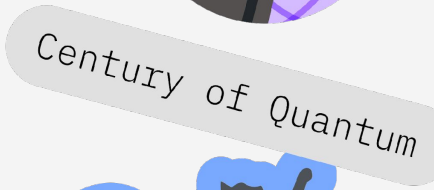
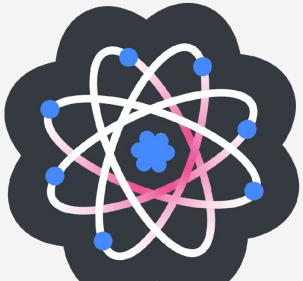
Optimización Clásica vs Optimización Cuántica

Nicolas Aguilera
Quantic - Univalle

Andres Valencia
Quantic - Univalle
Qiskit Advocate

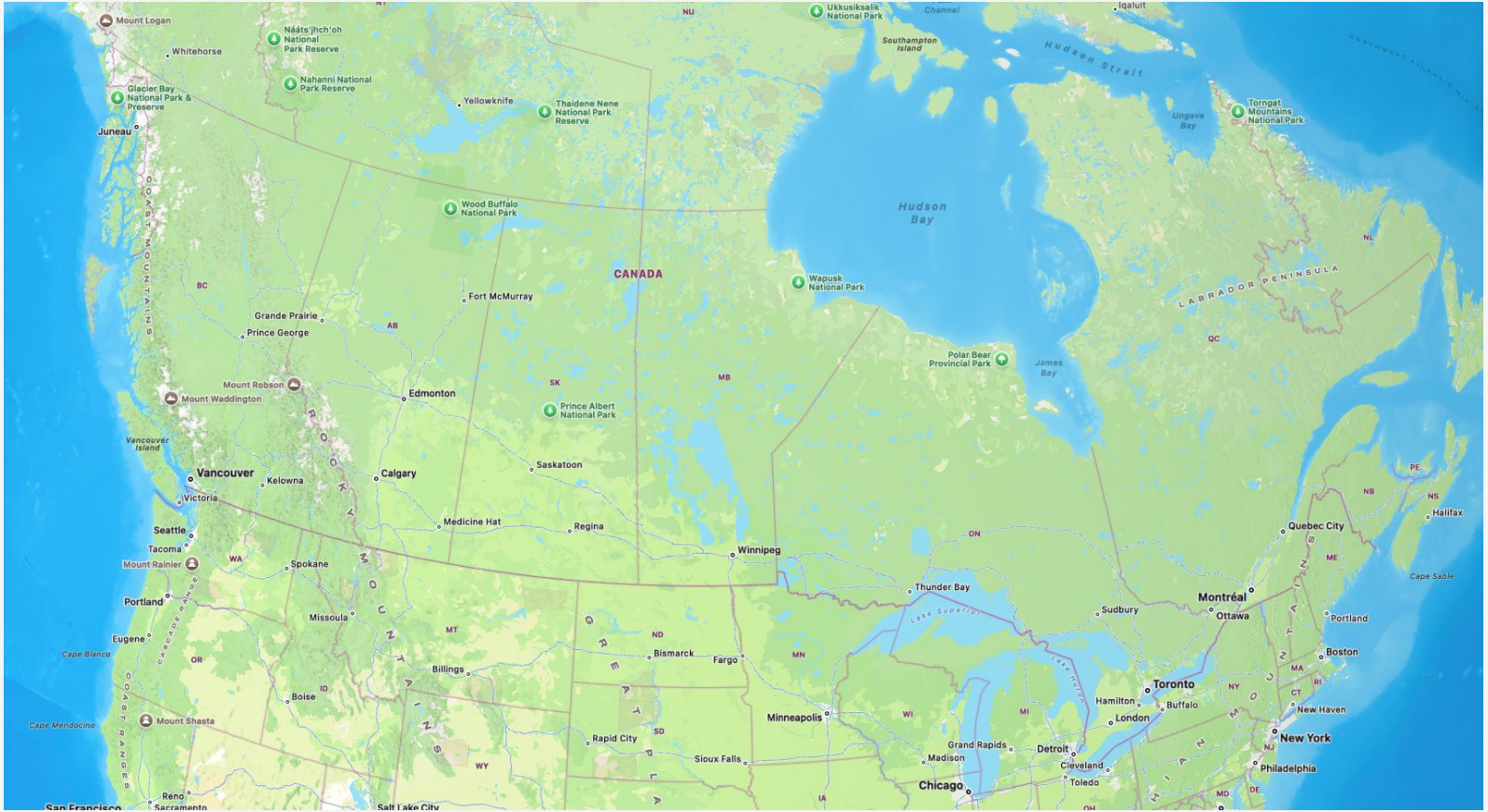





mitacs
Bringing innovation into reach

Modeling toolkit for **Resonant X-ray Reflectivity** in multilayer heterostructures

Nicolas Aguilera
Pasante MITACS en University of Saskatchewan
Quantic - Univalle



Qiskit Fall Fest 2025


Mount Logan
Whitehorse
Glacier Bay National Park & Preserve
Juneau
Nàáts'jhch'oh National Park Reserve
Nahanni National Park Reserve
Yellowknife
Thaidene Nene National Park Reserve
Ukkusiksalik National Park
Southampton Island
Hudson Strait
Torngat Mountains National Park
Ungava Bay
Hudson Bay
Wood Buffalo National Park
CANADA
Wapusk National Park
Fort McMurray
Grande Prairie
Prince George
Mount Robson
Mount Waddington
Edmonton
Prince Nations
Saskatoon
Vancouver Island
Vancouver
Kelowna
Calgary
Victoria
Seattle
Tacoma
Mount Rainier
Spokane
Medicine Hat
Regina
Winnipeg
Portland
Eugene
Missoula
Cape Blanco
Bismarck
Fargo
Billings
Boise
Mount Shasta
Cape Mendocino
Minneapolis
Rapid City
Sioux Falls
Grand Rapids
Madison
Detroit
Cleveland
Toledo
Chicago
Toronto
Hamilton
Buffalo
London
New Haven
New York
Philadelphia
Boston
Portland
Halifax
Cape Sable
San Francisco
Reno
Sacramento
Salt Lake City
UNIVERSITY OF SASKATCHEWAN
DEO ET PATRIÆ

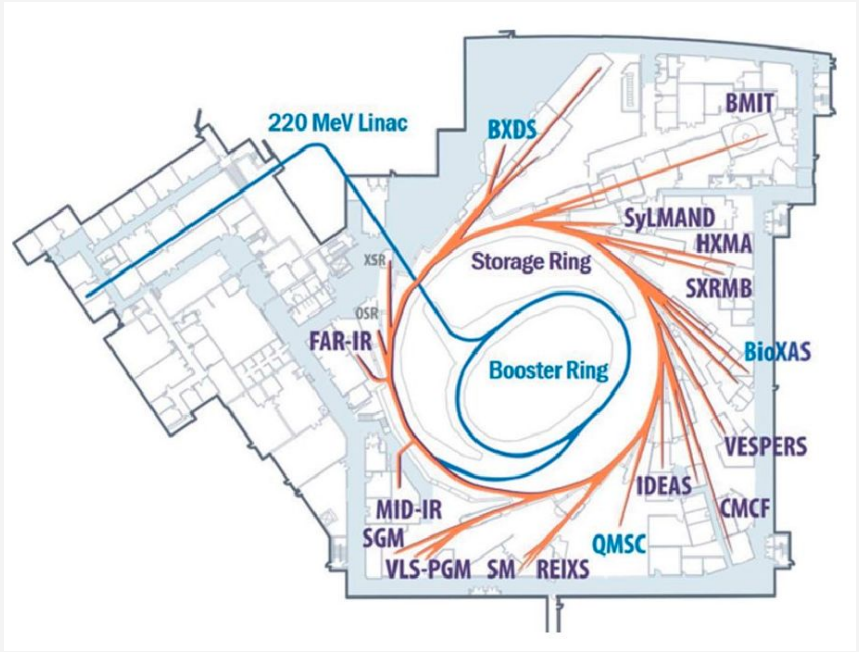
Canadian Light Source

¿Qué es?

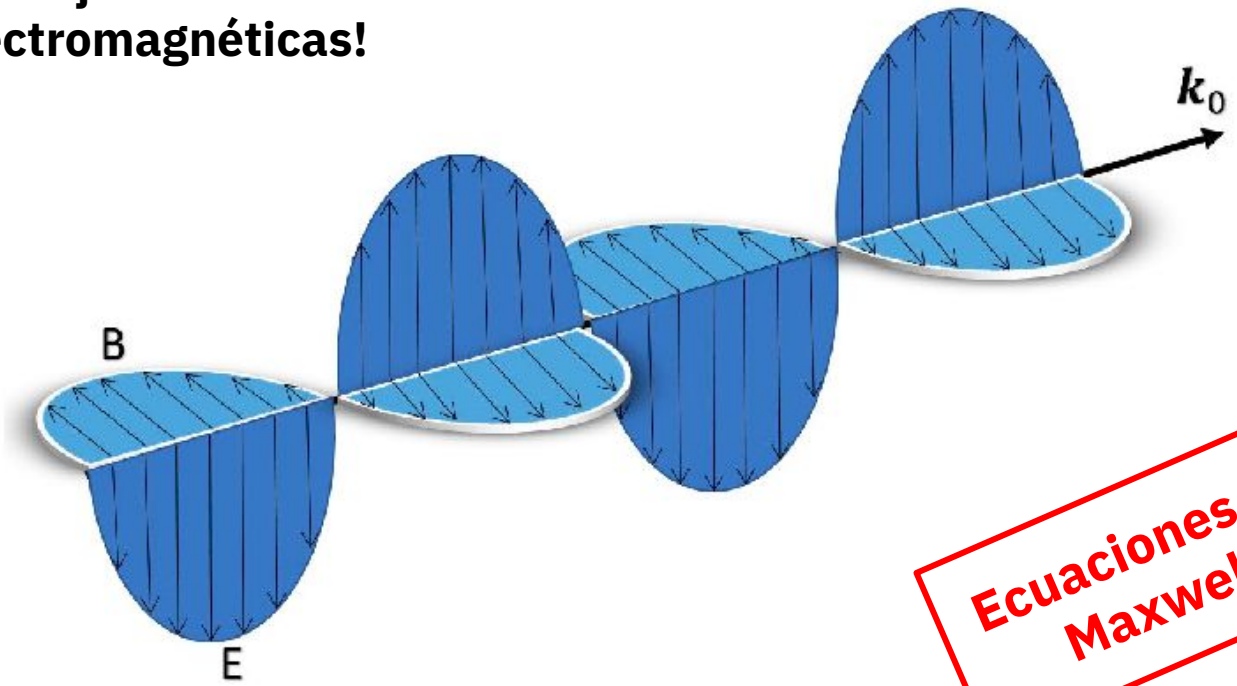
Es un acelerador de partículas que genera radiación de sincrotrón: luz de rayos X

Aceleración.
Almacenamiento.
Generación de rayos X.

Canadian Light Source



¡Trabajamos con ondas electromagnéticas!



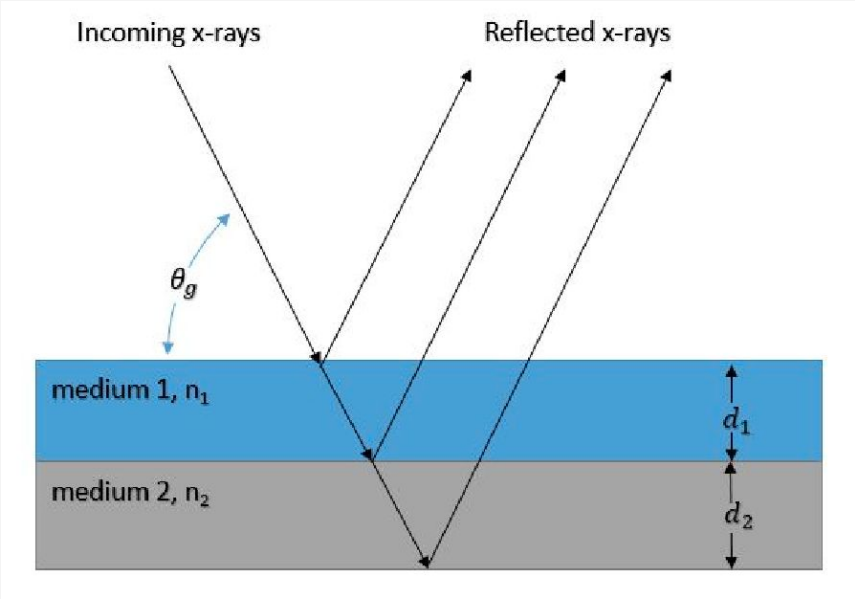
Ecuaciones de Maxwell

Reflectometría de Rayos X Resonantes RXR

Técnica por la cual se mide la reflectividad de rayos X en una película delgada

El detector mide la interferencia de todas estas ondas reflejadas. Esto crea un patrón que depende del perfil de profundidad estructural de la película.

$$q_z = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta_g)$$



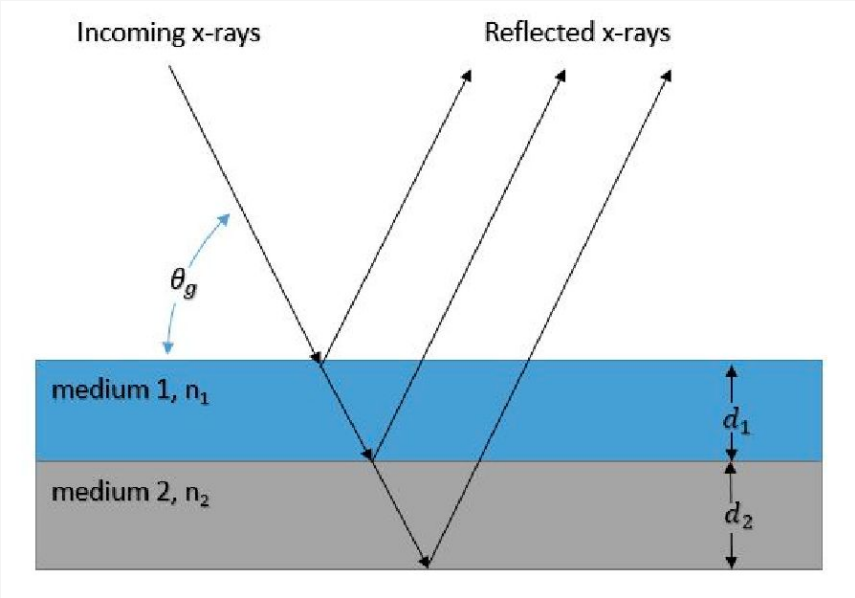
Reflectometría de Rayos X Resonantes RXR

La importancia radica en buscar la resonancia. Esto es coincidir la energía del fotón incidente con un borde de absorción de un elemento en específico.

Cerca de una resonancia, el Factor de Dispersión Atómica (f(E)) del átomo sintonizado cambia drásticamente.

$$f(E) = f_1(E) + if_2(E)$$

Este f(E) es la "respuesta" del átomo a la luz, es decir la amplitud de dispersión.



Reflectometría de Rayos X Resonantes RXR

¿Cómo relacionamos el factor de forma atómico con lo que esperamos medir?

$$f(E) \rightarrow R(E, q_z)$$

Respuesta: Estudiamos la respuesta colectiva de una capa del material. La cual se describe por su **Índice de Refracción**

$$n(E) = 1 - \delta(E) + i\beta(E) \qquad \alpha, \beta \propto \sum_j \rho_j f_j(E)$$

el cual actúa como un **promedio ponderado por densidad** de los factores de dispersión de todos los átomos que la componen:

Reflectometría de Rayos X Resonantes RXR

¿Cómo relacionamos el factor de forma atómico con lo

Relacionar

$$n(E) \qquad R(E, q_z)$$

Requiere de resolver el problema físico de múltiples interferencias y múltiple dispersión. Ya que el rayo que medimos es la **superposición** de todas estas ondas reflejadas.

Consideremoslo magia ✨

(Realmente es la solución recursiva de las ecuaciones de Maxwell)

$$n(E) = \sum_j \rho_j f_j(E)$$

el cual actúa como un **promedio ponderado por densidad** de los factores de dispersión de todos los átomos que la componen:

Objetivo de estudio: Heteroestructuras

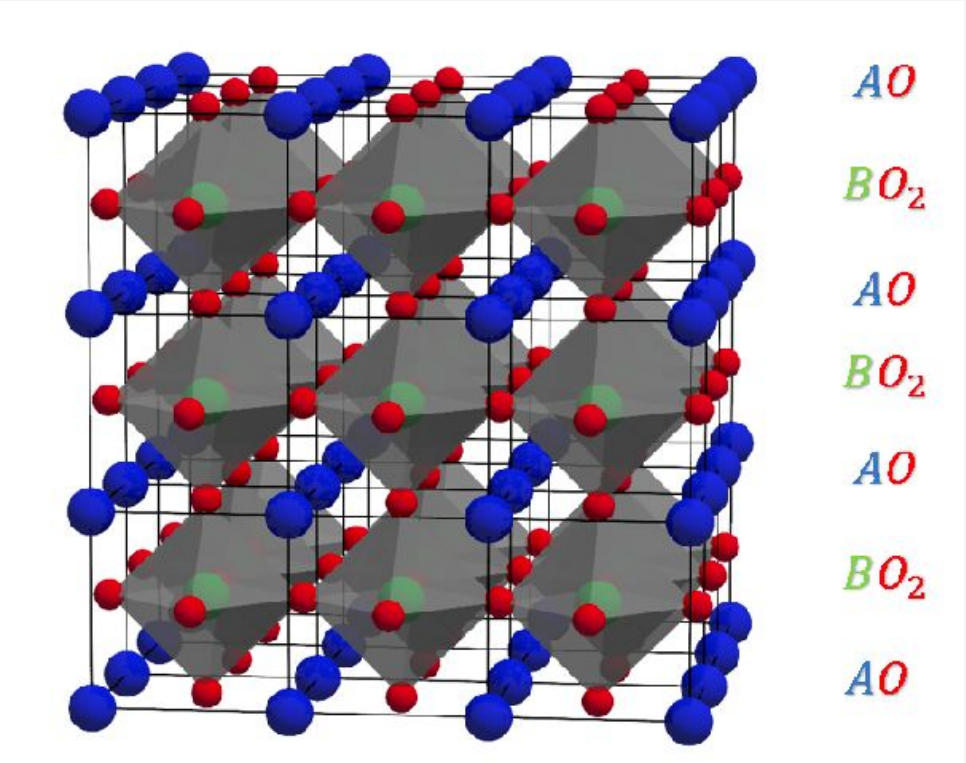
No estudiamos un solo material, sino "sándwiches" a escala atómica llamados **heteroestructuras**.

Comparten estructuras comunes

$$ABO_3$$

Entre las interfaces pueden surgir fenómenos emergentes como:

- Magnetismo
- Superconductividad



Datos vs Modelo

Proponer modelo → Simular reflectividad → Comparar con datos

Definimos nuestra mejor suposición de la estructura física como un Modelo de Capas. Este modelo es un vector de parámetros

$$\vec{p} = \{(t_1, \rho_1, \sigma_1, M_1, f_1), ..., (t_N, \rho_N, \sigma_N, M_N, f_N)\}$$

t_i Grosor

ρ_i Densidad

σ_i Rugosidad

M_i Factores de forma magnéticos

f_i Factores de forma

Al final tendremos dos conjuntos de datos para la reflectividad

$$R_{\text{sim}}(E, q_z, \vec{p})$$

$$R_{\text{exp}}(E, q_z)$$

¿En donde vamos a ejecutar estos modelos?

En un computador clásico.

En estos el ladrillo básico es el bit el cual está en uno de dos estados posibles: 0 1
Y se aplican operaciones lógicas AND, OR, NOT, etc.

Un **algoritmo clásico** es una secuencia finita de instrucciones que, dado un input (bits), produce un output (bits).

```
entrada: parámetros p, datos R_exp
salida: coste C(p)

1. simular R_sim(E, q_z, p)
2. comparar con R_exp
3. sumar diferencias → C(p)
```

Optimización Clásica

Dada una función de coste $C(\vec{p})$

Queremos encontrar un conjunto de parámetros $\vec{p}^*$

Que cumplan con $C(\vec{p}^*) = \min C(\vec{p})$

Optimización Clásica

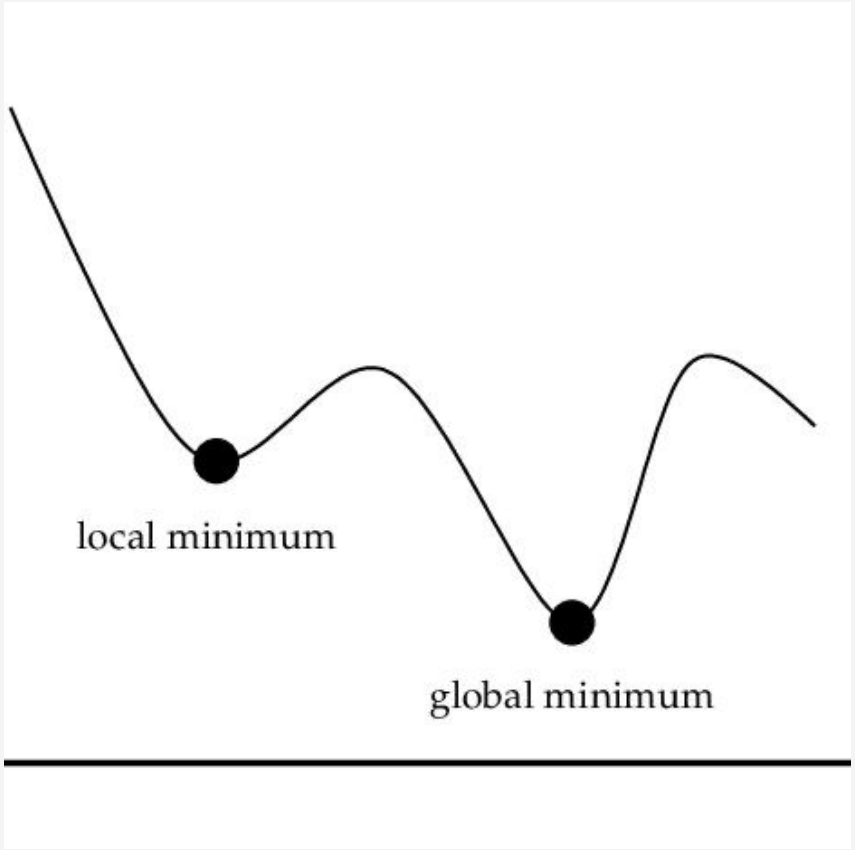
Dada una función de coste $C(\vec{p})$

Queremos encontrar un conjunto de parámetros $\vec{p}^*$

Que cumplan con $C(\vec{p}^*) = \min C(\vec{p})$

$$C(\vec{p}) = \sum_{E,q_z} w(E,q_z)\left[R_{\text{sim}}(E,q_z;\vec{p}) - R_{\text{exp}}(E,q_z)\right]^2$$

Optimización Clásica

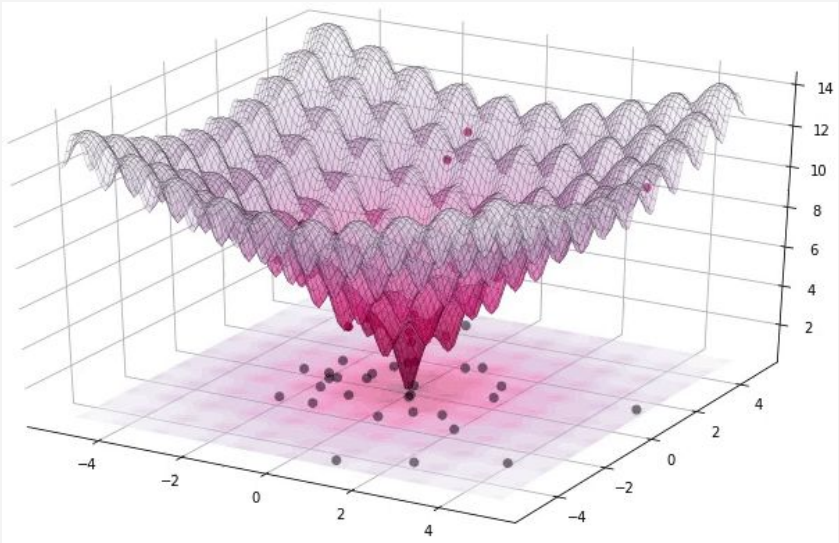


- **Por uso de derivadas**
  - Basados en gradiente (locales).
  - Sin derivadas (gradient-free).
- **Por alcance**
  - Locales: buscan un mínimo cercano.
  - Globales: intentan explorar todo el espacio para evitar mínimos locales.
- **Por naturaleza**
  - Deterministas.
  - Estocásticos: usan aleatoriedad.

Optimización Clásica

El algoritmo de optimización utilizado fue **Differential Evolution**. El esquema conceptual del algoritmo es:

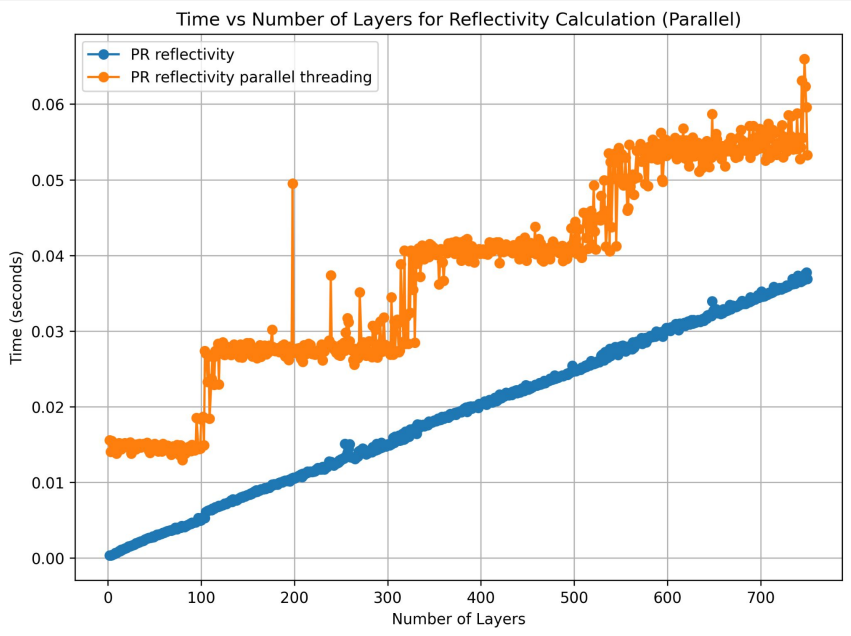
- Inicializar una **población** de vectores $\vec{p}(i)$.
- Para cada vector, crear una versión hija combinando otros vectores.
- Evaluar el coste y **seleccionar como parte de la nueva población el mejor**.
- Repetir.

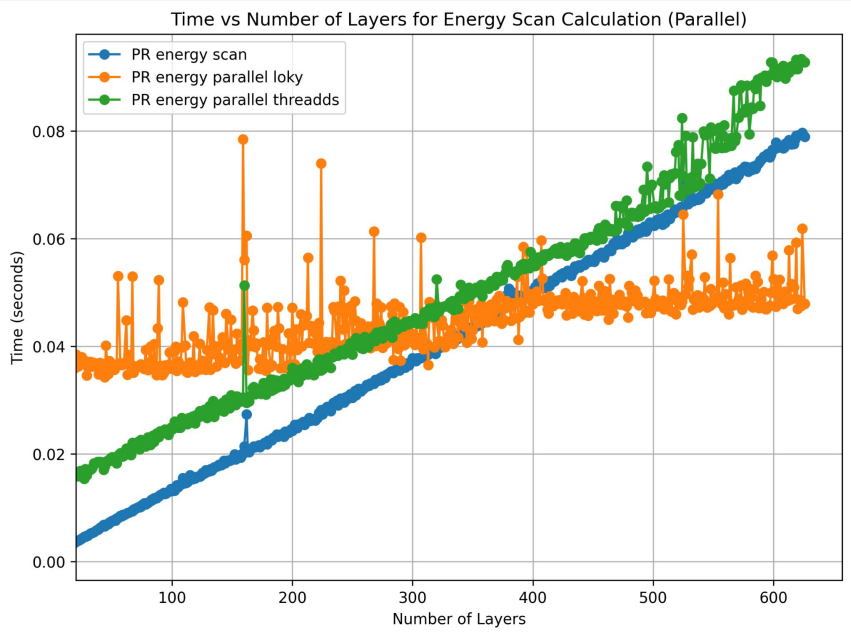


Se tiene como posibles parámetros:

$$N_p \quad F \quad CR$$

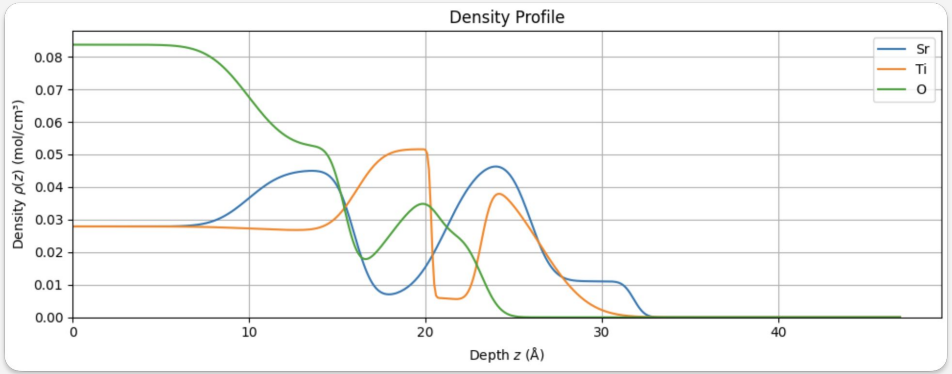
Resultados

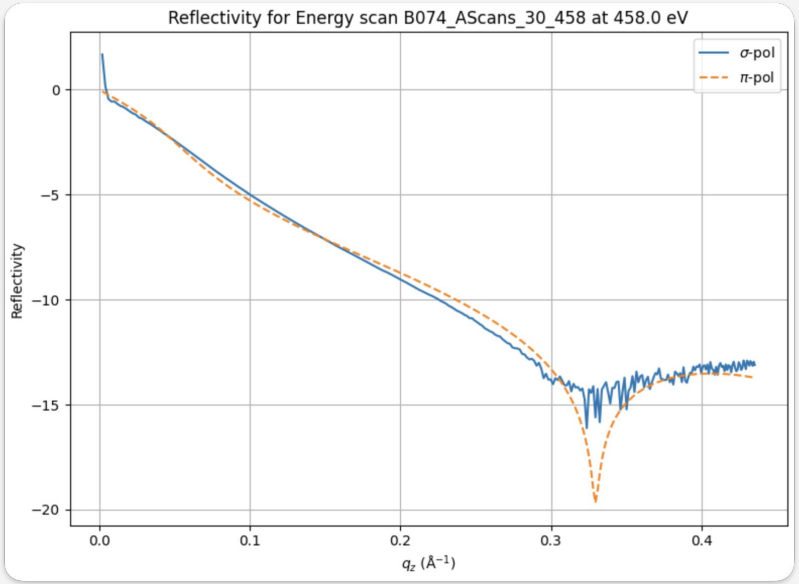

Time vs Number of Layers for Reflectivity Calculation (Parallel)
PR reflectivity
PR reflectivity parallel threading
Time (seconds)
Number of Layers
0.00
0.01
0.02
0.03
0.04
0.05
0.06
0
100
200
300
400
500
600
700

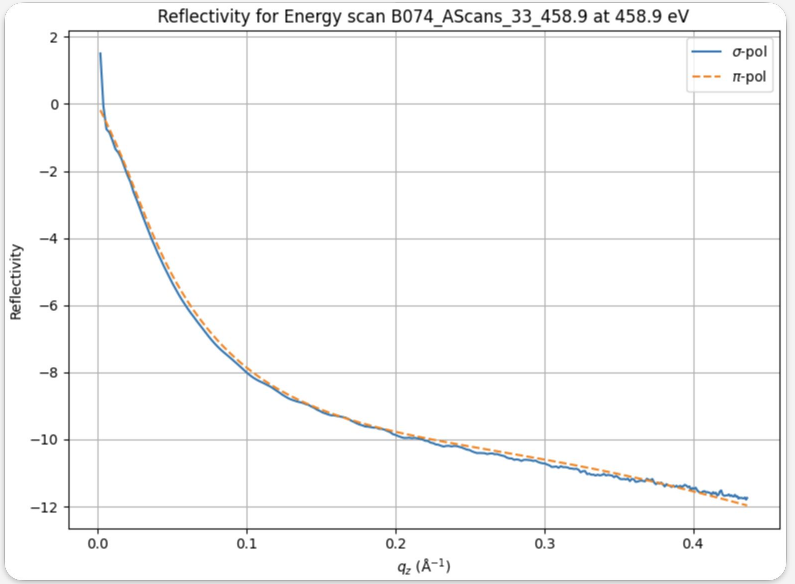

Time vs Number of Layers for Energy Scan Calculation (Parallel)
PR energy scan
PR energy parallel loky
PR energy parallel threadds
Time (seconds)
Number of Layers
0.00
0.02
0.04
0.06
0.08
100
200
300
400
500
600

Resultados

$SrTiO_3$

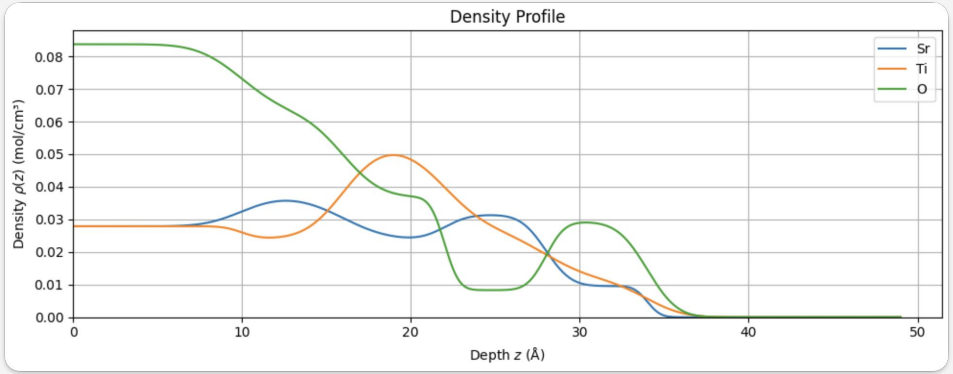


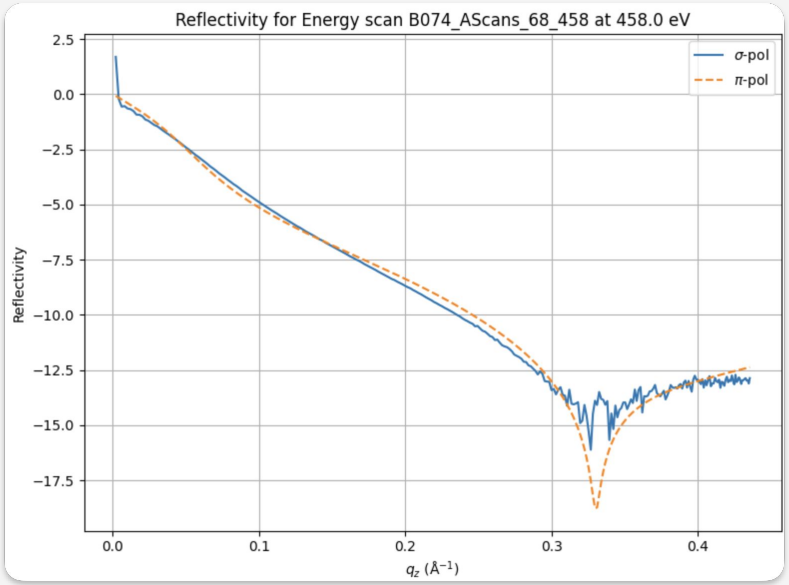


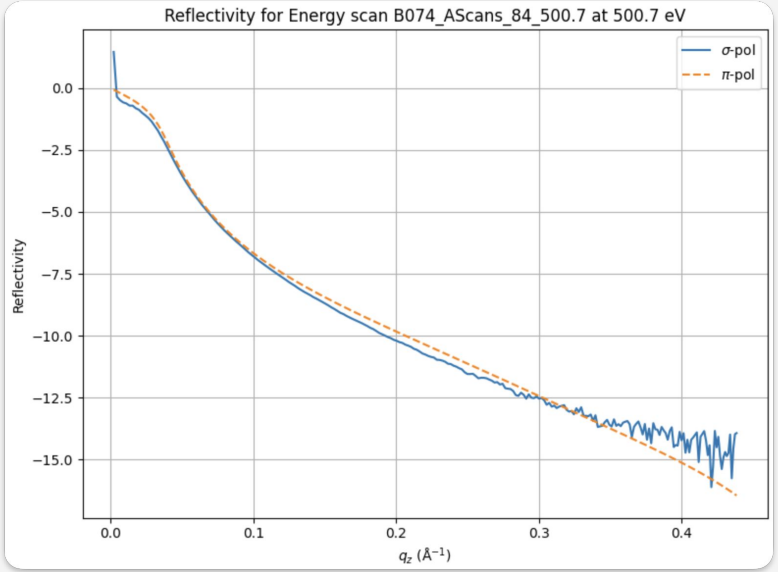


Resultados

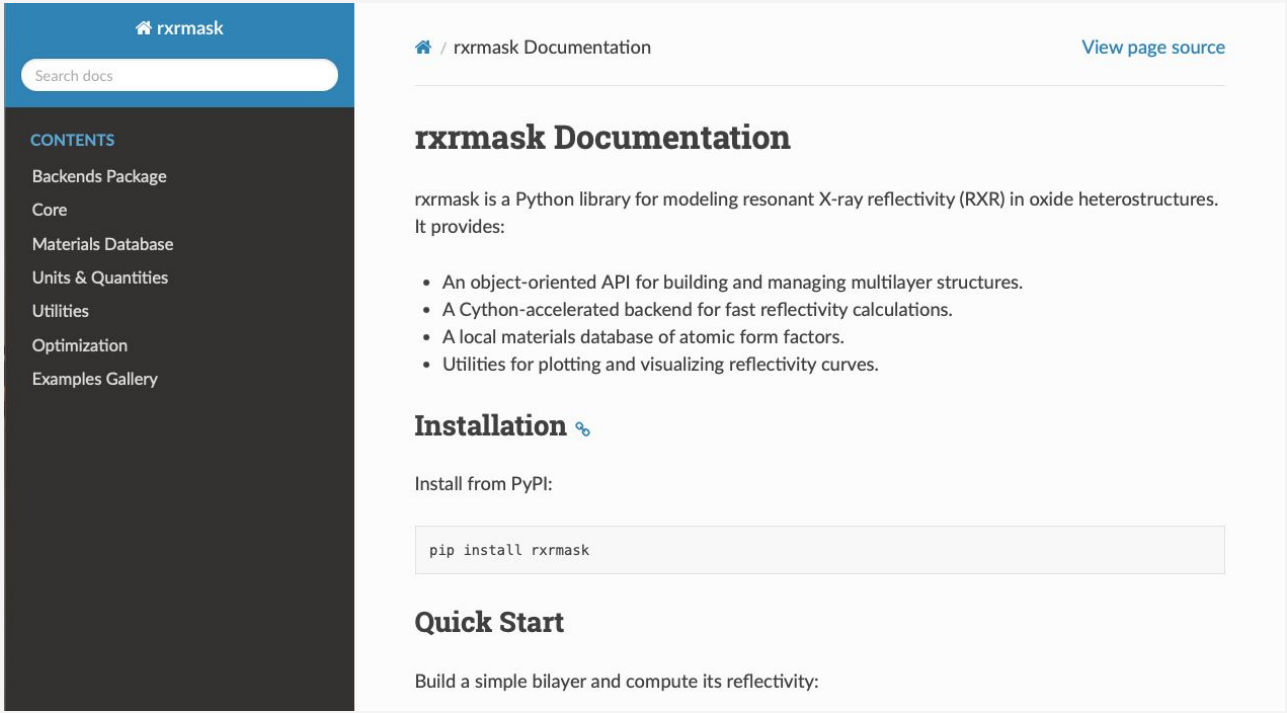
$SrTiO_3$







Resultados


rxrmask
Search docs
CONTENTS
Backends Package
Core
Materials Database
Units & Quantities
Utilities
Optimization
Examples Gallery
rxrmask Documentation
View page source
rxrmask Documentation
rxrmask is a Python library for modeling resonant X-ray reflectivity (RXR) in oxide heterostructures. It provides:
An object-oriented API for building and managing multilayer structures.
A Cython-accelerated backend for fast reflectivity calculations.
A local materials database of atomic form factors.
Utilities for plotting and visualizing reflectivity curves.
Installation
Install from PyPI:
pip install rxrmask
Quick Start
Build a simple bilayer and compute its reflectivity:

Constraint-Preserving QAOA for the **Quadratic Knapsack Problem** via Quantum Tree Generator

Andres Valencia
Pasante MITACS en UQAM (Montreal)
Quantic - Univalle
Qiskit Advocate

QISKIT 2025 FALL FEST 2025

GERAD

Group for Research in Decision Analysis

Knapsack Problem (KP)

Problema de Mochila

Cada ítem tiene un valor (q) y un peso (w) asociado

El objetivo es maximizar el costo sin superar el peso permitido

Knapsack Problem (KP)
Problema de Mochila

¿De cuántas formas puedo llenar mi mochila con n ítems?

Cada ítem tiene una decisión binaria de entrar en la mochila, al haber n de estos, entonces en total serán 2^n

Knapsack Problem (KP)
Problema de Mochila

$$\max_{x\in\{0,1\}^n} \left(\sum_{i=1}^{n} q_i x_i\right), \quad \text{s.t.} \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \leq C.$$

- El Knapsack Problem (KP) es un problema clásico de optimización combinatoria que pertenece a la clase NP-hard.
- No se conoce un algoritmo determinista que lo resuelva en tiempo polinomial para el caso general.
- Los algoritmos exactos clásicos más comunes incluyen Programación Dinámica y Branch-and-Bound (peor caso exponencial).
- Los métodos aproximados incluyen esquemas Fully Polynomial-Time Approximation Scheme (FPTAS) para la versión clásica.

Quadratic Knapsack Problem (QKP)
Problema cuadrático de Mochila

q_i

q_j

q_{ij}

Se introducen términos cuadráticos que modelan interacciones entre ítems

$$q_{ij} \neq q_i + q_j$$

Quadratic Knapsack Problem (QKP)
Problema cuadrático de Mochila

$$\max_{x\in\{0,1\}^n} \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} q_{ij} x_i x_j \right), \quad \text{s.t.} \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \leq C.$$

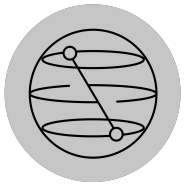
- El QKP también es NP-hard y es significativamente más difícil que el KP clásico debido a la no linealidad de la función objetivo.
- Los métodos exactos clásicos suelen basarse en extensiones de Branch-and-Bound o técnicas de relajación cuadrática, con tiempos de ejecución fuertemente exponenciales en el peor caso.
- Las heurísticas modernas combinan técnicas de búsqueda local, metaheurísticas y relajaciones continuas, pero no garantizan optimalidad global en tiempos polinomiales.
- Debido a su estructura cuadrática, el QKP aparece en problemas de diseño de redes, inversiones, asignación de recursos y optimización con sinergias.

Computación Cuántica

Qubit

Es la unidad básica de información cuántica; su estado se describe como una **superposición** coherente de $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

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

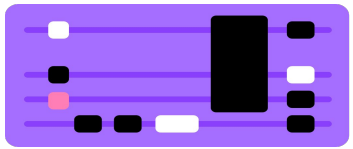


Superposición

La superposición permite que un qubit represente simultáneamente múltiples configuraciones, análogo conceptual al gato de Schrödinger, que está **"vivo y muerto"** a la vez hasta que se mide.

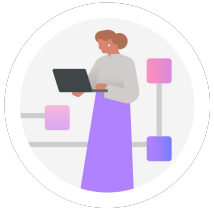
Estado cuántico

En sistemas de varios qubits, la superposición genera un espacio de estados exponencialmente grande (2^n amplitudes para n qubits).



Algoritmos

Los algoritmos cuánticos explotan interferencia y correlaciones cuánticas para explorar regiones del espacio de soluciones de manera no clásica.



Clásico

Cuántico

Background

Soft Constraints

QUBO formulation

La idea es convertir la restricción de desigualdad en una restricción de igualdad usando una variable “floja”:

$$\sum_{i=1}^{n} w_i x_i + s = C, \quad \text{with } s = \sum_{k=0}^{m-1} 2^k s_k, \quad s_k \in \{0,1\}$$

Slack-free QUBO

Incorporan la restricción en la función objetivo a través de un término de penalización

$$\max_{x \in \{0,1\}^n} \left[x^T Q x + \lambda \cdot \text{Penalty} \left(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i - C \right) \right]$$

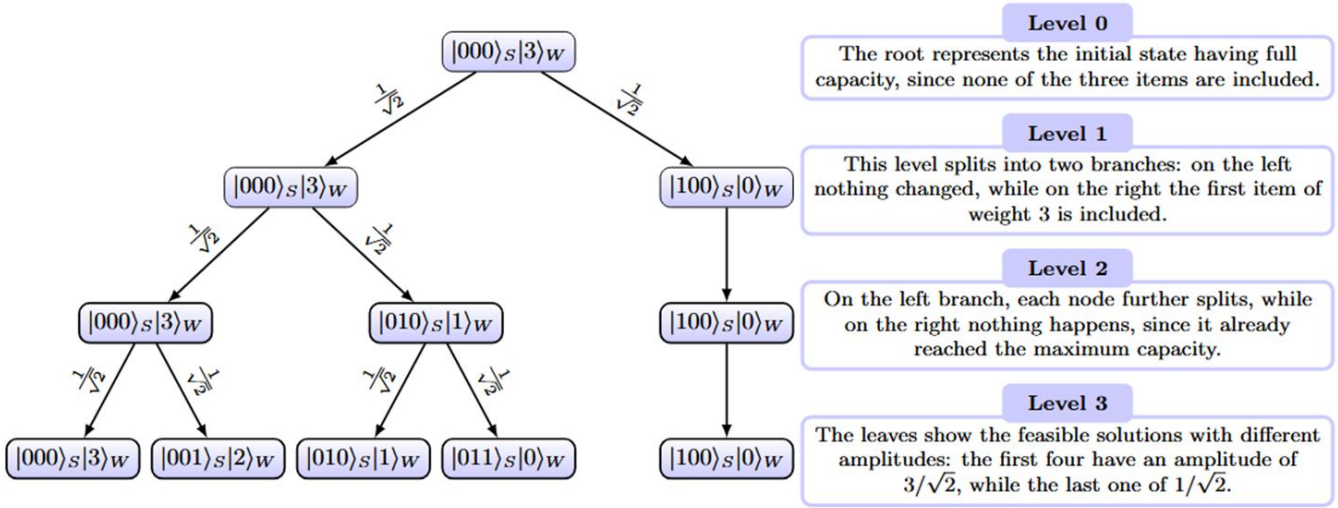
Hard Constraints

Biased state preparation

Esta alternativa apunta a iniciar un estado que asigna probabilidades cero o casi cero a aquellos que no satisfacen la restricción.

Quantum Tree Generator (QTG)

Este construcción genera una superposición exclusivamente sobre soluciones factibles utilizando un circuito estructurado en árbol donde cada decisión de bifurcación respeta la restricción de peso.

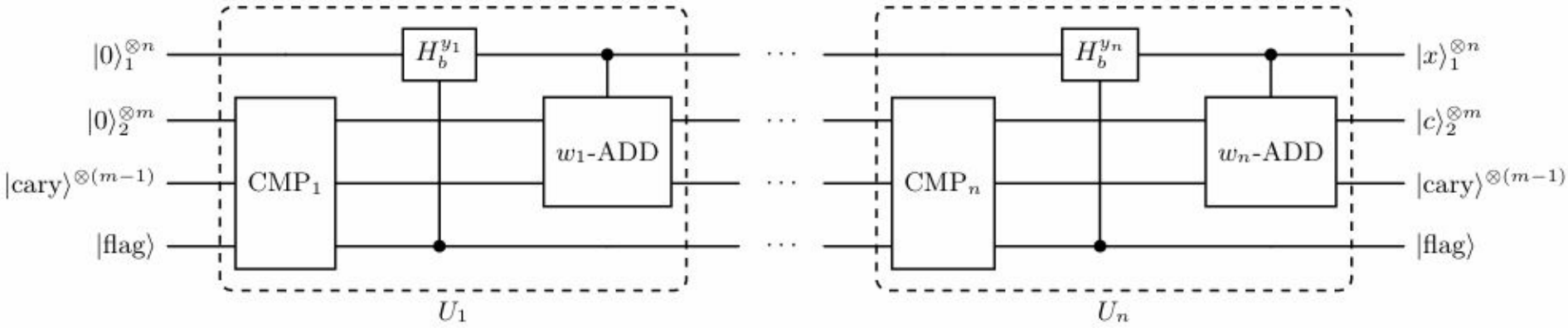


Ejemplo del generador de árbol cuántico para la instancia KP de tres ítems con ganancias $q = (4, 2, 1)$, pesos $w = (3, 2, 1)$ y capacidad máxima $C = 3$. El estado $|b_0, b_1, b_2\rangle_S|c\rangle_W$ indica en S cuál de los tres ítems está incluido ($b_i = 0$ si el ítem i no está incluido e igual a 1 en caso contrario) y en c la capacidad restante. Las ramas del árbol indican la amplitud del estado.

Extraído de "Quantum tree generator improves QAOA state-of-the-art for the knapsack problem", by Paul Christiansen et al. Nov 2024

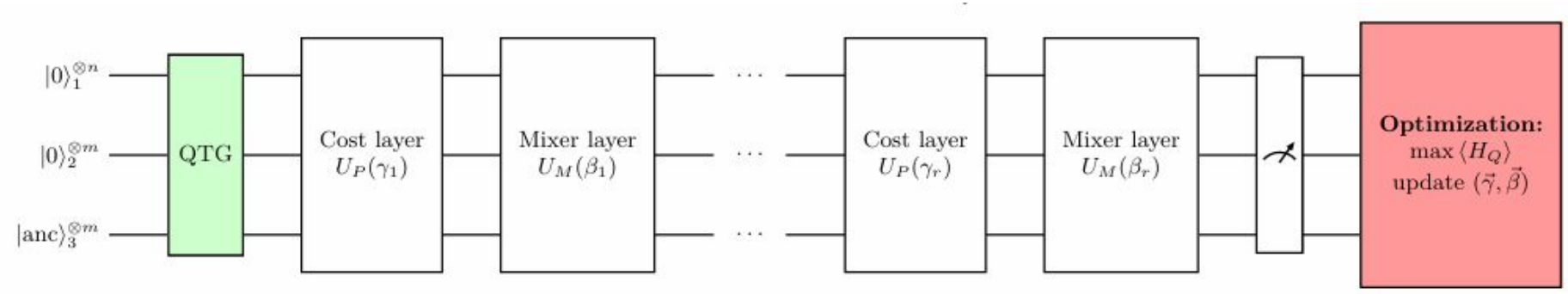
Quantum Tree Generator (QTG)

La representación esquemática de las operaciones sobre los qubits se representa mediante un “circuito cuántico”. En esta se indica en un flujo temporal las compuertas que se realizan sobre el sistema.

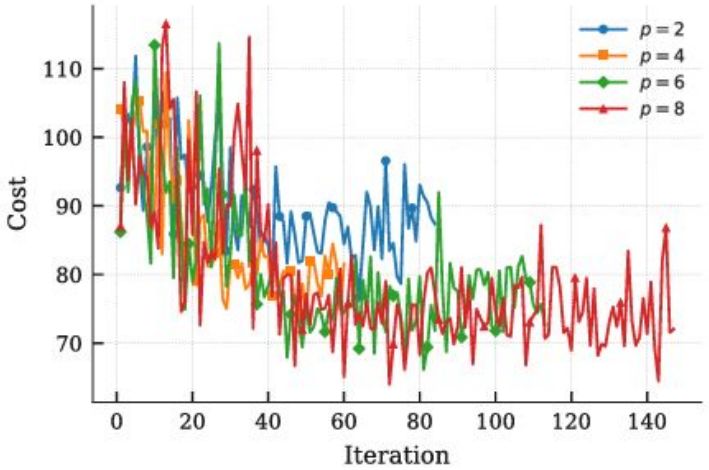


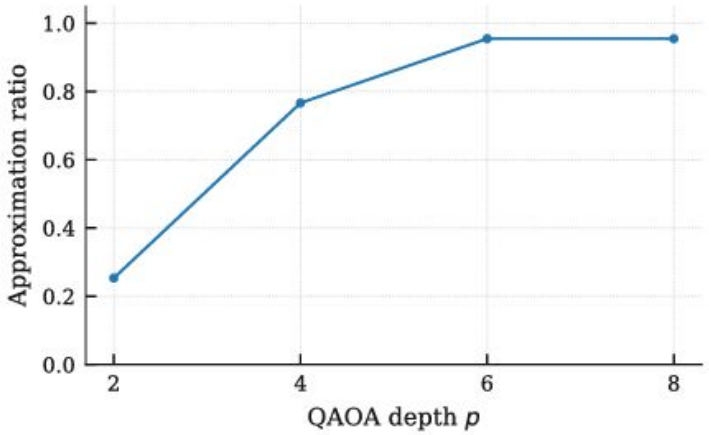
QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm)

- Es un algoritmo variacional cuántico diseñado para resolver problemas de optimización combinatoria formulados como la minimización de una Función Objetivo (Hamiltoniano).
- El algoritmo alterna entre dos operadores unitarios:
  - Operador de costo
  - Operador mezclador
- El protocolo consiste en aplicar p capas de estos dos operadores.
- QAOA combina exploración cuántica (superposición + entrelazamiento) con optimización clásica, y es robusto ante el ruido, por lo que es atractivo para dispositivos NISQ.



QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm)





Rendimiento promedio de QTG-QAOA para diferentes niveles de densidad, sobre 20 instancias con 5 elementos, cada una evaluada con 5 capas QAOA y 100 simulaciones por evaluación.

	5 Items	
Density (%)	Avg. CPLEX Gap (%)	Avg. Greedy Gap (%)
25	1.76	-0.82
50	3.90	-4.40
75	5.21	-6.32
100	9.87	4.89

Resultado de la pasantía

- Experiencia
- Colaboración
- Aprendizaje

Constraint-Preserving QAOA for the Quadratic Knapsack Problem via Quantum Tree Generator

Andres Valencia[1,*] and Franklin Djeumou Fomeni[2]

[1] *Universidad del Valle, Cali, Valle del Cauca, Colombia*
[2] *Université du Québec à Montréal, Montreal, QC, Canada*

We implement a fully quantum variant of the Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) tailored to the Quadratic Knapsack Problem (QKP), using the Quantum Tree Generator (QTG) as a constraint-preserving mixer. The QTG creates a superposition over feasible configurations, enabling the phase separator to act exclusively within the valid solution space and avoiding unfeasible state amplitudes. This work extends recent developments on quantum knapsack algorithms and introduces the first QTG-QAOA framework for the QKP. We present circuit design, theoretical resource analysis, and scalability considerations. Through Qiskit simulations, we observe that for low-density instances QTG-QAOA is comparable to greedy heuristics, while for higher densities it reaches improved approximation ratios. Moreover, we extend the approach to the Densest Subgraph with Negative Weights (DSNW) using an XY-mixer to reduce implementation cost; in our tests, this variant showed a significant advantage only on small instances and at high edge densities. Overall, constraint-preserving mixer via QTG provides a viable route to feasible-space QAOA for quadratic knapsack-type problems, clarifying both potential and current limitations.

Muchas gracias

Century of Quantum

0ab4