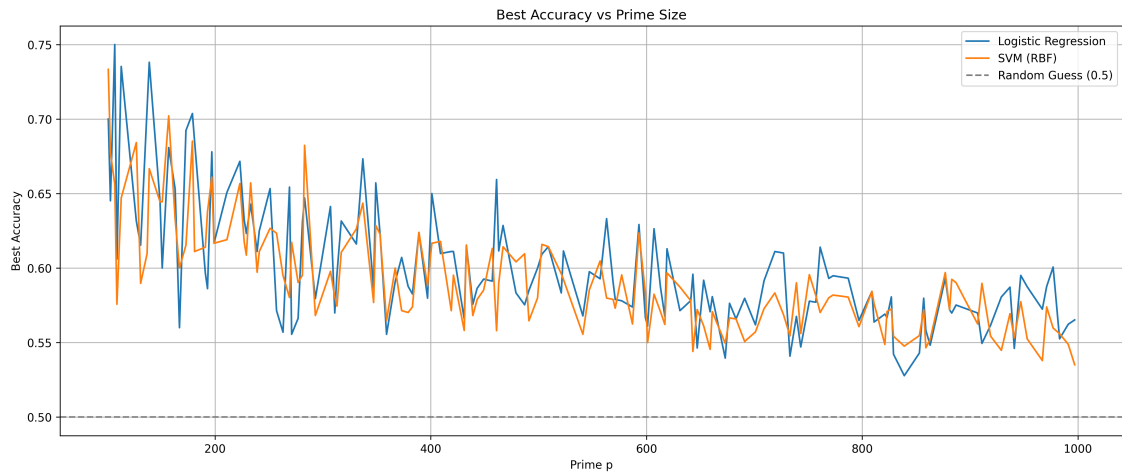


Figura 8: Evolució de la millor precisió obtinguda per models clàssics en funció del valor primer p emprat per generar les mostres. Es pot veure clarament una tendència decreixent cap a una precisió propera al 0.5, fet que indica la creixent dificultat dels models clàssics per capturar patrons en funcions de tipus pseudorandom.

Model quàntic. S’ha implementat un kernel quàntic personalitzat a partir d’un *feature map* de 3 qubits, compost exclusivament per rotacions R_y aplicades en dues capes successives. En aquest cas, s’ha omès l’entrellaçament entre qubits per tal de simplificar el circuit i analitzar l’efecte de les rotacions individuals en la representació de les dades.

Formalment, cada mostra $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ es codifica mitjançant el circuit:

$$|\phi(\vec{x})\rangle = \prod_{l=1}^2 \bigotimes_{i=1}^3 R_y(x_i) |0\rangle,$$

on cada qubit rep rotacions en dues capes consecutives basades en les components del vector d’entrada. Aquest circuit genera una codificació simètrica i simple, però limitada en expressivitat.

La matriu de kernel quàntic s’ha calculat per totes les parelles d’elements de l’entrenament i del test, utilitzant el simulador **AerSimulator** i una fidelitat basada en la probabilitat de mesurar $|000\rangle$. Posteriorment, s’ha entrenat un classificador SVM amb kernel precomputat. Tanmateix, com que el circuit no genera prou variació entre les codificacions quàntiques, la fidelitat entre estats diferents és molt similar i el model no ha estat capaç de trobar una frontera de decisió útil.

El resultat ha estat una precisió de classificació inferior al 0.5, amb un model que classifica totes les mostres en una mateixa classe:

Accuracy amb Quantum Kernel (3 qubits, sense entrellaçament) = **0.4667**

Aquest comportament es pot visualitzar a la Figura ??, on es comparen les etiquetes reals i les prediccions del model per al conjunt de test. Tots els punts són classificats com a classe negativa (-1), mostrant la manca de capacitat discriminativa del circuit actual.

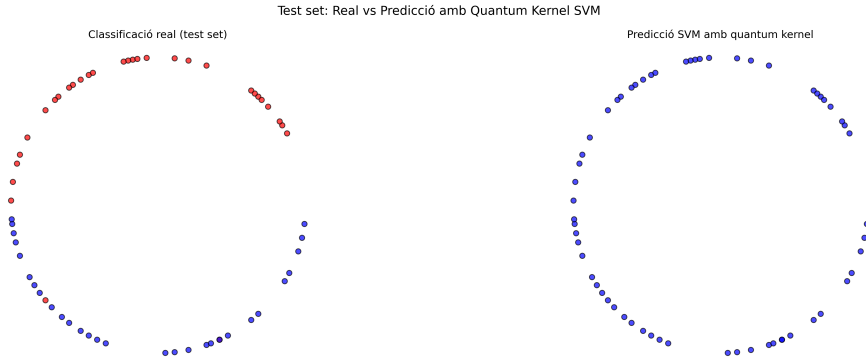


Figura 9: Resultats del model quàntic amb *feature map* modular: la classificació real (esquerra) i la predicció (dreta). Les dades estan representades sobre el cercle unitari segons l’angle $\theta = 2\pi \cdot \log_g(x)/(p-1)$, és a dir, aplicant el logaritme discret com a coordenada angular.

6.4 Anàlisi i resultats

Tot i que el marc teòric proposat per [10] estableix una separació formal entre els models clàssics i quàntics en entorns generats per funcions pseudorandom, la implementació pràctica d'un kernel quàntic que exploti aquest avantatge és un repte considerable. En aquest treball s'ha explorat una segona aproximació basada en un *feature map* modular i escalable a un nombre variable de qubits, amb rotacions R_y repetides segons un patró determinista a partir de les dades codificades. Tot i la simplicitat i la flexibilitat del disseny, els resultats han estat decebedors: el classificador ha predit la mateixa classe per a totes les mostres del conjunt de test, amb una precisió inferior al llindar aleatori del 50%.

Aquest comportament pot atribuir-se a diverses causes:

- **Insuficient capacitat expressiva del circuit:** el *feature map* emprat no genera entrellaçament entre qubits ni introdueix prou complexitat geomètrica per reflectir les correlacions no trivials del conjunt de dades. Tal com apunten Liu et al., el poder del QKE rau en la capacitat de certs circuits de projectar les dades en una varietat quàntica complexa, quelcom que aquest mapeig no aconsegueix.
- **Estimació amb pocs *shots*:** l'ús d'un únic *shot* per estimar la fidelitat entre estats pot introduir un alt soroll estadístic en la matriu de kernel. Això pot produir una matriu poc discriminativa, que condueix a una funció de decisió plana per part de l'SVM.
- **Simulació idealitzada sense soroll realista:** la implementació ha estat executada sobre un backend simulat ideal (Qiskit `AerSimulator`), i per tant no es beneficien de possibles efectes estocàstics o estructurals presents en sistemes físics. A més, tampoc es reproduïxen les limitacions de fidelitat i decoherència reals, que podrien tenir efectes contraposats sobre la qualitat del kernel.

Aquest resultat no desmenteix la validesa del paradigma QKE, però sí que posa en evidència que la seva aplicació pràctica no és trivial. Calen circuits més sofisticats, idealment adaptats al problema concret, i una execució robusta —amb múltiples *shots* o sobre maquinari tolerant a errors— per capturar els avantatges teòrics que el formalisme prediu. Com a línia futura, es proposa explorar circuits amb entrellaçament, codificacions periòdiques no trivials, o fins i tot fer ús d'optimitzacions variacionals per ajustar el *feature map* a la distribució de les dades.

7 Algorisme Variational Quantum Classifier (VQC)

7.1 Descripció conceptual i formal

El *Variational Quantum Classifier* (VQC) és un algorisme híbrid per a classificació binària que combina circuits quàntics parametritzats amb tècniques d'optimització clàssica. Aquesta arquitectura resulta especialment adequada per a dispositius NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*), ja que explota la capacitat expressiva de la mecànica quàntica sense requerir una correcció d'errors massiva [13].

El VQC s'estructura en quatre etapes principals:

1. **Codificació de dades (feature map):** Cada mostra clàssica $\vec{x} \in \mathbb{R}^d$ es transforma en un estat quàntic mitjançant un conjunt de portes que depenen de $\vec{x}$, generant l'estat $U_{\text{feat}}(\vec{x})|0\rangle^{\otimes n}$. Aquesta codificació projecta les dades en un espai de Hilbert on la separació entre classes pot esdevenir més accessible [14].
2. **Circuit variacional (ansatz):** S'aplica un circuit quàntic amb paràmetres lliures $\vec{\theta}$, compost típicament per rotacions Ry , Rz i portes d'entrellaçament com CX [15]. Aquest circuit, denotat per $U_{\text{var}}(\vec{\theta})$, modifica l'estat codificat amb l'objectiu d'adaptar-lo a la tasca de classificació.
3. **Mesura i decisió:** Després d'aplicar el circuit, es mesura un o diversos qubits per obtenir una probabilitat de classificació. Per exemple, si es mesura el primer qubit, la probabilitat de predir la classe 1 és:

$$p(1|\vec{x}, \vec{\theta}) = \left| \left\langle 1 \left| U_{\text{var}}(\vec{\theta}) U_{\text{feat}}(\vec{x}) \right| 0 \right\rangle^{\otimes n} \right|^2.$$

La decisió final es pren comparant aquesta probabilitat amb un llindar, generalment fixat a 0.5.

4. **Entrenament clàssic:** Els paràmetres $\vec{\theta}$ es minimitzen utilitzant una funció de pèrdua (com la *square loss* o la *cross-entropy*), mitjançant un optimitzador clàssic. Aquest entrenament es pot dur a terme amb mètodes com el descens de gradient per aproximacions numèriques o algorismes com SPSA [?].

Aquesta estructura converteix el VQC en una espècie de xarxa neuronal quàntica, on els paràmetres del circuit actuen com pesos entrenables, i el *feature map* defineix l'espai de representació sobre el qual es duu a terme la classificació.

7.2 Implementació pràctica amb dades reals

Per tal de validar el funcionament del VQC sobre dades reals, s'ha utilitzat el conjunt de dades **Breast Cancer Wisconsin** proporcionat per la llibreria **scikit-learn**. Aquest dataset conté 569 mostres amb 30 característiques cadascuna, classificades en dues classes: tumors malignes ($y = 0$) i tumors benignes ($y = 1$).

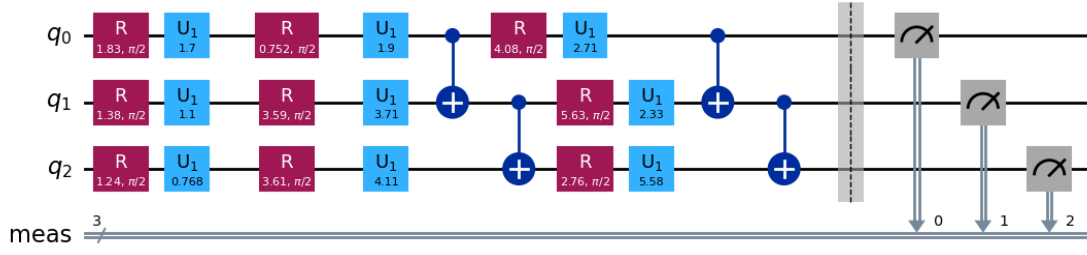


Figura 10: Representació d'el circuit VQC utilitzat per a la classificació. Cada qubit és inicialitzat a l'estat $|0\rangle$ i les portes R_y i R_z són aplicades en funció de les característiques d'entrada. Les portes CNOT generen entrellaçament entre els qubits.

7.2.1 Preprocessat i codificació

Per adaptar les dades a un entorn quàntic, s'han seleccionat sis característiques rellevants entre les disponibles (per exemple: *mean radius*, *mean area*, *mean smoothness*, etc.) i s'han escalat a l'interval $[0, \pi]$ mitjançant la tècnica *MinMaxScaler*. Aquesta escalada és necessària per tal que puguin ser usades com angles de rotació en les portes quàntiques R_y i R_z .

Per reduir la mida del circuit, s'ha limitat l'experiment a $n = 3$ qubits, utilitzant només tres de les característiques en cada execució. La codificació clàssica-quàntica s'ha implementat amb un *feature map* que aplica rotacions R_y i R_z a cada qubit en funció de la combinació lineal i quadràtica de les característiques corresponents.

7.2.2 Arquitectura del circuit VQC

El circuit total s'ha compost de dues parts:

1. **Feature Map:** rotacions R_y i R_z per cada qubit, amb angles derivats de les dades d'entrada.
2. **Ansatz variacional:** capes de portes parametrizables R_y i R_z , repetides en dues capes. Entre capes, s'ha afegit entrellaçament mitjançant portes CNOT en qubits adjacents.

El circuit final s'ha mesurat completament, i s'ha considerat el valor del qubit 0 com a resultat binari per a la classificació. La classe assignada ha estat:

$$\hat{y} = \begin{cases} 1 & \text{si la probabilitat de mesurar } |1\rangle > 0.5 \\ 0 & \text{en cas contrari} \end{cases}$$

7.2.3 Entrenament amb optimització clàssica

S'ha inicialitzat un vector de paràmetres aleatori i s'ha optimitzat mitjançant un mètode de gradient numèric. A cada iteració:

- Es calcula la funció de cost com la **pèrdua quadràtica** entre la probabilitat estimada $p(|1\rangle)$ i la classe real.
- Es calcula el gradient per cada paràmetre per diferències finites:

$$\frac{\partial L}{\partial \theta_i} \approx \frac{L(\theta_i + \delta) - L(\theta_i - \delta)}{2\delta}$$

- Els paràmetres es modifiquen amb una taxa d'aprenentatge α .

```
def cost(params, X, y, sampler, n_qubits, entangle=True):
    total_loss = 0
    for xi, yi in zip(X, y):
        qc = construct_circuit(xi, params, n_qubits, entangle)
        result = sampler.run([qc]).result()
        counts = result[0].data.meas.get_counts()
        total_counts = sum(counts.values())
        prob_1 = sum(c for b, c in counts.items() if b[-1] == '1') /
    total_counts
    total_loss += (prob_1 - yi) ** 2
    return total_loss / len(X)
```

```
# Entrenament amb gradient numeric
for epoch in range(epochs):
    grads = np.zeros_like(params)
    for i in range(len(params)):
        plus_params = np.copy(params)
        minus_params = np.copy(params)
        plus_params[i] += delta
        minus_params[i] -= delta
        grads[i] = (cost(plus_params, X_train, y_train, sampler,
n_qubits, entangle)
                    - cost(minus_params, X_train, y_train, sampler,
n_qubits, entangle)) / (2 * delta)
    params -= alpha * grads
```

El procés es repeteix durant diverses èpoques, i s'emmagatzema la pèrdua per a traçar la corba de convergència.

7.2.4 Resultats preliminars i visualització

Un cop entrenat el model, s'ha aplicat el circuit sobre les dades de validació. La predicció es basa en la probabilitat de mesurar $|1\rangle$ al qubit de sortida, i s'ha comptabilitzat l'exactitud del model com el percentatge de classificacions correctes. També s'ha representat el circuit entrenat visualment i s'ha calculat la distribució de probabilitats per a algunes mostres representatives.

Els resultats obtinguts es mostren en la següent secció comparativa amb i sense soroll.

7.3 Simulació amb soroll i comparació

7.3.1 Evolució de la funció de cost

A les Figures 11 i 12, es mostra la pèrdua quadràtica (square loss) al llarg de 10 èpoques, tant per al cas ideal (sense soroll) com per a l'escenari amb soroll simulant un dispositiu NISQ.

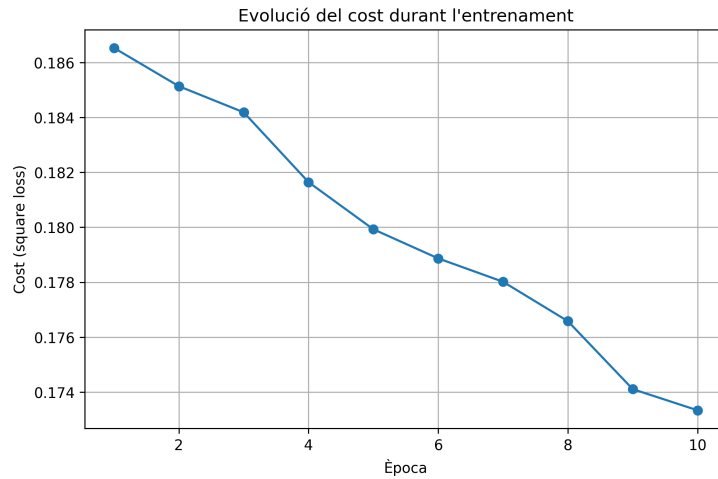


Figura 11: Evolució de la pèrdua quadràtica durant l'entrenament (simulador ideal)

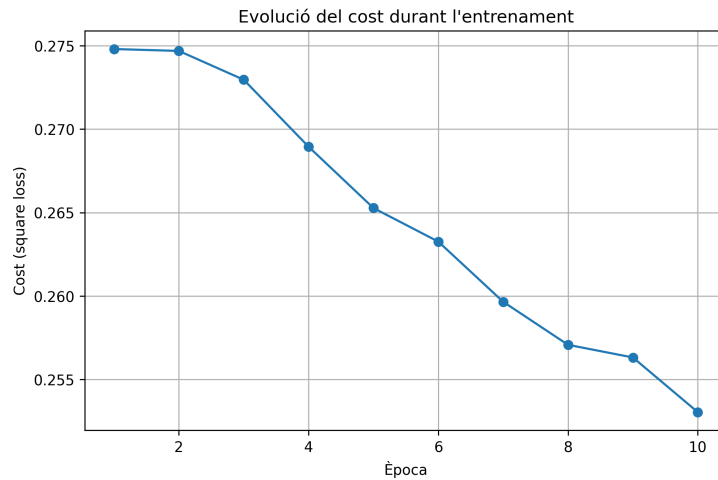


Figura 12: Evolució de la pèrdua quadràtica amb simulació de soroll

En ambdós casos, el cost decreix de forma sostinguda, fet que indica una convergència efectiva de l'optimització. Tot i això, s'observa que el valor inicial i final del cost en l'escenari amb soroll és lleugerament superior, suggerint que el soroll afecta negativament la capacitat d'ajust del model.

7.3.2 Visualització de la classificació

La Figura 14 representa la classificació feta pel VQC en dues dimensions. Els colors indiquen la classe real (0 en vermell, 1 en blau), i la forma (cercle o creu) representa si la predicció ha estat correcta o no.

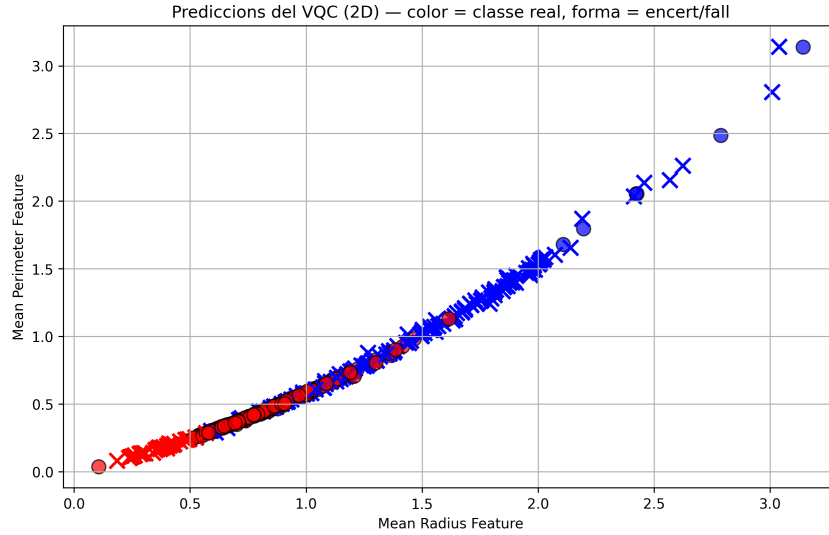


Figura 13: Classificació 2D del VQC: color = classe real, forma = encert o error

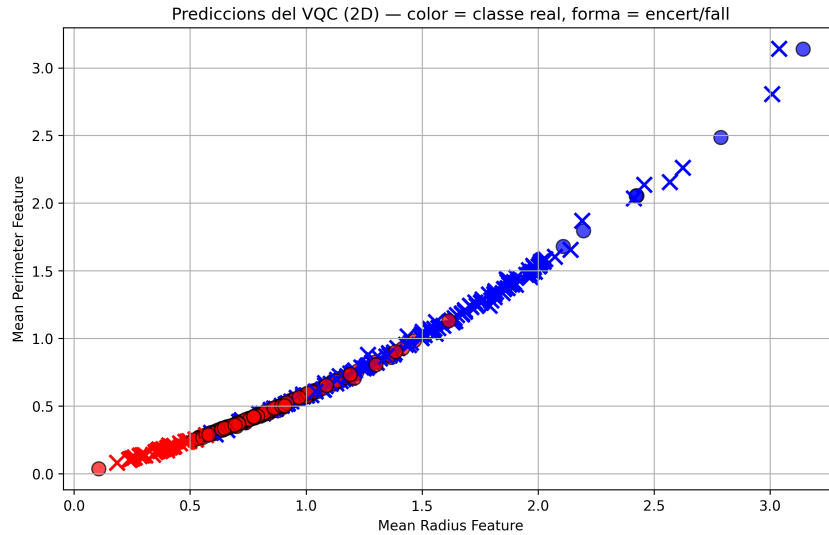


Figura 14: Classificació 2D del VQC: color = classe real, forma = encert o error

S'observa que el model és capaç de separar amb bastant precisió les dues classes dins de l'espai projectat. Els errors es concentren a les fronteres entre classes, on les dades són menys separables.

7.3.3 Probabilitat de mesura i errors

Les Figures 15 i 16 mostren la probabilitat estimada de mesurar $|1\rangle$ per cada entrada, comparada amb la seva classe real. El llindar 0.5 s'utilitza per decidir la classificació. Les creus representen les mostres mal classificades.

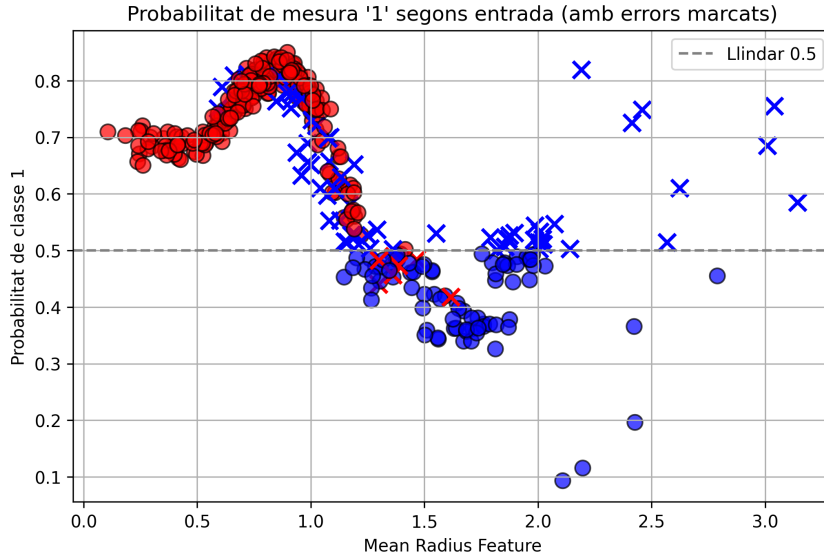


Figura 15: Probabilitat de mesura $|1\rangle$ vs entrada (simulador ideal)

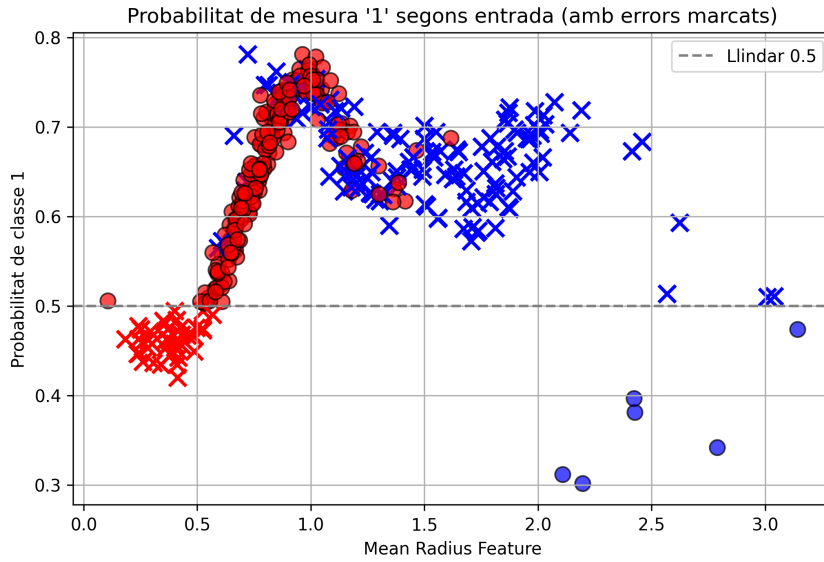


Figura 16: Probabilitat de mesura $|1\rangle$ vs entrada (simulació amb soroll)

En l'escenari ideal (Figura 15), el model presenta una transició clara entre classes al voltant del llindar. Amb soroll (Figura 16), la corba es torna més difusa i apareixen més errors a les zones crítiques, evidenciant la sensibilitat del VQC als efectes del soroll quàntic.

8 Conclusions

8.1 Conclusions generals

Aquest treball ha servit com una immersió rigorosa en el camp del *Quantum Machine Learning* (QML), combinant una anàlisi teòrica de la literatura actual amb implementacions pràctiques mitjançant la llibreria Qiskit. L'estudi s'ha centrat en mètodes de classificació supervisada, en particular en els *quantum kernels* i els circuits variacionals (VQC), utilitzant el problema del logaritme discret com a escenari d'avaluació.

Tot i això, cal remarcar que els experiments realitzats **no han permès validar empíricament l'avantatge teòric dels models quàntics**, ni tampoc obtenir millores significatives respecte als mètodes clàssics. Això no desmereix el valor del treball: més enllà dels resultats, ha estat una oportunitat per **entendre en profunditat els fonaments del QML, els seus fluxos de treball i les dificultats pràctiques associades**, tant a nivell de codificació com d'execució i interpretació.

8.2 Limitacions

La principal limitació ha estat la manca d'accés continu a maquinari quàntic real, fet que ha obligat a fer servir simuladors ideals o amb soroll afegit. Tot i ser útils per a prototipatge, aquests entorns no reproduïxen fidelment la dinàmica quàntica d'un sistema físic. A més, molts dels circuits implementats s'han dissenyat amb una profunditat i un entrellaçament limitats —per qüestions de temps i recursos computacionals—, cosa que ha restringit la capacitat expressiva dels models.

També cal tenir en compte els costos associats a l'accés al hardware quàntic: per exemple, l'accés a IBM Quantum en mode “Pay-As-You-Go” parteix de 96 USD per minut d'ús, mentre que Amazon Braket aplica una tarifa de 0,30 USD per tasca més 0,03 USD per shot sobre la QPU, i el procediment estàndard és aplicar 1024 shots per circuit.

També cal esmentar que l'entrenament de circuits variacionals amb optimitzadors clàssics i pocs *shots* pot conduir a un ajust deficient o a solucions planes. Això s'ha evidenciat en diversos experiments on el model no ha après respostes significatives o ha classificat totes les mostres en una mateixa classe.

8.3 Línies futures de treball

Malgrat els resultats limitats, aquest treball constitueix una base sòlida per continuar explorant el potencial del QML. Com a línies futures, es proposa:

- Repetir els experiments clau sobre **maquinari quàntic real**, per analitzar-ne el comportament sota soroll físic i validar l'execució de circuits amb entrellaçament.

- Dissenyar **feature maps més expressius** que incorporin correlacions entre qubits, així com explorar estratègies de *data re-uploading* per incrementar la capacitat representacional.
- Investigar l'ús de **optimitzadors quàntics** o híbrids que redueixin la dependència de l'entrenament clàssic i la sensibilitat al soroll.

Aquest treball ha contribuït, doncs, a adquirir una comprensió sòlida dels fonaments del QML i a identificar els obstacles concrets que cal superar. Lluny de suposar una solució immediata, el Quantum Machine Learning s'ha de veure com un **complement potent als models clàssics**, especialment en escenaris de dades no lineals o estructures intrínsecament difícils. Aquesta recerca marca l'inici d'un camí que, si bé encara és tecnològicament limitat, ofereix un gran potencial per al futur de la computació intel·ligent.

Més enllà dels resultats concrets d'aquest treball, la computació quàntica continua obrint noves línies de recerca apassionants, amb potencial per transformar àrees com la simulació quàntica, la criptografia post-quàntica i, de manera molt destacada, el machine learning. Avanços recents en maquinari tolerant a errors, disseny de circuits adaptatius, codificació topològica i algorismes quàntics híbrids estan començant a configurar una nova generació de models quàntics més robustos, escalables i generalitzables. Dins aquest escenari, el Quantum Machine Learning s'albira com una de les aplicacions més prometedores, gràcies a la seva capacitat d'expressar relacions no trivials entre dades, d'explorar espais de característiques inaccessibles clàssicament i d'integrar-se en fluxos de treball híbrids cada vegada més potents.

El coneixement adquirit en aquest treball permetrà seguir explorant aquest camí amb una base sòlida i un criteri crític. En definitiva, el QML no ve per substituir l'aprenentatge automàtic clàssic, sinó per **complementar-lo i potenciar-lo**, obrint portes a noves formes de representar, entendre i processar la informació.

Referències

- [1] Nielsen, M. A.; Chuang, I. L.: *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 2000.
- [2] Benedetti, M.; Lloyd, E.; Sack, S.; Fiorentini, M.: Parameterized quantum circuits as machine learning models, *Quantum Science and Technology*, 4(4):043001, 2019.
- [3] Schuld, M.; Sinayskiy, I.; Petruccione, F.: An introduction to quantum machine learning, *Contemporary Physics*, 56(2):172–185, 2015.
- [4] Susskind, L.; Friedman, A.: *Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum*, Basic Books, 2014.
- [5] Grant, E.; Benedetti, M.; Cao, S. et al.: Hierarchical quantum classifiers, *npj Quantum Information*, 4(1):1–8, 2018.
- [6] Schuld, M.; Killoran, N.: Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces, *Physical Review Letters*, 122(4):040504, 2019.
- [7] Ciliberto, C. et al.: A comprehensive review of quantum machine learning, *arXiv:1806.11484*, 2018.
- [8] Johnson, N. G. et al.: Evaluating the Potential of Quantum Machine Learning in Cybersecurity: A Case Study on PCA-Based Intrusion Detection Systems, *Computers & Security*, 2025.
- [9] Ding, C.; Wang, S.; Wang, Y.; Gao, W.: Quantum Machine Learning for Multiclass Classification Beyond Kernel Methods, *arXiv:2411.02913*, 2024.
- [10] Liu, Y.; Arunachalam, S.; Temme, K.: A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning, *arXiv:2010.02174*, 2020.
- [11] Schuld, M., Sinayskiy, I., & Petruccione, F. (2014). The quest for a Quantum Neural Network. *Quantum Information Processing*, 13(11), 2567–2586.
- [12] Cong, I., Choi, S., & Lukin, M. D. (2019). Quantum convolutional neural networks. *Nature Physics*, 15, 1273–1278.
- [13] Cerezo, M. et al. (2021). *Variational quantum algorithms*. *Nature Reviews Physics*, 3(9), 625–644.
- [14] Schuld, M. & Killoran, N. (2019). *Quantum machine learning in feature Hilbert spaces*. *Physical Review Letters*, 122(4), 040504.
- [15] McClean, J. R. et al. (2016). *The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms*. *New Journal of Physics*, 18(2), 023023.
- [16] Biswas, H. (2025). *Data Encoding for VQC in Qiskit: A Comparison With Novel Hybrid Encoding*. arXiv preprint arXiv:2503.14062.

- [17] Qiskit Documentation. Disponible a: <https://docs.quantum.ibm.com/> [Consulta: juny de 2025].
- [18] Qiskit Aer Noise Models Documentation. Disponible a: https://qiskit.github.io/qiskit-aer/apidocs/aer_noise.html [Consulta: juny de 2025].
- [19] IBM Quantum Platform. Disponible a: <https://quantum.ibm.com/> [Consulta: juny de 2025].
- [20] Qiskit Aer Noise Simulation Tutorial. Disponible a: <https://qiskit.github.io/qiskit-aer/tutorials/index.html> [Consulta: juny de 2025].

Annexos

A.1 Repositori del projecte

Amb l'objectiu de garantir la transparència i la reproductibilitat dels resultats, s'ha creat un repositori públic a GitHub que recull tot el material pràctic desenvolupat durant aquest treball:

https://github.com/MinusOdin/qml_tfg

Aquest repositori inclou:

- `qke.ipynb`: implementació completa del mètode de *Quantum Kernel Estimation*, incloent la definició del *feature map*, càlcul de la matriu de kernel i entrenament del classificador SVM.
- `vqc.ipynb`: experiment complet del *Variational Quantum Classifier* (VQC) aplicat al dataset de càncer de mama, amb codificació de dades, arquitectura del circuit i optimització numèrica dels paràmetres.
- `NoiseSimulator.ipynb`: simulacions de circuits en entorns amb soroll mitjançant el mòdul `AerSimulator` amb models de soroll personalitzats. Utilitzat per validar la robustesa dels models en escenaris NISQ realistes.
- `Primitives.ipynb`: exemples d'ús modern de les primitives `Sampler` i `Estimator` de Qiskit, utilitzats per obtenir distribucions i valors esperats de circuits en simuladors i en maquinari real.
- `requirements.txt`: arxiu amb les dependències i versions de llibreries utilitzades per garantir l'execució correcta dels notebooks en un entorn virtual.

Tots els notebooks estan degudament comentats i segueixen l'estructura lògica de la memòria. Aquest repositori pot servir de base per a futurs projectes que vulguin explorar o ampliar algunes de les implementacions desenvolupades en aquest treball.