

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Departamento de Física

Amanda Gabriela Valério

**Inteligência Artificial e Computação Quântica
para Solução de Problemas de Logística
Industrial**

São Carlos

2025

Amanda Gabriela Valério

**Inteligência Artificial e Computação Quântica para
Solução de Problemas de Logística Industrial**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Física para obtenção do título
de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas

São Carlos

2025

Amanda Gabriela Valério

Inteligência Artificial e Computação Quântica para Solução de Problemas de Logística Industrial/ Amanda Gabriela Valério. – São Carlos, 2025–

Orientador: Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas

Dissertação de Mestrado – Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia

Departamento de Física, 2025.

1. Inteligência Artificial 2. Computação Quântica. I. Celso Jorge Villas-Bôas.
II. Universidade Federal de São Carlos. III. Departamento de Física.

Amanda Gabriela Valério

Inteligência Artificial e Computação Quântica para Solução de Problemas de Logística Industrial

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Física para obtenção do título
de Mestre em Física

Trabalho aprovado. São Carlos, 2025:

Prof. Dr. Celso Jorge Villas-Bôas
Orientador

Prof. Dr. Rafael Chaves
Convidado

Profa. Dra. Jéssica Renata Nogueira
Convidada

São Carlos
2025

Dedico a todos aqueles que me apoiaram para que eu pudesse voar mais alto

Agradecimentos

Agradeço a minha família, por valorizar o conhecimento e os estudos desde minha infância e por todo apoio e suporte durante minha jornada acadêmica. Agradeço ao meu marido, que ficou sabendo da vaga aberta no grupo de pesquisa e me incentivou a ir atrás, e também por todo apoio e incentivo a minha carreira, pelas tardes e noites de estudo compartilhado e pela paciência nos dias mais difíceis.

Agradeço ao meu orientador pelo cuidado e prontidão ao guiar essa pesquisa e por todo esforço em sempre providenciar tudo que era necessário para auxiliar a pesquisa e melhorar o ambiente de trabalho. Agradeço por toda compreensão e confiança, principalmente pelo minha formação não ser em Física e sim em Ciência da Computação.

Agradeço a todos aqueles que me acolheram quando entrei no grupo de pesquisa e na universidade. Agradeço a todos os meus colegas de pesquisa por todo apoio durante esses anos, com ensinamentos sobre física e computação quântica, pelos bons conselhos e ouvidos sempre disponíveis. Agradeço pela disponibilidade em sempre ajudar, pelas horas discutindo as melhores estratégias e revisando códigos. Agradeço também pelos bons momentos fora do horário de pesquisa, que os tornaram meus bons amigos.

Agradeço ao Centro de Pesquisas Avançadas Wernher von Braun e ao CNPq pelo financiamento dessa pesquisa através dos projetos ProEx nº 3525/2021-78, AIn / ProEx nº 6000/2023-56 e 139701/2023-0, sendo os dois primeiros projetos intermediados pela Fundação de Apoio Institucional ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FAI-UFSCar). O suporte financeiro é e está sendo fundamental tanto para o bom desenvolvimento da pesquisa quanto para os pesquisadores. Agradeço também ao Paulo César Cunha Bezerra, por toda dedicação ao trazer o problema até o grupo, sanar todas as dúvidas durante o desenvolvimento e intermediar as discussões necessárias com a empresa parceira e os demais membros do Centro Von Braun.

E por último agradeço à minha versão do passado, por ter acreditado que era possível e não ter desistido quando surgiram dificuldades.

Resumo

O problema de gerenciamento de estoques, abordado nesta dissertação, consiste em otimizar a alocação de itens em um sistema de armazenamento ordenado similarmente à uma fila e minimizando realocações destes itens. Para isso, esta pesquisa propõe três estratégias: *Quantum Annealing*, *Simulated Annealing* e um Sistema de Recomendação, este último responsável também pela geração de parâmetros para os demais métodos. Os resultados mostraram que o Sistema de Recomendação se destacou pelo tempo de processamento e reduziu significativamente as reinserções. Por outro lado, o *Simulated Annealing* apresentou resultados ainda melhores, com uma redução significativa no número de reinserções comparado ao método atualmente usado na empresa. Ambos os métodos mostraram potencial prático e integração viável em sistemas industriais. Na abordagem quântica, apesar de restrições nas instâncias executadas, a evolução da energia do sistema indica potencial competitivo em relação ao *Simulated Annealing*, especialmente considerando os avanços esperados em computadores tolerantes à falha. Mesmo que atualmente os computadores quânticos são limitados e sujeitos à um nível de ruído considerável, os resultados obtidos já apontam aplicações práticas e promissoras. Adicionalmente, identificou-se uma conexão entre a métrica *Lift* para regras de associação e a função de correlação $g^{(2)}(\tau)$ da óptica quântica. Com base nisso, iniciou-se um estudo para verificar a viabilidade de desenvolvimento de um algoritmo quântico de recomendação, cujas discussões iniciais são apresentadas ao final da dissertação.

Palavras-chaves: Problema do Gerenciamento de Estoque, Algoritmos de Recomendação, Algoritmos Quânticos.

Abstract

The warehouse management problem discussed in this dissertation consists of optimizing the allocation of items in a storage system ordered similarly to a queue and minimizing reallocations of these items. For this purpose, this research proposes three strategies: Quantum Annealing, Simulated Annealing and a Recommendation System, the latter also responsible for generating parameters for the other methods. The results showed that the Recommendation System stood out in terms of processing time and significantly reduced reinsertions. On the other hand, Simulated Annealing achieved even better results, with a significant reduction in the number of reinsertions compared to the company's current method. Both methods revealed practical potential and viable integration into industrial systems. In the quantum approach, despite restrictions on the instances executed, the evolution of the system's energy indicates competitive potential in relation to Simulated Annealing, especially considering the expected advances in fault-tolerant computers. Although currently quantum computers are limited and susceptible to a considerable level of noise, the results obtained already point to practical and promising applications. In addition, a connection was identified between the Lift metric for association rule and the $g^{(2)}(\tau)$ correlation function of quantum optics. On this basis, a study was started to verify the feasibility of developing a quantum recommendation algorithm, whose initial discussions are presented at the end of the dissertation.

Keywords: Warehouse Management Problem, Recommendation Algorithms, Quantum Algorithms.

Lista de ilustrações

Figura 1	– Representação do processamento de bits em circuitos integrados. A cada pulso de <i>clock</i> , é medida a tensão de entrada e transcrita como sinal digital. Valores entre a V_{IH} e V_{CC} são considerados como 1 e valores entre V_{IH} e GND são considerados como 0. Fonte: autoria própria.	28
Figura 2	– Esfera de Bloch para representação esquemática de um qubit. Fonte: autoria própria.	29
Figura 3	– Representação da topologia de um sistema Pegasus P3, presente na QPU Advantage da empresa canadense D-Wave. Os qubits são representados pelos pontos azuis e os acoplamentos são representados pelas linhas, cujas cores definem o tipo e função. Fonte: extraído de [15]	35
Figura 4	– Diagrama de Venn demonstrando a organização das subáreas da Inteligência Artificial. Fonte: autoria própria.	38
Figura 5	– Esquema de representação da dinâmica de duas empresas segundo o JIS, sendo uma delas produtora de matérias-primas (A) e a outra consumidora desse material (B). Fonte: Modificado a partir de © amethyststudio via Canva.com.	46
Figura 6	– Fotografia de uma prateleira gravitacional. Fonte: retirado de [13]	47
Figura 7	– Resultado do cálculo das energias do estoque para inserções de diferentes números de itens em diferentes configurações de estoque (número de prateleiras e número de posições em cada prateleira): $3 \times 3, 4 \times 4, \dots, 20 \times 20$, usando: Sistema de Recomendação, <i>Simulated Annealing</i> e <i>Quantum Annealing</i> pelos <i>Solvers</i> da D-Wave (Modelo Híbrido). Fonte: retirado de [38].	55
Figura 8	– Resultados obtidos para o número de reinserções comparando os testes realizados com os dados reais em um mesmo período, sendo aproximados os valores obtidos para o <i>Simulated Annealing</i> , devido ao caráter estocástico do método. Fonte: autoria própria.	56
Figura 9	– Comparação entre um estado de vácuo coerente (à esquerda) e um estado de vácuo comprimido (à direita). É possível observar que enquanto o estado coerente tem as amplitudes iguais em cada quadratura, o estado comprimido é reduzido em uma quadratura (X_2) enquanto a outra quadratura (X_1) é ampliada. Fonte: autoria própria.	66
Figura 10	– Representação do comportamento dos fótons de acordo com a propriedade do campo. Fonte: autoria própria.	69

Lista de tabelas

Tabela 1 – Resultados do teste entre o <i>Simulated Annealing</i> , Sistema de Recomendação e métodos de controle para estoques de tamanhos 420×12 e 300×20	53
Tabela 2 – Tempo médio gasto para realizar uma instrução de inserção e reinserção no estoque 420×12	54
Tabela 3 – Tempo médio gasto para realizar uma instrução de inserção e reinserção no estoque 300×20	54

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
2	INTRODUÇÃO À MECÂNICA QUÂNTICA	15
2.1	Fundamentos Matemáticos	15
2.1.1	Espaço de Hilbert	15
2.1.2	Operadores Lineares	17
2.1.3	Operador Adjunto Hermitiano	17
2.1.4	Operação Traço	18
2.1.5	Autovalores e Autovetores	18
2.2	Hamiltonianos	19
2.3	Função de Onda	20
2.4	Princípio da Superposição	20
2.5	Medida	21
2.6	Princípio da Incerteza	22
2.7	Entrelaçamento	24
3	COMPUTAÇÃO QUÂNTICA	27
3.1	Fundamentos de Computação Quântica Universal	28
3.2	Computação quântica adiabática	32
3.2.1	<i>Annealing</i> Quântico	33
4	INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL E ALGORITMOS DE RECOMENDAÇÃO	37
4.1	Inteligência artificial	37
4.2	Heurísticas e <i>Simulated Annealing</i>	39
4.3	Algoritmos de Recomendação	40
4.3.1	Algoritmos de Mineração de Regras de Associação	41
5	PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO DE ESTOQUE	45
5.1	Metodologia Geral	48
5.2	Método de Recomendações	49
5.3	Métodos envolvendo <i>Annealing</i>	50
6	ANÁLISE DOS RESULTADOS	53
6.1	Conclusão	57

7	CORRESPONDÊNCIA ENTRE A FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO $g^{(2)}(\tau)$ E A MÉTRICA <i>LIFT</i> E PROPOSTA DE APLICAÇÃO	59
7.1	Fundamentos de Óptica Quântica	59
7.1.1	Estados Térmicos	63
7.1.2	Estados Coerentes	64
7.1.3	Estados Comprimidos	65
7.2	Funções Quânticas de Correlação	67
7.3	Análise e Aplicação da Correspondência	69
8	CONCLUSÃO	73
	REFERÊNCIAS	75

1 Introdução

É de interesse de empresas e demais instituições otimizar a utilização de seus recursos, sejam eles de fonte material, financeira, humana, tempo, ou qualquer outra, visando reduzir os gastos desnecessários e aumentar a lucratividade. Uma estratégia de grande popularidade na atualidade para se resolver problemas de otimização baseia-se no uso de Inteligência Artificial (IA). De acordo com [102], a pesquisa na área vem crescendo a cada ano, chegando a mais de 334.500 publicações somente no ano de 2021, principalmente sobre os temas de Reconhecimento de Padrões e Aprendizado de Máquina. O investimento financeiro da iniciativa privada em pesquisas e desenvolvimento também teve grande crescimento, de cerca de 8,98 bilhões de dólares em 2017 à cerca de 93,54 bilhões em 2021.

Além da Inteligência Artificial, a computação quântica também vem atraindo a atenção de diversas empresas como uma estratégia promissora para se resolver problemas de otimização. Além da proposta de se utilizar a superposição de estados quânticos para reduzir o custo temporal de processamento de informação e o uso do entrelaçamento quântico para estratégias mais seguras de comunicação [66, 68], existe ainda a competição para o desenvolvimento do melhor computador quântico. Apesar de o estado atual da computação quântica permitir apenas aplicações restritas e com taxa considerável de ruído, característica da era *Noise Intermediate-Scale Quantum* (NISQ) [72], algumas empresas e grupos de pesquisa alegam ter conseguido ganhos utilizando os dispositivos atuais. Alguns exemplos podem ser encontrados, por exemplo, no site da D-Wave [30] e em [37, 39], cujos resultados fazem parte dessa pesquisa e serão apresentados mais adiante.

A pesquisa aqui detalhada está fundamentada nesse cenário do desenvolvimento dessas duas áreas promissoras, aplicadas em problemas de otimização industrial. Dentre os problemas encontrados pelas empresas e indústrias, está a redução e otimização do seu estoque. Existem diversos trabalhos na literatura tratando dessa preocupação, dentre eles podemos citar [7, 21, 56, 67, 97], além do desenvolvimento de metodologias de gerenciamento como o *Just-In-Time* e o *Just-In-Sequence*. Ambos serão retomados e detalhados futuramente nos próximos capítulos, assim como uma descrição detalhada do problema abordado.

Em resumo, a empresa necessita de um gerenciamento rígido sobre a organização de seus itens, devido tanto às estratégias já utilizadas quanto ao formato de organização do seu estoque, que utiliza uma ordenação de fila por causa do tipo de prateleiras utilizadas. Além de lidar com os custos usuais de um estoque, caso a fila não esteja ordenada segundo a ordem de prioridades da linha de produção, gera um custo maior e mais esforço para

entregar os itens solicitados. O objetivo dessa pesquisa é então desenvolver um algoritmo de otimização de estoque que leve em consideração as prioridades e preferências da linha de produção, de forma que reduza a ocorrência de incidentes relacionados à ordenação.

Para encontrar a melhor solução para esse problema, foram desenvolvidas três abordagens diferentes: um sistema de recomendação clássico, um método por *Simulated Annealing* e um método baseado no *Quantum Annealing*. Uma quarta metodologia foi desenvolvida utilizando-se o *Quantum Approximative Optimization Algorithm* (QAOA) e os detalhes poderão ser encontrados em [75]. Esse trabalho foi realizado em equipe pelo grupo de pesquisa em Algoritmos Quânticos e Otimização, liderado pelo prof. Celso Jorge Villas-Bôas e em parceria com o Centro de Pesquisas Avançadas Wernher Von Braun, responsáveis pela apresentação inicial do problema para o grupo. A situação ilustrada foi trazida ao Centro Von Braun por uma empresa parceira, a qual também disponibilizou as bases de dados para os testes. Em face disso e devido à patente submetida [39], alguns detalhes precisaram ser omitidos para preservar os direitos de todos os envolvidos. Detalhes públicos sobre essa mesma pesquisa também podem ser encontrados nos artigos [37, 75].

Durante os estudos em inteligência artificial, com enfoque em algoritmos de recomendação, notou-se uma semelhança existente entre o Algoritmo de Regras de Associação *Apriori*, mais especificamente a métrica de *Lift*, e a função de correlação da óptica quântica $g^{(2)}(\tau)$, utilizada para se estudar propriedades estatísticas de um campo de radiação, como distribuição de fótons e probabilidades de fotocontagem de dois fótons em coincidência ou separados por um intervalo de tempo τ . Um estudo sobre as possibilidades de desenvolvimento de um algoritmo de recomendação quântico baseado nessa semelhança foi iniciado e os resultados obtidos até o momento foram acrescentados à dissertação.

2 Introdução à Mecânica Quântica

Com o objetivo de trazer os principais conceitos físicos e matemáticos necessários para a compreensão da computação quântica, esse capítulo é útil principalmente para aqueles que começaram seus estudos na área ou pesquisadores de outras áreas que ainda não têm uma formação sólida nesses conceitos e desejam ingressar na pesquisa em computação quântica, em especial alunos de Iniciação Científica e pessoas formadas em áreas de computação.

Iniciando uma breve contextualização sobre a área, a Mecânica Quântica é uma área da física que surgiu devido à ausência de explicação de fenômenos microscópicos (como radiação de corpo negro, efeito fotoelétrico, estabilidade atômica e espectroscopia atômica) por meio da mecânica clássica [101]. A descoberta dos *quanta* de energia por Max Planck em 1900 e dos fótons por Einstein em 1905 impulsionaram uma série de novas descobertas e o desenvolvimento desta área.

Formalmente, a Mecânica Quântica teve duas principais formulações distintas e equivalentes na década de 1920 [101]. A primeira, chamada de formulação matricial, foi desenvolvida por W. Heisenberg em 1925. Esta se baseia na representação matricial dos observáveis (variáveis dinâmicas), tais como energia, posição, momento e momento angular, e no uso da matriz Hamiltoniana para obter o espectro de energia e os vetores de estado do sistema. A segunda formulação foi desenvolvida por E. Schrödinger em 1926 e é conhecida como mecânica ondulatória. Nesse formalismo utiliza-se uma equação de onda por meio da qual é possível obter o espectro de energia e a função de onda do sistema. Max Born, no ano seguinte, acrescentou uma interpretação probabilística de densidade de probabilidades à solução da equação de onda [16, 101]. Apesar de diferentes matematicamente, fisicamente ambas as formulações são equivalentes.

2.1 Fundamentos Matemáticos

Como primeiro passo, serão tratados nessa seção os fundamentos matemáticos necessários para compreender os conceitos de Mecânica Quântica e de computação quântica que estarão presentes no decorrer do texto. Aprofundamentos nestes e em outros tópicos podem ser encontrados nas referências [66, 68, 73, 92, 101]

2.1.1 Espaço de Hilbert

Sendo ψ , ϕ e φ vetores e a e b escalares, definimos um espaço linear com as seguintes propriedades [92, 101]:

- Adição:

- O resultado de $\psi + \phi$ pertence ao espaço vetorial.

- Associatividade:

$$(\psi + \phi) + \varphi = \psi + (\phi + \varphi).$$

- Comutatividade:

$$\psi + \phi = \phi + \psi.$$

- Elemento Neutro:

$$0 + \psi = \psi + 0 = \psi.$$

- Elemento Inverso:

$$\psi + (-\psi) = (-\psi) + \psi = 0.$$

- Multiplicação:

- O resultado de $a\psi$ pertence ao espaço vetorial.

- Distributividade:

$$a(\psi + \phi) = a\psi + a\phi;$$

$$(a + b)\psi = a\psi + b\psi.$$

- Associatividade:

$$(ab)\psi = a(b\psi).$$

- Elemento Neutro:

$$\mathbb{I}\psi = \psi\mathbb{I} = \psi.$$

Satisfazendo as propriedades anteriores, um espaço de Hilbert \mathcal{H} é um espaço linear com produto interno (ψ, ϕ) e que, assim como os espaços de Banach, é completo em sua norma [73]. Um espaço completo é aquele em que cada sequência de Cauchy $\psi_n \in \mathcal{H}$ converge para um elemento do espaço em questão, no caso \mathcal{H} [11, 101].

Na Mecânica Quântica, lida-se com espaços de Hilbert separáveis, o que é equivalente a possuir pelo menos uma base ortonormal cujos vetores $\{\psi_n\} \in \mathcal{H}$ [11, 68]. O estado de Hilbert representa o espaço de estados do sistema, que após ser medido resultará em um único vetor unitário desse espaço, denominado vetor de estado [68].

Para já familiarizar o leitor com os formalismos da área, a partir desse ponto será utilizada a notação de Dirac. Os vetores do espaço de Hilbert são representados como $|\psi\rangle$ e os vetores do espaço dual são representados como $\langle\psi|$, logo o produto escalar é representado como $\langle\psi|\phi\rangle$. Fisicamente, $\langle\psi|\phi\rangle$ nos casos onde ambos os vetores são normalizados, significa a amplitude de probabilidade do sistema descrito por $|\phi\rangle$ ser encontrado no estado $|\psi\rangle$ após uma medida.

2.1.2 Operadores Lineares

Matematicamente, um operador \hat{A} é uma função que transforma um $|\Psi\rangle$ em outro $|\Psi'\rangle$, podendo ser definido para transformações entre espaços vetoriais ou dentro do mesmo espaço no qual foi definido [68]. Operadores podem ser representados matricialmente, o que é extremamente útil no desenvolvimento da mecânica matricial de Heisenberg, visto que os observáveis possuem um operador hermitiano associados a eles [101]. Geralmente, a notação usual é \hat{A} , mas daqui em diante será indicado como operador A para simplificar a notação.

As matrizes de Pauli, também conhecidas como operadores de Spin, são um exemplo de operadores lineares frequentes na mecânica e usados como portas na computação quântica [66]:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_I = \mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Os operadores utilizados para construir portas para computação quântica universal, assim como as matrizes de Pauli mostradas anteriormente, são unitários. Um operador unitário $U : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$, escrito em forma matricial, deve satisfazer a condição $U^\dagger = U^{-1}$, ou seja, $U^\dagger U = \mathbb{I}$, onde U^\dagger se refere ao adjunto do operador U [66, 68]. Na próxima sessão serão apresentados os conceitos referentes ao cálculo de operadores adjuntos hermitianos.

Operadores de projeção também são um tipo bem frequente na computação quântica, por meio dos quais é possível realizar algumas medidas no sistema (o que será abordado posteriormente). Um operador P é considerado operador de projeção se for hermitiano $P^\dagger = P$ e igual ao seu próprio quadrado $P^2 = P$ [66]. O produto de dois operadores de projeção é também um operador de projeção, porém isso não é verdade para a soma de operadores. Outro caso é o produto $|\psi\rangle\langle\psi|$, sendo $|\psi\rangle$ um estado normalizado, que também é um operador de projeção [66].

Uma propriedade importante dos operadores é que a ordem de multiplicação é importante, bem como acontece ao trabalhar com matrizes. Ou seja, o valor de AB pode ser diferente de BA e essa diferença é dada pelo comutador $[A, B] = AB - BA$ [101]. Dois operadores cujo comutador resulta em zero são ditos comutáveis. As implicações físicas dessa propriedade serão discutidas na seção 2.6. Por último, a propriedade complementar a esta é o anticomutador de um operador, dado por $\{A, B\} = AB + BA$.

2.1.3 Operador Adjunto Hermitiano

Conforme introduzido anteriormente, o adjunto hermitiano é útil ao se trabalhar com operadores, mas também é empregado em escalares, vetores e matrizes. O adjunto hermitiano (ou hermitiano conjugado) α^\dagger de um número complexo α é o complexo conjugado

desse número: $\alpha^\dagger = \alpha^*$. Para uma matriz (operador), o adjunto hermitiano é dado por: $A^\dagger = (A^T)^*$ [68]. Vale ressaltar que o adjunto hermitiano de um operador não necessariamente é igual ao seu complexo conjugado. Para o cálculo de adjuntos, são válidas as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} (A^\dagger)^\dagger &= A, \\ (A + B + C)^\dagger &= A^\dagger + B^\dagger + C^\dagger, \\ (ABC)^\dagger &= C^\dagger B^\dagger A^\dagger, \\ (|\psi\rangle\langle\phi|)^\dagger &= |\phi\rangle\langle\psi|, \\ (A|\psi\rangle)^\dagger &= \langle\psi|A^\dagger. \end{aligned} \tag{2.2}$$

A ordem correta para encontrar o adjunto hermitiano de um termo é substituir as constantes pelos seus complexos conjugados, depois inverter os vetores $|\psi\rangle$ em $\langle\psi|$ e vice-versa e por último substituir as matrizes e operadores pelos seus adjuntos [68]. Além disso, recapitulando uma propriedade apresentada anteriormente, um operador qualquer é dito hermitiano (ou auto-conjugado) se for igual ao seu adjunto: $A = A^\dagger$.

2.1.4 Operação Traço

O traço é uma operação sobre uma matriz definida como a soma dos elementos da sua diagonal principal [68]:

$$\text{tr}(A) = \sum_i A_{ii}. \tag{2.3}$$

Essa operação também tem as seguintes características:

- Propriedade cíclica: $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$.
- Linearidade: $\text{tr}(A + B) = \text{tr}(A) + \text{tr}(B)$.
- Invariância sobre transformação de similaridade: $\text{tr}(UAU^\dagger) = \text{tr}(U^\dagger UA) = \text{tr}(A)$.

Para calcular o traço de um operador, dada uma base ortonormal $\{|\psi_n\rangle\}$, tem-se a fórmula [101]:

$$\text{tr}(A) = \sum_n \langle\psi_n|A|\psi_n\rangle = \sum_n A_{nn}. \tag{2.4}$$

2.1.5 Autovalores e Autovetores

Dada uma matriz A e um vetor $|v\rangle \in \mathbb{C}^n$ devidamente selecionado, tal que $A|v\rangle = \lambda|v\rangle$, temos que λ é um autovalor de A e $|v\rangle$ é o seu autovetor associado [66]. A equação característica é dada por $\det|A - \lambda\mathbb{I}| = 0$, a partir da qual é possível encontrar os autovalores de uma matriz ou operador [68]. Encontrar autovalores e autovetores na Mecânica Quântica

está relacionado a encontrar as energias e os vetores de estados associados em um sistema, bem como valores dos observáveis [101].

Todos os autovalores de uma matriz hermitiana são números reais. Além disso, dois autovetores correspondentes a autovalores diferentes são ortogonais entre si. Pode acontecer de uma matriz conter um autovalor que tenha mais de um autovetor associado. Essas matrizes recebem o nome de degeneradas, sendo o grau de degenerescência determinado pela quantidade de autovetores com o mesmo autovalor associado [66].

Parte dos operadores pode ser representada por meio de uma base de autovetores, com seus autovalores associados, seguindo a fórmula $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$. Tal representação é chamada representação diagonal, ou decomposição ortonormal, e operadores que podem ser escritos dessa forma são denominados diagonalizáveis [68].

2.2 Hamiltonianos

A Mecânica Quântica debruça-se sobre a relação entre o sistema, descrito pelo operador Hamiltoniano H , e seu espectro de energia E , que podem ser descritos pela equação de autovalor

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.5)$$

Usando a equação característica citada anteriormente, na forma $\det(H - E) = 0$, é possível resolver essa relação e encontrar, além das energias dadas pelos autovalores, os vetores de estado, dados pelos autovetores associados [101].

Por meio de decomposição espectral, podemos decompor o operador Hamiltoniano como: $H = \sum_E E |E\rangle \langle E|$, com autovalores E e autovetores normalizados correspondentes $|E\rangle$. Os estados $|E\rangle$ são convencionalmente referidos como autoestados de energia, ou as vezes como estados estacionários. O estado com menor energia do sistema é conhecido como estado fundamental (*ground state*) [68].

O operador Hamiltoniano, em um sistema independente do tempo, pode ser escrito na representação de posição como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}), \quad (2.6)$$

com ∇^2 sendo o Laplaciano do sistema [23]. Baseando na eq. 2.5, utilizando o operador Hamiltoniano da eq. 2.6 e adicionando a função de onda $\Psi(\vec{r})$ do sistema (que representa o estado do sistema), encontramos a equação de Schrödinger independente do tempo: [23, 101]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}).$$

No formalismo matricial, a evolução do sistema ocorre por meio da evolução dos operadores, enquanto os estados se mantêm contantes no tempo $(|\psi(t)\rangle)_H = |\psi(0)\rangle_H = |\psi\rangle_H$ [92].

Dado o operador de evolução temporal $e^{-iHt/\hbar}$ aplicado em um operador U_0 , a evolução do sistema é dada como:

$$\langle \psi | U(t) | \psi \rangle_H = \langle \psi | e^{iH(t)/\hbar} U_0 e^{-iH(t)/\hbar} | \psi \rangle_H. \quad (2.7)$$

2.3 Função de Onda

Ao desenvolver a mecânica ondulatória, Schrödinger tinha como meta descobrir uma equação que pudesse elucidar o comportamento do elétron em um átomo, concentrando-se na natureza ondulatória do elétron. Isso implica que, para cada órbita, existe um único comprimento de onda (ou uma onda), representada por uma função de onda Ψ , relacionada ao elétron enquanto ele se movimenta nessa trajetória. Generalizando, o estado de uma partícula é descrito pela função de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ [101]. Dessa forma, o conceito de trajetória da mecânica clássica é substituído pelo conceito de estado variando no tempo, por meio da propagação da função de onda [23]. A dependência temporal de um estado é governada pela equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle, \quad (2.8)$$

na qual H é o operador Hamiltoniano do sistema. A equação acima é formalmente resolvida para gerar

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (2.9)$$

que podemos reescrever utilizando um operador chamado de operador unitário de evolução temporal $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$, de forma que $|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle$ [66, 68]. Apesar de matematicamente os formalismos de Heisenberg e Schrödinger trabalharem a evolução de forma diferente, o resultado obtido em ambos é equivalente [68, 92].

Com a interpretação probabilística da função de onda, a partir de $|\Psi|^2$ obtém-se a densidade de probabilidades do sistema, tal que $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = dP(\vec{r}, t)$ é a probabilidade de encontrar uma partícula no tempo t no espaço de volume d^3r . Logo, a probabilidade de que a partícula seja encontrada no espaço é dada por: $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ [101]. Assim, as funções de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ que são fisicamente aceitáveis devem, juntamente com suas primeiras derivadas $\frac{d\Psi(x_i)}{dx_i}$ (x_i a i -ésima coordenada), ser finitas, contínuas e de valor único em todos os pontos, devido ao fato que tanto a densidade de probabilidade quanto o momento linear são funções contínuas de x_i [101].

2.4 Princípio da Superposição

Assim como no mundo clássico (mecânica ondulatória), uma função de onda pode ser formada por uma superposição de duas ou mais funções de onda na forma

$\Psi = \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2 + \dots + \alpha_n \Psi_n$, sendo $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\} \in \mathbb{C}$ [101]. Essa afirmação é verdadeira considerando a propriedade de que se $\psi_1(\vec{r}, t)$ e $\psi_2(\vec{r}, t)$ satisfazem a equação de Schrödinger, então $\psi(\vec{r}, t) = \alpha_1 \psi_1(\vec{r}, t) + \alpha_2 \psi_2(\vec{r}, t)$ também satisfaz a equação de Schrödinger.

Portanto, como cada função de onda da composição resulta em um estado do sistema, o estado do sistema também pode ser composto pela superposição de diversos estados, na forma [68, 101]:

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle. \quad (2.10)$$

A probabilidade do sistema estar nessa superposição é dada por $P = |\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle|^2$. Se o sistema for ortonormal, então a probabilidade é dada pela soma das probabilidades individuais ($P = \sum_i |\alpha_i|^2$) [101]. Um detalhe importante de se ressaltar é que não é possível obter como resultado de uma medida um estado em superposição. O que será extraído é apenas um dos estados $|\psi_i\rangle$, com a probabilidade $|\alpha_i|^2$. Como resultado, toda a informação codificada na superposição não é possível de ser transportada para o mundo clássico.

2.5 Medida

Para extrair informações do sistema quântico, como por exemplo o valor médio de algum observável, é necessário interagir com o sistema por meio de uma medida. Essa medida é representada por um operador, de modo que ao final do processo o sistema estará em um dos autoestados desse operador de medida [101]. Como pode ser percebido, isso gera uma perturbação significativa no sistema, fazendo com que os efeitos dessa interação devam ser sempre considerados.

Medidas quânticas são descritas por uma coleção de operadores de medida M_m , agindo no espaço de estados do sistema a ser medido. O índice m se refere à saída da medida que deve ocorrer no experimento [68]. Se o estado do sistema for $|\psi\rangle$ imediatamente antes da medida, então a probabilidade de que o resultado m ocorra é dada por $P_m = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$, sendo P_m a representação geral de medidas POVM (*Positive Operator-Valued Measure*). O estado em que o sistema estará após essa medida é $\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}}$.

Existe ainda um caso especial de medidas, denominadas Medidas Projetivas, nas quais M_m são projetores ortogonais. Uma medição projetiva é descrita por um observável, M , um operador hermitiano no espaço de estado do sistema que está sendo observado. O observável tem uma decomposição espectral: $M = \sum_m m \mathbb{P}_m$, em que \mathbb{P}_m é o projetor para o espaço de M com valor próprio m . Os possíveis resultados da medição correspondem aos autovalores m do observável. Ao medir o estado $|\psi\rangle$, a probabilidade de obter o resultado m é dada por $P_m = \langle \psi | \mathbb{P}_m | \psi \rangle$ [68]. Dado que o resultado m ocorreu, o estado do sistema quântico imediatamente após a medição é $\frac{\mathbb{P}_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \mathbb{P}_m | \psi \rangle}}$. Em estados em superposição do

tipo $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle$, cada estado $|\psi_i\rangle$ tem a probabilidade $|\alpha_i|^2$ de ser encontrado durante uma medida em $|\psi\rangle$. Para extrair uma distribuição das probabilidades $|\alpha_i|^2$ será necessário preparar N estados $|\psi\rangle$ idênticos, sendo N um número suficientemente grande comparado à quantidade de estados sobrepostos, e realizar uma operação de medida em cada. A partir da quantidade de vezes que cada estado foi medido, é possível aproximar estatisticamente o valor de α_i .

É importante ressaltar que os m estados possíveis de serem medidos devem ser ortogonais entre si. Caso contrário, não há medida capaz de distingui-los. Isso acontece pois, ao considerar um estado $|\psi_i\rangle$ não ortogonal a $|\psi_j\rangle$, medidas sobre o estado $|\psi_i\rangle$ resultaria em $M_j = 1$ e $M_i = 1$, em razão da componente ortogonal de $|\psi_j\rangle$ em $|\psi_i\rangle$ [68].

O valor esperado $\langle A \rangle$ representa o resultado médio de medir A em um estado $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (2.11)$$

Usando uma base completa de autovetores $\{|\psi_n\rangle\}$ de A como uma base discreta, podemos escrever $\langle A \rangle$ como:

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} = \sum_n a_n P_n. \quad (2.12)$$

Esse valor é interpretado como o resultado médio de uma série de medidas de A [101]. Já em uma base contínua, temos a distribuição de probabilidades:

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} a |\psi(a)|^2 da}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(a)|^2 da} = \int_{-\infty}^{+\infty} a dP(a). \quad (2.13)$$

2.6 Princípio da Incerteza

Pelo comportamento ondulatório da partícula na Mecânica Quântica, a função de onda define que a partícula está, de certa forma, espalhada no espaço. Conceitos clássicos como posição exata, momento exato e trajetória única de uma partícula não fazem sentido na escala microscópica [101]. Isso acontece pois, se uma partícula fosse localizada, sua função de onda se tornaria zero em todos os outros lugares e sua onda teria um comprimento muito curto, o que de acordo com a relação de De Broglie $p = \frac{h}{\lambda}$, faz com que o momento dessa partícula seja muito alto. Mas este não é um problema apenas de formalismo. Para medir a posição de um elétron em um átomo, é necessário usar radiação de comprimento de onda de cerca do tamanho do átomo. A energia dessa radiação é alta o suficiente para alterar significativamente o momento do elétron. Ou seja, a simples observação do elétron afeta tanto seu movimento que pode tirá-lo totalmente de sua órbita. Portanto, é impossível determinar a posição e o momento simultaneamente com precisão arbitrária.

A partir desse ponto, já se torna mais compreensível o princípio de incerteza de Heisenberg. Comumente, ele é enunciado como em [101]:

“se a componente x do momento de uma partícula é medido com uma incerteza Δp_x , então sua posição x não pode, ao mesmo tempo, ser medida com mais precisão do que $\Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p}$ ”,

sendo Δx (Δp) o desvio padrão determinado pela fórmula $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ ($\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$). O princípio da incerteza de Heisenberg pode ser generalizado para qualquer par de variáveis dinâmicas complementares ou canonicamente conjugadas (cujos operadores não comutam) [92, 101]. Energia e tempo, por exemplo, formam um par de variáveis complementares e obedecem à relação de incerteza $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$.

Embora seja verdade que as medições na Mecânica Quântica interferem no sistema, o princípio de incerteza não se refere apenas a medidas individuais [68]. Supondo uma preparação de um grande número de sistemas quânticos em estados idênticos $|\psi\rangle$. Ao medir um observável A em uma parcela desses sistemas e um observável B complementar a A no restante dos sistemas, os desvios padrão ΔA e ΔB dos resultados obedecerá à desigualdade:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle|}{2}. \quad (2.14)$$

Essa é a forma mais comum encontrada nos livros de áreas da quântica, porém essa fórmula está incompleta: Há um fator de correção que envolve também o anticomutador de A e B , que pode resultar em diferenças significativas, por exemplo para estados em superposição simples como $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$. Tal fator foi introduzido nos estudos iniciados por E. U. Condon [24] e H. P. Robertson [76] e finalizados por Schrödinger [78].

Dado $|f\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle$, pode-se definir $\Delta^2 A = \langle f | f \rangle$ pois:

$$\begin{aligned} \Delta^2 A &= \langle f | f \rangle \\ &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)(A - \langle A \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Dessa forma, dado $|g\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle$, também é correto definir:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle. \quad (2.16)$$

Dada a desigualdade de Schwarz [92] que prova que $|\langle f | g \rangle|^2 \leq \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle$, substituindo o lado direito da equação 2.16 pela desigualdade, obtêm-se:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq |\langle f | g \rangle|^2. \quad (2.17)$$

Dado que $|\langle f | g \rangle|^2 = \left(\frac{\langle f | g \rangle + \langle g | f \rangle}{2} \right)^2 + \left(\frac{\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle}{2} \right)^2$, ao reescrever $\langle f | g \rangle$ e $\langle g | f \rangle$ em função de $|\psi\rangle$ e dos operadores A e B , como na equação 2.16, e tomar a raiz quadrada, obtêm-se a relação de incerteza de Robertson-Schrodinger:

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \sqrt{\left(\frac{\langle \{A, B\} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle}{2} \right)^2 + \left(\frac{\langle [A, B] \rangle}{2i} \right)^2}. \quad (2.18)$$

2.7 Entrelaçamento

O entrelaçamento, ou emaranhamento, é um fenômeno exclusivo da Mecânica Quântica, onde o estado de duas ou mais partículas apresenta correlações que não podem ser explicadas por qualquer teoria clássica [68]. Ele é crucial para a computação e informação quântica, pois possibilita o teleporte, a distribuição de chaves, a operação de SWAP, entre outros efeitos [47].

Em [33], Einstein, Podolsky e Rosen tentam adequar os fenômenos da mecânica quântica ao realismo local, no qual mais especificamente as propriedades das partículas têm valores intrínsecos, independente de serem ou não medidas (realismo), e as medições em uma partícula não perturba o estado de uma segunda partícula medida separadamente (localidade) [61]. Como essa tentativa resultou em um paradoxo, que ficou conhecido como paradoxo EPR, os autores levantaram a hipótese de que a teoria da mecânica quântica estava incompleta e propuseram a existência de variáveis ocultas para complementar o modelo [47, 61].

A partir dos pressupostos de EPR, J. Bell [9] estabeleceu uma condição de localidade fisicamente razoável, da qual Clauser, Horne, Shimony e Holt [22] derivaram uma expressão conhecida como desigualdade de CHSH, ou em formas mais generalizadas como desigualdade de Bell. A partir dessa desigualdade seria então possível testar experimentalmente se o modelo de variáveis ocultas seria válido. Outros diversos estudos e experimentos foram feitos, dentre eles [44], porém todos eles contestaram a existência de variáveis ocultas [47, 68] e confirmaram o comportamento contra-intuitivo da Mecânica Quântica. Detalhes do entrelaçamento serão apresentados a seguir, mas uma revisão mais detalhada pode ser vista em [47].

Para analisar se existe ou não entrelaçamento em um sistema, é necessário analisar sua configuração. Um sistema composto de dois subsistemas com estados $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$, tal que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, é chamado bipartido [66]. A generalização para n subsistemas pode ser denominada como sistema composto [68]. Sistemas como esse podem ser separáveis ou entrelaçados e são caracterizados por meio do operador densidade $\rho = \sum_i P_i |i\rangle \langle i|$. Por questões de didática, utilizaremos as definições para estados puros no restante dessa seção. Podemos definir um estado puro separável genérico se este puder ser composto pela combinação de estados produto $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle$ [47, 61, 68]. Aqueles em que isso não é possível são denominados entrelaçados, como por exemplo o estado $|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$. Este é um estado de Bell, que é um caso especial de estados bipartidos com emaranhamento máximo definido por $|\beta_{xy}\rangle = \frac{|0y\rangle + (-1)^x |1\bar{y}\rangle}{\sqrt{2}}$ [47, 61]. Como pressuposto, alguns estados são mais emaranhados que outros e essa quantidade de emaranhamento pode ser definida através da decomposição de Schmidt.

Dado um sistema composto em $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, o estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser escrito

pela decomposição de Schmidt como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^s \sqrt{\lambda_i} |\psi_{A_i}\rangle \otimes |\psi_{B_i}\rangle, \quad (2.19)$$

cujos $\sum_i \lambda_i = 1$ e $\lambda_i > 0$ são os coeficientes de Schmidt, $\{|\psi_{\alpha_i}\rangle\}$ é a base ortonormal de \mathcal{H} e s é o número de Schmidt [66]. Os coeficientes podem ser calculados por meio da matriz $Tr_B = (|\psi\rangle\langle\psi|)$, na qual a quantidade de autovalores não nulos é correspondente ao número de Schmidt. Se houver apenas um autovalor não-nulo, então o estado é separável. Caso contrário, o estado é entrelaçado e esse valor é correspondente à “quantidade” de entrelaçamento entre os sistemas A e B [61, 68].

3 Computação Quântica

Com o advento da computação clássica, muitos sistemas físicos puderam ser estudados a partir de cálculos numéricos, contribuindo fortemente para o avanço científico e tecnológico. No entanto, logo foi observado que os computadores clássicos não seriam capazes de executar os cálculos das simulações dos sistemas quânticos em tempo eficiente, devido ao espaço de soluções crescer exponencialmente com o número de partículas. Foi então sugerido por P. Benioff em 1980 [10] e fomentado por R. Feynman [40] a utilização da Mecânica Quântica para a criação de computadores que, ao obedecerem às regras do mundo quântico, também seriam capazes de simular esses sistemas. Após isso, em 1983, David Z. Albert [6] criou um modelo teórico de computação que respeitasse fundamentos da Mecânica Quântica, que foi então generalizado para o modelo de computação quântica universal proposto por Deutsch em [27, 28]. Desde então, os trabalhos na área de computação quântica se debruçam em propor/realizar experimentos que comprovem ganhos temporais desse modelo em relação à computação clássica, seja através da construção de novas arquiteturas ou de algoritmos/circuitos que sejam capazes de resolver problemas custosos de serem computados classicamente.

Formalmente, esses problemas custosos podem ser reescritos como versões equivalentes aos problemas contidos nas classes NP (*nondeterministic polynomial time*), cujos problemas apenas podem ser resolvidos polinomialmente por uma máquina de Turing não determinística. Em uma máquina de Turing determinística (ex.: computadores clássicos), supõe-se que exista um aumento exponencial na complexidade para alcançar a solução, o que implicaria na prova de que $P \neq NP$ [71], sendo P a classe *deterministic polynomial time*. Esse aumento não se aplica à validação de uma solução já existente. Existem discussões na literatura tentando definir se a computação quântica é equivalente ou não a uma máquina de Turing não-determinística, mas ainda não existe um consenso definitivo [12, 57, 64, 69].

Atualmente, existem diversas arquiteturas para a construção de computadores quânticos, cada uma com suas vantagens e desvantagens. Dentre as diversas plataformas, podemos citar alguns exemplos como qubits supercondutores [66], ressonância magnética nuclear [66, 68], íons aprisionados [19, 35, 66, 68], átomos neutros [66], pontos quânticos (*quantum dots*) [66]. Apesar de cada implementação ser experimentalmente diferente, existe um formalismo ao qual os modelos anteriores seguem, ou são equivalentes a ele. Esse formalismo é denominado computação quântica universal.

Neste capítulo será aprofundado os conceitos fundamentais da área de computação quântica universal e também no modelo de computação adiabática, equivalente ao modelo universal, mas diferente dos demais modelos citados anteriormente.

3.1 Fundamentos de Computação Quântica Universal

Na computação clássica, a menor unidade de informação é o bit, que nada mais é do que um sistema de dois estados, 0 e 1, autoexcluentes. Fisicamente, sua implementação pode ser feita através de pulsos elétricos medidos em função do tempo [91], conforme ilustrado na figura 1. A cada ciclo de *clock* é realizada uma medida da tensão da corrente naquele instante para determinar se a informação é zero ou um, dependendo de qual intervalo o valor medido pertence. O sinal digital carrega a informação dada pelos valores de tensão.

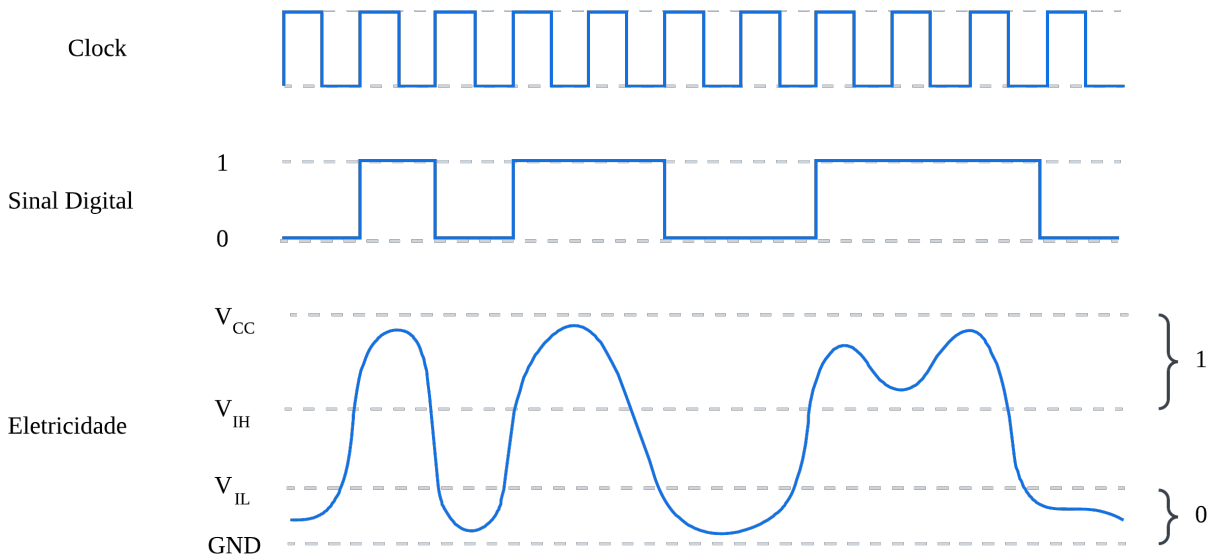


Figura 1 – Representação do processamento de bits em circuitos integrados. A cada pulso de *clock*, é medida a tensão de entrada e transcrita como sinal digital. Valores entre a V_{IH} e V_{CC} são considerados como 1 e valores entre V_{IL} e GND são considerados como 0. Fonte: autoria própria.

Na computação quântica, a informação é manipulada através de bits quânticos chamados qubits. Um qubit é um sistema de dois níveis, que pode ser considerado como o sistema de uma partícula em um poço quadrado, de comprimento L e potencial $V(x)$. O Hamiltoniano desse sistema é dado por:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \text{ onde } \begin{cases} V(x) = 0, \text{ se } 0 < x < L, \\ V(x) = \infty, \text{ caso contrário.} \end{cases} \quad (3.1)$$

As autofunções desse Hamiltoniano podem ser expressas por $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left(\frac{n\pi}{L} x \right)$, sendo n um número inteiro referente ao nível do estado, e a autoenergia referente é dada por $E_n = \frac{n^2 \pi^2 m}{2L^2}$. Supondo $n \leq 2$, ou seja, tomando somente as duas menores energias do sistema, é possível definir um estado mais geral como a sobreposição dos respectivos autoestados, que escrito na notação de Dirac é dado por: $|\psi\rangle = \alpha |\psi_0\rangle + \beta |\psi_1\rangle$ [68].

Dessa forma, escrevemos um qubit em superposição como $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, onde $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são os estados da base computacional e α e β são as amplitudes do estado, ou seja, relacionados à probabilidade do qubit, ao ser medido, ser encontrado no estado da base correspondente [68]. Essa probabilidade segue sempre a relação $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, já que os estados da base são ortonormais e existe 100% de chance de que o qubit seja encontrado. Além da base computacional, o estado do qubit também pode ser escrito como uma combinação linear dos estados da base de Hadamard $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ e da base $\{|i\rangle, |-i\rangle\}$.

Na figura 2 há a representação de uma esfera de Bloch, no qual as informações anteriores podem ser observadas graficamente. Dado que o estado de um qubit pode ser representado como um vetor nessa esfera, a equação pode ser escrita em função dos ângulos θ e ϕ , tais que $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \phi < 2\pi$: $|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$ [66].

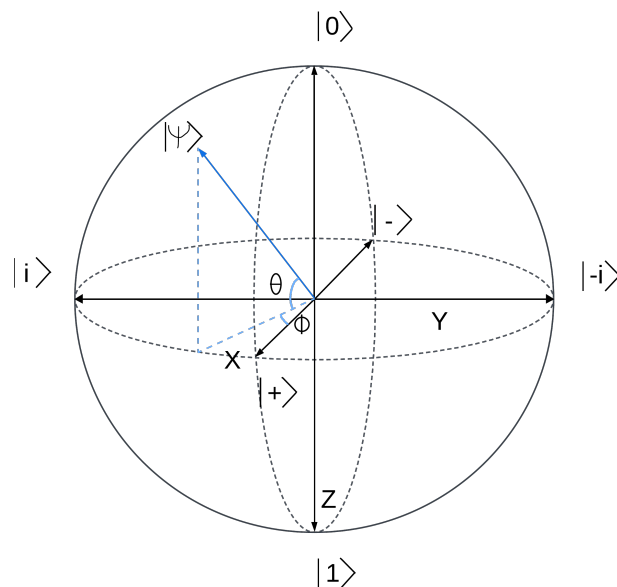


Figura 2 – Esfera de Bloch para representação esquemática de um qubit. Fonte: autoria própria.

Desse modo, a computação quântica visa métodos de se manipular as probabilidades dos qubits por meio de algoritmos, de forma que ao final se obtenha a resposta para uma determinada tarefa.

Em [27], Deutsch buscou explorar os limites do que é computável pela Tese de Church-Turing¹ e desenvolver um computador universal que fosse capaz de simular qualquer sistema físico. Continuando seu trabalho, em [28] Deutsch propôs a utilização de portas quânticas, conceito emprestado das portas lógicas clássicas, para a construção de um método universal de computação quântica.

Portas quânticas são operações unitárias, representadas por matrizes, capazes de manipular os estados de um ou mais qubits. As principais portas de um qubit são: X, Y,

¹ “Qualquer função que seria naturalmente considerada computável pode ser computada pela Máquina de Turing universal” [27]. Os computadores clássicos atuais são equivalentes à máquinas de Turing.

Z e Hadamard [66, 68]. As portas X, Y, Z são os conhecidos operadores de Pauli, citados na seção 2.1.2:

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Já a porta de Hadamard realiza uma rotação que altera o estado do qubit para uma superposição de estados na base de Hadamard. A seguir está a forma matricial desse operador, assim como sua atuação nos estados da base computacional:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \text{ tal que: } \begin{cases} H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \\ H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{cases}$$

Apesar de já existirem portas pré-definidas, é possível rotacionar um qubit em um ângulo arbitrário no espaço de fase. Considerando o ângulo de rotação θ no eixo i , uma rotação arbitrária $R_i(\theta)$ é definida como [68]:

$$\begin{aligned} R_x(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta X}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\text{sen}\frac{\theta}{2}X = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\text{sen}\frac{\theta}{2} \\ -i\text{sen}\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \\ R_y(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta Y}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\text{sen}\frac{\theta}{2}Y = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\text{sen}\frac{\theta}{2} \\ \text{sen}\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \\ R_z(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta Z}{2}} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\text{sen}\frac{\theta}{2}Z = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Também é possível realizar operações em dois ou mais qubits ao mesmo tempo. Operações desse tipo geram o fenômeno de entrelaçamento [66, 68], também descrito na seção 2.7. Uma dessas portas é a *Controlled-Not* (CNOT), também conhecida como *Controlled-X*. Essa porta opera uma mudança de estado do segundo qubit (alvo), como em uma aplicação da Pauli-X, se o primeiro qubit (controle) estiver no estado $|1\rangle$:

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \text{ tal que: } \begin{cases} \text{CNOT}|00\rangle = |00\rangle, \\ \text{CNOT}|01\rangle = |01\rangle, \\ \text{CNOT}|10\rangle = |11\rangle, \\ \text{CNOT}|11\rangle = |10\rangle. \end{cases}$$

Outra porta importante é a porta SWAP. Pelo teorema da não-clonagem, não é possível copiar o estado de um sistema para outro sem a utilização de medidas ou colapso do sistema clonado. Porém, essa porta consegue realizar uma operação similar a uma troca

de vetor de estados entre dois qubits, tarefa diferente de uma clonagem mas que pode auxiliar em alguns casos [68]:

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \text{ tal que: } \begin{cases} \text{SWAP } |00\rangle = |00\rangle, \\ \text{SWAP } |01\rangle = |10\rangle, \\ \text{SWAP } |10\rangle = |01\rangle, \\ \text{SWAP } |11\rangle = |11\rangle. \end{cases}$$

A partir da escolha de algumas portas é possível criar um conjunto universal que seja capaz de descrever qualquer algoritmo computável pela computação quântica, conforme proposta iniciada em [28]. Em [8] é provado que o conjunto de portas unitárias de um qubit associado à porta CNOT forma um conjunto universal, com o qual é possível decompor qualquer porta de dois ou mais qubits e, por consequência, escrever qualquer circuito quântico. Além disso, lembrando que o modelo de portas foi desenvolvido para ser Turing-computável², é possível escrever circuitos quânticos que adaptam as portas clássicas AND, NOT, OR, XOR e NAND, reafirmando novamente que todos os problemas computados pela computação clássica podem ser computáveis por um computador quântico. Mais detalhes sobre a transcrição das portas clássicas podem ser obtidos em [66].

Na prática, a construção de cada porta varia de acordo com a arquitetura de implementação dos qubits [19, 35, 66, 68]. Porém, existe uma arquitetura de computadores quânticos que não utiliza portas: o modelo adiabático. Segundo [4], o modelo adiabático é equivalente ao modelo universal de computação quântica. Ou seja, ambos são capazes de resolver os mesmos tipos de problemas, porém com uma diferença polinomial no tempo de execução. Um exemplo com uma popularidade considerável são os computadores da empresa canadense D-Wave³, que implementam um *annealing* quântico para processar os algoritmos adiabaticamente.

Apesar das discussões na comunidade se esses dispositivos realmente podem ser considerados computadores quânticos ou não [43, 86, 100], estes estão sendo empregados em diversos problemas como propostas competitivas às demais arquiteturas [26, 30, 31, 32, 46, 49, 99]. Como foram empregados os computadores quânticos da DWave para resolução do problema de gerenciamento de estoque, será providenciado logo a seguir um enfoque maior na computação adiabática, em especial sua implementação por *annealing* quântico. Um estudo na plataforma de íons da *Alpine Quantum Technologies* (AQT)⁴, de Innsbruck, Áustria, também foi realizado, mas como a escala dos dados de teste foi muito diferente, não será abordado aqui, porém as informações podem ser encontradas em [75].

² Modelos que conseguem computar os mesmos problemas que uma Máquina de Turing [68].

³ <https://www.dwavesys.com/>.

⁴ <https://www.aqt.eu/>.

3.2 Computação quântica adiabática

A computação adiabática é um modelo de computação quântica que se baseia na evolução adiabática de um sistema quântico [61]. Foram criadas diversas formulações para o teorema adiabático, abarcando conceitos como computação estocástica e não-estocástica, e podem ser vistos com mais detalhes na revisão [5]. Mas dentre todas, sua versão mais popular foi desenvolvida por Max Born e Vladimir Fock em 1928 [17], onde se enuncia:

“O estado instantâneo de um sistema quântico que começa no estado fundamental não degenerado de um Hamiltoniano dependente do tempo permanecerá em seu estado fundamental, desde que o Hamiltoniano mude de forma suficientemente lenta. No entanto, a função de onda pode adquirir uma fase.”

A partir desse teorema, para resolver um problema via computação adiabática, define-se um Hamiltoniano contendo as restrições e características do problema. Esse será o Hamiltoniano final H_f . Uma estratégia é definir custos e penalizações, tal que quanto menor a energia do sistema mais satisfatória será a solução. A computação inicia no estado fundamental de um Hamiltoniano H_i que seja fácil de se implementar, evoluindo lentamente em relação ao tempo característico do sistema, de forma que ao final o sistema se encontre no estado fundamental de H_f [4, 61]. É necessário que os Hamiltonianos utilizados sejam locais, ou seja, que envolvam apenas interações em um número contante de partículas, similar a restringir que um circuito de portas quânticas opere em uma quantidade constante de qubits [4, 34]. Isso garante que sejam fisicamente realistas e possíveis de serem implementados.

Essa evolução é regida por um Hamiltoniano de interpolação $H = (1 - s)H_i + sH_f$, tal que $s = \frac{t}{T}$ e T é o tempo total do processo adiabático [61]. Esse tempo de execução é determinado pelo menor *gap* entre o estado fundamental e o estado excitado de menor energia dentre os Hamiltonianos H_i e H_f , chamado *gap* espectral [4, 61]. Esse *gap* ΔE deve seguir a proporção $T \propto \hbar/\Delta E$ para que o tempo T de execução seja polinomial. [4] Segundo [88], a partir do teorema adiabático é possível demonstrar que para alcançar o estado fundamental em H_f com fidelidade igual à 1, o tempo total T tende à infinito.

Em determinados casos, existe uma barreira de potencial como obstáculo para que o sistema se aproxime do estado fundamental de H_f . Porém, na Mecânica Quântica existe a possibilidade de que partículas com baixa energia “atravessem” por barreiras de potencial mesmo se a altura da barreira é maior que a energia total da partícula, processo chamado de tunelamento quântico [34]. A barreira de potencial de largura L pode ser

escrita na forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{quando } x < 0, \\ V_0, & \text{quando } 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{quando } x > L. \end{cases} \quad (3.3)$$

Um estudo aprofundado sobre as vantagens do tunelamento pode ser encontrado em [34], onde é demonstrado que, graças ao tunelamento, a computação adiabática tem potencial para alcançar resultados melhores que seu semelhante clássico, o *Annealing* Simulado. Mais detalhes sobre esse método clássico estarão na Seção 4.2. Existe ainda uma subclasse da computação adiabática chamada *Quantum Annealing*, que mantém ainda mais similaridade com o *Annealing* Simulado e que utiliza-se das vantagens do tunelamento. Esse modelo de computação rendeu bons resultados para a tarefa abordada nesta pesquisa e suas particularidades abordadas na seção a seguir.

3.2.1 *Annealing* Quântico

O processo de recozimento (*Annealing*) é baseado em fenômenos da natureza, como a formação ou cristais e fabricação de metais [51]. Nesses processos, onde um material é aquecido até uma temperatura alta e resfriado lentamente, quanto mais lenta a queda da temperatura, melhores (em geral) serão as características finais do material, semelhante ao funcionamento de um processo adiabático mencionado anteriormente.

Como uma forma de computação adiabática, o *annealing* quântico é realizado por meio de dois Hamiltonianos: um Hamiltoniano inicial H_i fácil de ser preparado e um Hamiltoniano final H_f que codifica o problema [51, 60]. Porém, apesar de a solução ótima estar codificada no estado fundamental, esse modelo de computação não garante encontrar o mínimo global, mas sim uma solução boa o suficiente em um dos mínimos locais [51], devido a limitações experimentais que perturbam os estados do sistema. Essa mudança acontece visando encontrar um equilíbrio entre uma boa solução e o tempo de *annealing*, que poderia facilmente superar o tempo de decoerência do sistema, além de uma consequência dos ruídos devido à implementação real não ser um sistema fechado.

Para o Hamiltoniano inicial, pode-se escolher o operador de campo transversal $H_i = \sum_{i=1}^N \sigma_x^{(i)}$ na base X [36, 60]. Ao iniciar o algoritmo com esse H_i , todos os estados de H_f antes do *annealing* terão a mesma probabilidade, pois os qubits estarão em superposição com relação à base Z onde H_f é escrito.

Para ser executado, o Hamiltoniano H_f que descreve o problema deve ser equivalente ao modelo de Ising [60]. Caso o problema em questão possa ser reduzido a um problema NP-Completo bem conhecido na literatura, o artigo [58] apresenta uma grande variedade

de traduções já bem detalhadas. Um modelo de Ising tem a forma:

$$H_{ising} = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)}, \quad (3.4)$$

cujo acoplamento entre os spins é representado por J_{ij} e h_i é a anisotropia⁵ aplicada ao i -ésimo spin [36, 58]. Essa equação pode ser abstraída para um grafo $G = (V, E)$ com pesos h_i em n vértices e pesos J_{ij} em m arestas, ao substituir $\sigma_z^{(i)}$ por valores de spin $x_i \in \{\pm 1\}$ [60]. O modelo de Ising é equivalente ao modelo QUBO (*quadratic unconstrained binary optimization*), bastando substituir $\sigma_z^{(i)}$ por $x_i = (2y_i - 1)$, sendo y_i uma variável binária de valor 0 ou 1 [36, 60].

A transição de H_i para H_f é configurada pelas funções de caminho $A(s)$ e $B(s)$, tais que $A(s) : \approx 1 \rightarrow 0$ e $B(s) : \approx 0 \rightarrow 1$ conforme o tempo de transição (*anneal*) $s : 0 \rightarrow 1$ [60] e $A(0) \neq 0$, $B(1) \neq 0$ e $A(1) = B(0) = 0$ [88]. O Hamiltoniano de interpolação é então escrito como:

$$H = A(s) \sum_{i=1}^N \sigma_x^{(i)} + B(s) \left(\sum_{i < j} J_{ij} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(j)} + \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)} \right). \quad (3.5)$$

É importante ressaltar que a computação por *quantum annealing* que utiliza o modelo descrito, como é comumente implementada, não é considerada um modelo universal para a computação adiabática. Isso pode ser alcançado refinando um pouco mais esse modelo, ao adicionar um acoplamento $\sigma_x \sigma_x$ transversal bidirecional sintonizável [14].

Geralmente, não é possível implementar H_f diretamente nos dispositivos físicos, sendo necessária uma adaptação de acordo com a topologia do computador escolhido [60]. A escrita do modelo Ising requer um grafo denso, às vezes completamente conectado, o que não é encontrado nos sistemas disponíveis devido à complexidade em construir e manter a fidelidade durante operação. Na figura 3 está exemplificado um modelo de topologia dos computadores Advantage da empresa D-Wave, na qual é possível visualizar que os qubits físicos possuem um número restrito de conexões entre si. Para implementar um grafo cujos qubits tenham mais conexões que a topologia permite, é utilizado qubits auxiliares de forma que dois ou mais qubits físicos sejam responsáveis por um nó do grafo de H_f [60], representando um qubit lógico. Essa transcrição é, geralmente, de complexidade NP. No caso dos dispositivos da D-Wave, a própria empresa disponibiliza ferramentas para ajudar o programador a traduzir H_f em um grafo compatível.

Após as etapas descritas, o algoritmo está pronto para ser implementado. Dado um estado inicial em H_i , o *anneal* atua a cada passo substituindo o estado atual por um estado adjacente buscando a menor energia [51]. O raio de exploração, também denominado por largura de tunelamento, é dado pela intensidade do campo, que se inicia grande o suficiente para comportar todos os estados possíveis e é reduzido durante o *anneal* até que os estados

⁵ Valor numérico que determina a direção do spin, por consequência a física e os efeitos envolvidos

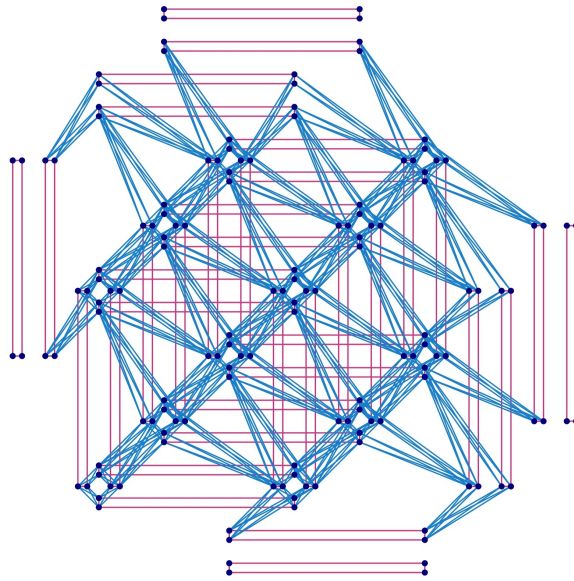


Figura 3 – Representação da topologia de um sistema Pegasus P3, presente na QPU Advantage da empresa candense D-Wave. Os qubits são representados pelos pontos azuis e os acoplamentos são representados pelas linhas, cujas cores definem o tipo e função. Fonte: extraído de [15]

vizinhos tenham valores de energia extremamente próximos. Ao final, o sistema é medido e espera-se que esteja em um dos mínimos do sistema. Devido aos ruídos, para aumentar a probabilidade de encontrar o estado de menor energia, esse algoritmo é executado um número considerável de vezes e o menor estado encontrado dentre as amostras (*shots*) é escolhido como resposta do problema.

Apesar de o estado atual da computação quântica precisar de computadores clássicos atuando como suportes para o tratamento de dados de entrada e saída, é possível unir processadores clássicos e quânticos para a resolução de uma tarefa. Esse modelo é denominado computação híbrida e consiste em separar o processamento em etapas e distribuir de acordo com as vantagens que cada processador apresenta. A pesquisa aqui apresentada empregou esse modelo de computação, por meio do Serviço de *Solvers* Híbridos (HSS) oferecido pela D-Wave [29], que emprega métodos clássicos e quânticos para obter a melhor solução.

Atualmente, o HSS suporta problemas em variáveis binárias (modelo quadrático binário - BQM), discretas (modelo quadrático discreto - DQM) e um misto de variáveis binárias e inteiras (modelos quadráticos com restrições - CQM). Este último foi escolhido para aplicação no problema, devido aos resultados apresentados serem superiores em relação à minimização de energia e tamanho do problema, comparado à abordagem de computação unicamente por *annealing*. As especificidades dos *Solvers* e modelos disponíveis podem ser encontradas em [29], bem como suas capacidades de atuação e comparações entre as abordagens.

4 Inteligência Artificial e Algoritmos de Recomendação

4.1 Inteligência artificial

Uma das primeiras discussões sobre a “inteligência” das máquinas está presente nas notas de Ada Lovelace sobre as máquinas de Charles Babbage [62], onde se traduz “A Máquina Analítica não tem pretensões de criar nada. Ela pode fazer tudo o que sabemos ordenar que faça. Ela pode seguir a análise, mas não tem o poder de antecipar nenhuma relação ou verdade analítica.” Anos mais tarde, Hartree [45] implica que isso não significa que não possam existir máquinas que possam pensar por si próprias, pensamento que Turing leva adiante em seu artigo [93] e define o Jogo da Imitação como método para analisar a capacidade de pensamento de uma máquina.

Diversos avanços foram feitos na área, buscando desde modelos para tomada de decisões a modelos que pudessem simular o funcionamento do cérebro. Para nortear o escopo e desenvolvimento da área, foram formuladas diversas definições para o termo “Inteligência Artificial” (IA), mas ainda não existe um consenso sobre o melhor termo [2, 77, 84, 96]. O que parece estar em comum com a maioria é o fato de abarcarem sistemas com tomada de decisão evoluídos, mais similares ao raciocínio humano. Como exemplo sobre a falta de consenso, podemos citar as definições legais:

Art. 2º Para os fins desta Lei, considera-se: I - sistema de inteligência artificial: o sistema baseado em processo computacional que pode, para um determinado conjunto de objetivos definidos pelo homem, fazer previsões e recomendações ou tomar decisões que influenciam ambientes reais ou virtuais [18].

O conceito de Inteligência Artificial aplica-se a sistemas que apresentam um comportamento inteligente, analisando o seu ambiente e tomando medidas — com um determinado nível de autonomia — para atingir objetivos específicos [94].

Dentro das pesquisas em Inteligência Artificial, é possível separar algumas subáreas, conforme o diagrama da figura 4. Há também quem inclua algoritmos Bio-inspirados e outras heurísticas dentro da área de IA, que dispõe de técnicas aproximativas e/ou estocásticas para resolução de problemas e tomadas de decisões. Abordaremos mais adiante a heurística de *Simulated Annealing*, inspirada no recozimento de metais, utilizada nessa

pesquisa. Ainda, na grande área estão presentes métodos como Árvores de Decisão, Sistemas Especialistas, dentre outros [77].

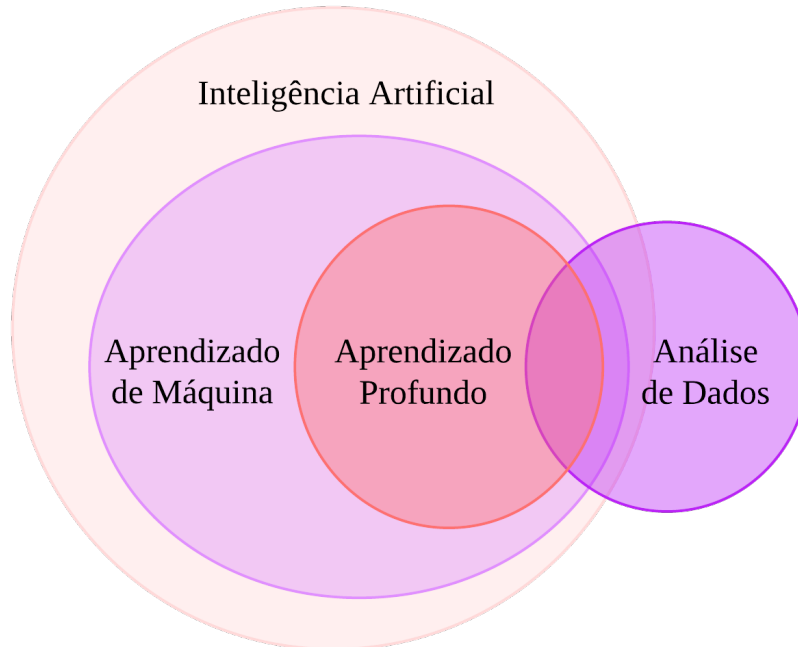


Figura 4 – Diagrama de Venn demonstrando a organização das subáreas da Inteligência Artificial. Fonte: autoria própria.

Na subárea de Aprendizado de Máquina (em inglês, *Machine Learning*), como o próprio nome diz, estão algoritmos que realizam um processo semelhante ao de aprendizado [79]. Baseado em dados fornecidos previamente, parâmetros iniciais e/ou a configuração do ambiente, o sistema realiza um processo de captura de padrões e correlações, geralmente durante uma fase de treinamento de modelo, que o permite definir uma política de ações para a resolução ou execução de uma tarefa. Aqui estão contidas principalmente as redes neurais, que são modelos inicialmente inspirados no funcionamento do cérebro.

Em Aprendizado Profundo (em inglês, *Deep Learning*) pertencem os modelos cujo método de aprendizagem se utiliza de vários níveis de transformações, obtendo modelos de representação mais complexos e abstratos, em sua grande maioria envolvendo Redes Neurais Profundas [55]. Estes modelos apresentam maior potencial para resolução de problemas complexos e são utilizados também para simulação de comportamento humano, processamento de linguagem natural, visão computacional, entre outros.

Paralelo à Inteligência Artificial, mas ainda correlacionado, estão os algoritmos de Análise de Dados. Nesta área há desde tratamento de dados, análise estatística, Mineração de Dados, Algoritmos de Recomendação, Regras de Associação, entre outros, que se utilizam de técnicas das áreas citadas no diagrama ou realizam processos que se encaixam nas definições de IA [77].

4.2 Heurísticas e *Simulated Annealing*

Um número considerável de problemas de interesse da sociedade e empresarial recaem na classe de problemas NP [1, 58]. Porém ainda não existe solução exata em tempo polinomial para esses problemas, nem mesmo prova de que isso pode ser encontrado algum dia (que é o caso de descobrir se $P = NP$) [25]. Um exemplo é o caixeiro viajante, ao qual se resumem diversos problemas de logística, redes e caminhos em grafos, além de ser possível usá-lo para reduzir outros problemas pertencentes à classe NP-Difícil.

A melhor solução para um problema é chamada de ótima. Em um problema de otimização do tipo caixeiro viajante, encontrar a solução ótima significa encontrar o mínimo global da função, ou seja, o menor ciclo que passa por todos os vértices do grafo. Porém, como encontrar soluções desse tipo pode ser muito custoso em relação ao tempo e/ou recurso computacional, muitas vezes opta-se por utilizar algoritmos que encontrem soluções boas o suficiente (mínimos locais), que não são necessariamente a solução ótima, mas em tempo viável. Essa é, resumidamente, a definição de uma heurística [41, 87].

O *Simulated Annealing* (também chamado em português de Recozimento Simulado) é uma meta-heurística, cuja definição é: um método iterativo que orienta o uso de heurísticas subordinadas para encontrar soluções eficientes [87]. Originalmente, o algoritmo de *Simulated Annealing* foi proposto em [53], baseado no algoritmo de Metropolis proposto em [63] como uma simulação de um sólido em um banho térmico através de técnicas de Monte Carlo.

O algoritmo de Metropolis é iniciado em um estado i_0 com energia E_{i_0} . Aplicando uma pequena perturbação a cada iteração, o sistema é levado a um estado j , que é aceito se minimizar a energia do sistema ($E_i - E_j \leq 0$) ou, caso contrário, é aceito com probabilidade de:

$$P_{i,j} = \exp\left(\frac{E_i - E_j}{k_B T}\right), \quad (4.1)$$

onde T denota a temperatura do banho térmico e k_B é a constante física chamada constante de Boltzmann [1]. Após um número considerável de transições em uma mesma temperatura, o sistema encontra o equilíbrio térmico modelado pela distribuição de Boltzmann da equação 4.2, que define a probabilidade do sistema estar no estado i com energia E_i à temperatura T , dado os n possíveis estados:

$$P_T(i) = \frac{\exp(-E_i/k_B T)}{\sum_j^n \exp(-E_j/k_B T)}. \quad (4.2)$$

O *Simulated Annealing* é implementado ao adicionar um cronograma de resfriamento, repetindo o algoritmo de Metropolis a cada diminuição da temperatura [1]. O resfriamento é dado por uma função de decremento da temperatura, dados valores da temperatura inicial e uma temperatura final. Para cada valor de temperatura é associada uma cadeia de Markov, que consiste em uma sequência de tentativas de solução do problema

[1, 34], ou seja, as perturbações realizadas pelo algoritmo de Metropolis. Os parâmetros para o resfriamento podem ser definidos de forma estática, antes do início, ou de forma dinâmica, se adaptando durante a execução.

Para utilizar esse formalismo para a resolução de problemas de otimização, é necessário transcrever o problema de forma que as possibilidades de soluções possam ser descritas como os estados e a função custo como a energia relacionada, o que recai em um Hamiltoniano para o sistema [53]. É conveniente que os estados sejam escritos como cadeias binárias. Pode-se, inclusive, utilizar o mesmo Hamiltoniano H_f utilizado para a computação adiabática e para o *Quantum Annealing*.

A execução do algoritmo é realizada partindo-se de uma alta temperatura, simulando o sólido “derretido”, e procede diminuindo lentamente a temperatura até que o sistema “congele” no estado fundamental [53]. O estado inicial é gerado aleatoriamente dentre os S possíveis estados do sistema. Dada a sequência de temperaturas $T = \infty \geq T_1 \geq T_2 \geq \dots T_M \geq 0$, a cada valor de temperatura o algoritmo executa operações de *bit flips*, de forma que na iteração k um bit escolhido para aquela iteração seja invertido. Se a modificação minimiza a energia do sistema, é aceita [34, 53]. Caso contrário, pode ser aceita com probabilidade dada pela Regra de Metropolis da equação 4.1, adicionando ou não um parâmetro de normalização.

O parâmetro de normalização citado auxilia a controlar a exploração das soluções e escapar de mínimos locais ao permitir que soluções onde $E_k > E_{k-1}$ sejam aceitas. Ele é configurado de forma que quanto maior a temperatura, maior seu valor e, conseqüentemente, maior a possibilidade de aceitação [1]. Ainda de acordo com [1], o *Simulated Annealing* pode convergir assintoticamente para soluções globalmente ideais, porém é dependente da escolha dos parâmetros.

4.3 Algoritmos de Recomendação

Como o próprio nome diz, um algoritmo de recomendação é aquele capaz de gerar uma recomendação para um usuário sobre um determinado escopo, partindo de dados previamente analisados. É empregado principalmente em sistemas de venda e *streaming*, mas também pode ser adaptado para outros contextos, como é o caso dessa pesquisa. A ideia de desenvolver algoritmos de recomendação surgiu a partir da união da teoria da probabilidade com as representações de relações entre objetos de um domínio que estavam em estudo em meados do século XX [77]. Inicialmente, os estudos eram tidos apenas como Inteligência Artificial, mas se tornaram um subgrupo de pesquisa próprio à medida que os algoritmos evoluíram.

Os algoritmos são treinados, ou configurados, baseando-se em operações já realizadas dentro da base de dados do sistema, por exemplo a partir de avaliações de usuários e

compras realizadas. A forma como usam esses dados para encontrar padrões, formar grupos e/ou gerar correlações é separada em [82, 83]:

Processo Baseado em Conteúdo: as recomendações são geradas baseando-se apenas nos dados disponíveis para aquele usuário, coletados durante a interação com o sistema. Apesar de precisar de poucos dados para gerar uma boa recomendação, costuma enfrentar problemas com novos usuários (sobre os quais não há informação suficiente) e pode se tornar superespecialista, gerando recomendações apenas dentro de um pequeno nicho e carecendo de variedade.

Processo de Filtragem Colaborativa: as recomendações são geradas baseando-se em dados de outros usuários que apresentam preferências semelhantes. O sistema começa a gerar boas recomendações apenas quando um número suficiente de usuários com preferências já bem delimitadas, o que também leva a uma quantidade muito grande de dados, muitas vezes esparsa. Também são encontradas dificuldades quando as preferências de um usuário diferem muito dos outros usuários.

Processo Híbrido: combina ambas as estratégias, usando tanto os dados do usuário quanto buscando grupos de usuários com gostos em comum, para contornar os problemas de cada método.

O sistema de recomendação desenvolvido é baseado em conteúdo, mas não sofre do problema de superespecialização, devido às configurações do cenário detalhadas no capítulo 5. Para classificar as opções mais vantajosas a serem recomendadas, o sistema se inspirou na geração de regras de associação do algoritmo Apriori [3]. Na revisão [65], 20% dos sistemas de recomendação revisados utilizam algum algoritmo de Regras de Associação como parte do método. Além disso, o algoritmo Apriori está sendo usado como inspiração para uma versão quântica de um algoritmo de recomendação, conforme será apresentado na seção 7.3.

4.3.1 Algoritmos de Mineração de Regras de Associação

Os algoritmos de Mineração de Regras de Associação fazem parte da intersecção entre as áreas de Inteligência Artificial e Análise de Dados, mais especificamente dentro do subgrupo de algoritmos de Recomendação.

Sejam X e Y conjuntos de um ou mais itens contidos na base de dados, sendo $X \cap Y = \emptyset$, uma regra de associação é uma implicação na forma $X \Rightarrow Y$, onde X é chamado antecedente e Y é chamado conseqüente [54]. Isso significa que a existência de X em uma transação implica na presença de Y com um certo grau de probabilidade. Essa probabilidade, ou correlação, é medida por funções, detalhadas a seguir.

A primeira delas, o Suporte, calcula a proporção de cada item ou conjunto de itens nas transações da base de dados [54]. Seu cálculo é dado por:

$$\begin{aligned} \text{Suporte}(X) &= \frac{\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X}{\text{n}^\circ \text{ total de transações}}, \\ \text{Suporte}(X, Y) &= \frac{\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X \text{ e } Y}{\text{n}^\circ \text{ total de transações}}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

A confiança representa a proporção de vezes em que um item aparece combinado a outro ($X \cup Y$) dentro de todas as ocorrências daquele primeiro item (X), significando uma medida de “robustez” da regra de associação [54]. Sua função é definida como:

$$\text{Confiança}(X, Y) = \frac{\text{Suporte}(X, Y)}{\text{Suporte}(X)} = \frac{\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X \text{ e } Y}{\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X}. \quad (4.4)$$

A última função a ser detalhada é o *Lift*. Essa função mede a proporção com que o item X está presente em transações junto com o item Y , levando em consideração também a proporção de ocorrências do item Y . Segundo Hussein, Alashqur e Sowan [48], a Confiança possui a limitação de não conseguir capturar corretamente a correlação entre o antecedente e o conseqüente das regras de associação, tarefa que é melhor desempenhada pela medida de *Lift*. Sua função é escrita como:

$$\begin{aligned} \text{Lift}(X, Y) &= \frac{\text{Confiança}(X, Y)}{\text{Suporte}(Y)} \\ \text{Lift}(X, Y) &= \frac{(\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X \text{ e } Y) \times (\text{n}^\circ \text{ total de transações})}{(\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } X) \times (\text{n}^\circ \text{ de transações contendo } Y)}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Esta medida pode assumir 3 significados diferentes que demonstram as correlações entre antecedente e conseqüente, a depender de seu valor [48]:

- se $\text{Lift}(X, Y) > 1$: existe uma correlação positiva entre os itens;
- se $\text{Lift}(X, Y) < 1$: existe uma correlação negativa entre os itens;
- se $\text{Lift}(X, Y) = 1$: a correlação é independente.

Em particular, essa medida tem semelhanças consideráveis com a função de correlação entre fótons $g^2(\tau)$, que nos fornece informações sobre a probabilidade de detectarmos um fóton em um tempo t e um segundo fóton em um tempo $t + \tau$. Um estudo sobre a aplicação da função $g^2(\tau)$ para a geração de um Algoritmo de Recomendação Quântico, baseado na ótica quântica e na função de *Lift*, está em andamento. Mais detalhes sobre a proposta estão organizados no capítulo 7.

O algoritmo Apriori, um dos algoritmos de Mineração de Regras de Associação, contava apenas com a medida de Suporte no artigo original [3], mas atualmente sua

implementação costuma incluir as outras duas medidas, como por exemplo na biblioteca Apyori [74] e nos tutoriais [50, 70]. Dada uma base de dados composta por transações, o Apriori solicita como parâmetro um valor mínimo de Suporte S_{min} que será utilizado para reduzir os conjuntos.

Ao executar o algoritmo [3], a primeira etapa é a contagem de ocorrência dos N itens e determinação do maior conjunto presente nas transações, que será suposto de tamanho N apenas para exemplo. Na etapa seguinte, serão gerados conjuntos de tamanho $N - 1$ e os valores de Suporte S_i são calculados. Esse passo é realizado em *loop*, no qual apenas os itens com valor de Suporte acima do que foi limitado são selecionados para a próxima iteração. O processo é realizado até que não hajam mais itens nos conjuntos.

Limitar o Suporte atua cortando os ramos da árvore de conjuntos, evitando calcular todas as possibilidades e assim diminuindo a complexidade. A ideia principal desse algoritmo é que, dado um conjunto de itens, a adição de mais um item o tornaria menos provável, dessa forma o valor de Suporte será menor e mais próximo do corte. Dessa forma, também é garantido que os subconjuntos dos conjuntos retirados também terão o valor de Suporte inferior ao limite.

O algoritmo desenvolvido nessa pesquisa para a geração dos parâmetros de correlação se baseou nas funções mencionadas anteriormente, bem como em uma otimização do algoritmo Apriori. Devido à quantidade de itens na base de dados, o tempo gasto no cálculo do Apriori Original para a geração de recomendações foi inviável. Detalhes mais específicos serão omitidos, devido à proteção intelectual e interesses comerciais, os quais se relacionam com o pedido de patente depositado sobre esse projeto [39].

5 Problema de Otimização de Estoque

O gerenciamento do estoque é um processo crucial e a pesquisa em novas técnicas e métodos de otimização é de grande interesse empresarial [7, 21, 56, 67, 97]. Essa preocupação existe há mais de 70 anos, quando foi criado o modelo *Just-in-Time* (JIT). Em 1950, Taiichi Ohno desenvolveu essa estratégia que prega um modelo de estoque mínimo, onde é armazenado apenas o necessário para a fabricação dos itens já encomendados [90]. O objetivo é manter um estoque enxuto, diminuindo o desperdício de itens e melhorando o fluxo de produção, além de manter um controle maior de todos os processos de produção. Apesar da redução nos custos, a empresa se torna mais conectada aos seus fornecedores. Se por um lado isso traz contratos e relações mais duradouras, também a torna mais dependente dessas outras empresas e vulnerável a seus contratemplos e falhas.

Ainda em assuntos de logística, a localização das empresas também é importante. Fábricas e empresas situadas em condomínios industriais ou parques tecnológicos usufruem de maior infraestrutura e maior proximidade com empresas parceiras, centros de pesquisa e mão-de-obra especializada [85]. Em alguns casos existe, inclusive, parcerias entre governo e o setor privado para a construção e manutenção destes polos. Nesse sentido, se torna vantajoso para uma empresa que usa estratégias como JIT que suas indústrias parceiras se localizem no mesmo polo industrial, o que evita problemas e gastos relacionados ao transporte de matérias-primas e produtos entre elas.

Favorecido por esse contexto, há a evolução do método JIT para o método *Just-In-Sequence* (JIS), visando um estoque mais fluido e com controle mais preciso. O JIS propõe, além de todas as considerações do JIT, que a matéria-prima e demais itens cheguem na mesma ordem em que serão necessários na linha de produção [90]. Em tese, esses itens devem estar prontos para ir para a linha de produção desde o momento do envio para a empresa consumidora. Com o desenvolvimento dos condomínios empresariais e polos tecnológicos, a proximidade torna ainda mais prática a adesão a essa estratégia, ressaltando a vantagem que o custo de estoque seria reduzido tanto para a empresa principal quanto para suas fornecedoras, além da economia com o transporte da matéria-prima.

Devido ao fluxo intenso e prazos curtos no método de JIS, as fábricas envolvidas necessitam de um sistema robusto de tecnologia da informação para sincronizar as linhas de produção e manter o ritmo consistente. Baseado na necessidade de otimizar um sistema de gerenciamento de estoque de uma fábrica inserida nesse contexto, foi desenvolvida esta pesquisa em parceria com o Centro de Pesquisas Avançadas Wernher Von Braun¹, responsável pelo intermédio entre o grupo de pesquisa e a empresa solicitante (cujo nome

¹ <https://wvblabs.org/>.

permanecerá anônimo por questões de confidencialidade).

Como já existe um interesse no desenvolvimento da solução, os critérios para modelagem da situação-problema tomaram como base o processo real. Seguindo o modelo representado pela figura 5, a fábrica A é fornecedora de produtos que servem de matéria-prima para outra empresa B, que funcionam lado a lado e dividem o mesmo estoque. A empresa B solicita as matérias-primas necessárias, a fábrica A produz e ao concluir, armazena no estoque compartilhado, de maneira ordenada, para que a empresa B consuma assim que necessário. O principal objetivo desta pesquisa está na otimização da alocação dos itens dentro desse estoque, de forma que mantenha as características do JIS e otimize o fluxo de trabalho de ambas empresas.

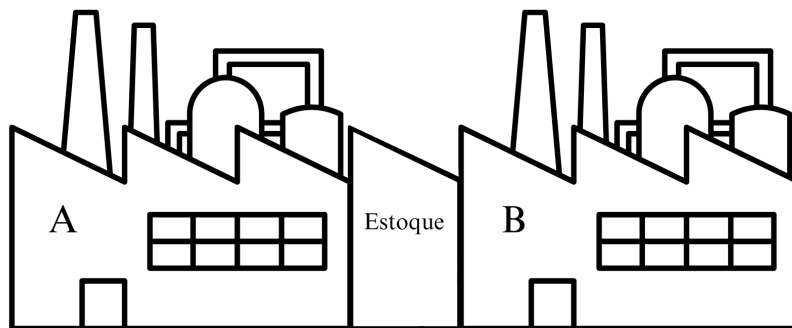


Figura 5 – Esquema de representação da dinâmica de duas empresas segundo o JIS, sendo uma delas produtora de matérias-primas (A) e a outra consumidora desse material (B). Fonte: Modificado a partir de © amethyststudio via Canva.com.

Tratando agora dos detalhes da modelagem, um fato importante a ser observado é que todos estes itens estão agrupados em paletes, chamados de *Stock Keeping Unity* (SKU). Cada SKU é formado por um conjunto de um único tipo de item (ex. parafusos sextavados M10), que é identificado por um código único chamado de *Stock Keeping Unity identification* (SKUid). Assim, temos a relação de que cada SKUid (tipo de item) pode estar em vários SKUs (paletes), mas cada SKU (palete) contém apenas um SKUid (tipo de item).

Todos os SKUs na situação abordada são organizados em prateleiras (ou *racks*) gravitacionais (figura 6). Essa estrutura tem seus andares ligeiramente inclinados, de forma que ao inserir um SKU, este desliza pelos trilhos até o outro lado da prateleira. Isso garante uma organização onde os primeiros itens a serem inseridos também serão os primeiros a serem retirados. Esta estratégia é conhecida como *First-In, First-Out* (FIFO). Esse estilo de organização visa evitar a perda de itens por deterioração, sendo muito útil para lidar com produtos que tem prazo de validade curtos, por exemplo.

Dadas todas estas condições, o funcionamento do estoque precisa seguir regras rígidas de organização, o que se torna problemático em algumas situações. Devido ao espaço físico reduzido, não é possível ter prateleiras que recebem apenas SKUs de um



Figura 6 – Fotografia de uma prateleira gravitacional. Fonte: retirado de [13]

único SKUid (o que será chamado daqui em diante de prateleiras dedicadas). É necessário que mais um SKUid ocupe a mesma prateleira, de acordo com a necessidade do momento. Dessa forma, acontece frequentemente de um item ser necessário na produção e não estar acessível na primeira posição de nenhuma prateleira, sendo necessário retirar outros paletes para acessar um SKU com o SKUid solicitado.

Todo esse processo é realizado por empilhadeiras, que só conseguem retirar um SKU por vez. Ao ser retirado, o SKU precisa ser inserido novamente em alguma prateleira com espaço disponível para sua acomodação. Esse processo é chamado de reinserção e apenas por meio dele alguns SKUs podem ser acessados no estoque. Vale lembrar que ao retirar o item da primeira posição, o segundo item desliza pelos trilhos diretamente para a primeira posição, com os demais itens atrás, dada a ação da gravidade.

A ocorrência de reinserções é considerada puramente custo para a empresa, visto que pode atrasar a produção, desorganizar o estoque e não trazer nenhum benefício ou lucro, apenas retrabalho apesar de necessárias em alguns momentos. Assim, o problema de otimização de estoque gira em torno de otimizar a inserção dos itens, de forma que sua organização diminua o número de reinserções e assim otimize também a retirada dos itens, tornando o funcionamento do estoque o mais eficiente possível.

Para alcançar esse objetivo, foram comparados três métodos diferentes: Algoritmo Clássico de Recomendação (seção 5.2), sistema de otimização por *Annealing* Quântico e por *Simulated Annealing* (seção 5.3), estes últimos liderados por outros membros do grupo de pesquisa. Os processos em comum são detalhados a seguir na seção seguinte. Uma quarta metodologia usando QAOA em uma plataforma (computador quântico) de íons aprisionados também foi estudada e é apresentada em [75]. Devido às diferenças entre os pontos analisados na pesquisa envolvendo QAOA com relação às demais abordagens, optou-se por não realizar uma comparação desses resultados aqui, ressaltando também a diferença entre os pontos fortes abordados nas duas pesquisas.

5.1 Metodologia Geral

Todas as três estratégias necessitam de parâmetros que ditem como um item se correlaciona com outro. Para isso, foi desenvolvido um algoritmo baseado no algoritmo Apriori, descrito na seção 4.3, para a geração de valores de correlação entre os SKUids, visando encontrar conjuntos de itens que tendem a ser retirados em conjunto. Os dados utilizados para o treinamento e teste foram disponibilizados pela empresa parceira, consistindo de uma fração do banco de dados correspondente a aproximadamente um ano de inserções e retiradas de itens do estoque. Desses dados, ao menos 50% foram utilizados para o treinamento (geração dos parâmetros de correlação) e o restante foi utilizado para os testes. Essa etapa é realizada nativamente pelo Sistema de Recomendação Clássico e compartilhada para ser usada no *Simulated* e *Quantum Annealing*. No Sistema de Recomendações, esses valores serão chamados de parâmetros de correlação M . Nos métodos que utilizam o *annealing*, o parâmetro M é usado para calcular os parâmetros λ na forma $\lambda_{x,y} = 1 - \frac{M_{x,y} + M_{y,x}}{2}$, dados x como antecedente e y o conseqüente de uma regra de associação.

Os valores de correlação são necessários para todos os algoritmos, bem como uma configuração inicial fictícia para o estoque. Como a primeira base de dados cedida pela empresa parceira é um recorte das transações do banco de dados oficial, não há registros que mostrem a configuração real do estoque em nenhum momento. Sendo assim, é impossível traçar sua ocupação para o início dos testes, mas também não é razoável considerar todos os espaços vazios, visto que é uma situação irreal e não mostra o comportamento em níveis críticos. Para compor o estoque inicial da forma mais realista possível, foi buscado na base de dados de teste todos os itens que teriam a retirada solicitada, mas a quantidade presente no momento da solicitação não seria suficiente e utilizados para compor o estoque inicial.

Ainda, as seguintes regras utilizadas na empresa deveriam ser usadas nas simulações:

1. É desejável que SKU's com o mesmo SKUid ocupem a mesma prateleira.
2. Algumas prateleiras só podem alocar certos SKUids (geralmente por motivos de compatibilidade de dimensões entre as prateleiras e os paletes).

Para melhor verificação do desempenho das soluções frente a cada regra, dois testes foram realizados: um teste onde apenas a primeira regra era satisfeita e um segundo teste onde ambas as regras eram satisfeitas. No primeiro teste foram tomados 215 SKUids diferentes distribuídos em 72460 solicitações de inserção e 72135 solicitações de remoções, somadas a 3229 inserções para compor o estoque inicial. Todas as informações se basearam em dados reais fornecidos, com exceção do formato do estoque, que foi definido como 420×12 e 300×20 (prateleiras \times posições), quantidade escolhida baseando-se nas

descrições aproximadas do modelo da fábrica. No segundo teste foram analisadas as operações envolvendo 178 SKUIDs diferentes seguindo um fluxo de 24825 inserções e 26542 remoções, referente a um período de 3 meses, em um estoque composto inicialmente por 3121 SKUs e com 541 prateleiras variando entre 10 ou 13 posições.

Enquanto a escolha da inserção é feita de acordo com o método escolhido e seus respectivos parâmetros M ou λ , o processo de retirada segue uma regra bem mais simples. Dado um SKUID solicitado, é escolhido o SKU correspondente que esteja alocado na primeira posição de qualquer prateleira, ou o mais próximo da primeira prateleira. Devido a limitações de acesso ao *hardware* durante a execução do projeto, os testes no *Quantum Annealing* não levam em conta as operações de retirada, que eram a base para a comparação de custo entre os métodos de *Simulated Annealing* e o Sistema de Recomendação. Para contornar esse problema, também foram realizados testes apenas com as operações de inserção e tamanhos reduzidos de estoque. Ao final de cada execução, foi calculada a energia final do sistema, baseada nos parâmetros λ 's, como medida de custo dos sistemas. Testes realizados envolvendo apenas o *Simulated* e o *Quantum Annealing* estão disponíveis em [37].

5.2 Método de Recomendações

Baseando-se nos métodos e conceitos da seção 4.3, o sistema de recomendação inicia-se com o processamento dos parâmetros de correlação para a geração das recomendações. Optou-se por calcular apenas uma vez para cada teste, mas em uma implementação real, é possível atualizar esses parâmetros em períodos pré-definidos, não sendo necessário paralisar nem reiniciar o sistema, visto que é possível inclusive paralelizar essa tarefa para não gerar sobrecarga e nem atrasar o fluxo de recomendações.

Uma vez definidos o conjunto de parâmetros de recomendação e a configuração de prateleiras e quantidade de posições que será utilizada, o sistema inicia lendo a base de transações usada como teste. Ou seja, é enviada uma instrução identificada como inserção ou retirada e o SKUID do item relacionado à tarefa e só após a sua conclusão o sistema pode receber uma nova instrução. Se for necessário retirar outros itens para alcançar o SKU com o SKUID solicitado, estes são reinseridos novamente no estoque logo após cada retirada, similar ao processo realizado com as empilhadeiras na fábrica.

No momento de inserir um item, o sistema faz uma varredura no estoque verificando a possibilidade de inserção em uma prateleira dedicada e, caso contrário, verifica a possibilidade de criação de uma nova prateleira dedicada a partir de uma prateleira vazia. Caso não seja possível, o sistema parte para a geração de uma recomendação por meio dos parâmetros M . Vale ressaltar que são analisados os itens que já estão no estoque e as posições possíveis para a inserção, evitando a geração de recomendações inúteis ou

inconsistentes.

Como pode ser percebido, esse processo não se altera com a adição da Regra 2 para o segundo teste. A única modificação realizada é a inclusão na instrução de um código com o tipo de palete e uma lista de paletes aceitos vinculada a cada prateleira, que deve ser consultada antes de cada inserção. Para a retirada, não foi implementada a verificação devido ao item contido ser o mesmo, independente da dimensão do palete.

5.3 Métodos envolvendo *Annealing*

Com o intuito de se encontrar a melhor solução, aqui apresentamos as pesquisas referentes ao uso do *Simulated* e do *Quantum Annealing* para a resolução do problema de gerenciamento de estoque. Essa implementação está detalhada também em [36, 37]. Inicialmente, os testes para a versão quântica foram implementados nos dispositivos da D-Wave² via acesso em nuvem, mas se tornaram limitados quando a empresa retirou seus serviços do Brasil, o que impossibilitou os testes implementando as funções de retirada.

Para ambas versões foi utilizado o mesmo Hamiltoniano, desenvolvido por meio da redução do problema de estoque nos problemas de Caixeiro Viajante e problema da Mochila [36], cujos Hamiltonianos para resolução já são bem conhecidos pela literatura [58]. A ideia veio da similaridade entre “encontrar a melhor seleção de itens para preencher um espaço finito com o maior lucro”, objetivo do problema da Mochila, e “encontrar a melhor ordem de cidades sem repetição”, objetivo do problema do Caixeiro Viajante, com respectivamente “selecionar os melhores itens para preencher uma prateleira de forma a otimizar o fluxo” e “organizar em uma prateleira os SKU’s selecionados de forma a otimizar o fluxo”, objetivos do problema de Alocação de Estoque.

Para descrever o problema, foram desenvolvidos dois Hamiltonianos no formalismo QUBO que dividem o problema em duas etapas: fase de agrupamento e a fase de inserção. A primeira etapa se resume em agrupar os N paletes que aguardam alocação em M prateleiras disponíveis, que serão ordenados na etapa de inserção. A etapa de agrupamento é codificada pelo Hamiltoniano da equação abaixo (5.1) composto por três partes, cada qual com a sua variável de penalização (A , B e C) para o devido cumprimento da tarefa:

$$\begin{aligned}
 H_{agrup} &= H_A + H_B + H_C \\
 H_{agrup} &= A \sum_{\alpha=1}^N \left(1 - \sum_{m=1}^M x_{\alpha}^m \right)^2 + B \sum_{m=1}^M \left(\sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ (\alpha > \beta)}}^N \lambda_{\alpha\beta} x_{\alpha}^m x_{\beta}^m + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\tau=1}^{P_m} \lambda_{\alpha\tau}^{(m)} x_{\alpha}^m \right) + \\
 &\quad + C \sum_{m=1}^M \left(\sum_{\alpha=1}^N c_{\alpha} x_{\alpha}^m + \langle \mathbf{2} | \mathbf{a}_m \rangle - R_m \right)^2.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

² <https://www.dwavesys.com/>.

no qual H_A é responsável por assegurar que cada palete ocupe apenas uma prateleira, H_B é responsável pelo agrupamento dos paletes nas prateleiras e H_C impõe a restrição de que o limite de itens em cada prateleira, R_m , seja respeitado e não sejam alocados mais itens do que o permitido. Na equação acima 5.1, x_α^m é uma variável binária que codifica se o SKU será alocado na m -ésima prateleira, com um custo c_α relacionado às características do palete (comprimento, peso, etc.) que se relacionam diretamente à capacidade restante R_m da prateleira. Os paletes virtuais são representados por a_m , que pela expressão binária se obtém $\langle \mathbf{2} | \mathbf{a}_m \rangle = \sum_{l=0}^{\lfloor \log_2 R_m \rfloor} c_a a_l^m$, com o custo $c_a = 2^l$. Os valores de correlação entre os SKUIDs são codificados na variável λ , com α e β sendo SKUs que estão sendo inseridos e τ os SKUs já presentes na prateleira. Como mencionado anteriormente, esses valores foram gerados classicamente pelo módulo do Sistema de Recomendações.

Já o Hamiltoniano de inserção foi codificado na forma:

$$H_{ins} = \left[\sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha > \beta}}^{N_m} \sum_{s=P_m+2}^{P_m+N_m} \lambda_{\alpha\beta} x_\alpha^{(s)} x_\beta^{(s-1)} + \sum_{\alpha=1}^{N_m} \lambda_{\alpha\tau} x_\alpha^{(P_m+1)} \right] + \quad (5.2)$$

$$+ D \left[\sum_{s=P_m+1}^{P_m+N_m} \left(1 - \sum_{\alpha=1}^{N_m} x_\alpha^{(s)} \right)^2 + \sum_{\alpha=1}^{N_m} \left(1 - \sum_{s=P_m+1}^{P_m+N_m} x_\alpha^{(s)} \right)^2 \right],$$

no qual o primeiro trecho é responsável por organizar os N itens que foram agrupados na fase anterior e o segundo é responsável por garantir que um palete obrigatoriamente ocupe uma única posição (s), por meio de um parâmetro de penalização D . Esse Hamiltoniano resolve a ordenação para apenas uma prateleira, sendo necessário então $O(M)$ execuções.

Dado todos os parâmetros para o Hamiltoniano, ambos os sistemas recebem então a lista com o fluxo de entrada e saída de itens do estoque. No *Simulated Annealing* foi possível realizar as operações de inserção e retirada, enquanto no *Quantum Annealing* foi possível testar apenas as inserções. Isso se deve à restrição comentada anteriormente sobre o acesso aos dispositivos. Em todo caso, a energia do sistema para cada configuração foi coletada para facilitar a comparação, já que, devido ao modelo do Hamiltoniano, quanto mais correlacionados estão os itens lado a lado, menor é a energia total do sistema e espera-se que resulte em um menor número de reinserções.

Esse Hamiltoniano foi utilizado como base para escrever o problema no *Solver* híbrido [29] da D-Wave, que demonstrou resultados superiores comparado a utilizar puramente o *Quantum Annealing*. Nesse sistema, as restrições do problema podem ser representadas utilizando igualdades, eliminando a obrigatoriedade das constantes de penalidade, além de se valer de vários módulos clássicos e quânticos que testam o problema simultaneamente, com uma otimização da busca no espaço de soluções feita pelo dispositivo de *Quantum Annealing*. Para se referir a essa implementação serão usados preferencialmente os termos de Modelo de *Quantum Annealing* ou Modelo Quântico, apesar de o termo mais

correto ser Modelo Híbrido, conforme utilizado anteriormente em [38]. Essa escolha é feita para não gerar confusões com modelos não abordados aqui, que usam *Simulated Annealing* como apoio para seus sistemas de recomendação.

6 Análise dos resultados

O primeiro teste realizado envolveu respeitar apenas a primeira regra, referente a priorizar as prateleiras dedicadas. Os dados de entrada e saída de itens para o teste e cálculo de correlações foram baseados em dados reais disponibilizados, porém as quantidades de prateleiras e posições foram tomadas arbitrariamente como 420×12 e 300×20 . Foram utilizados 70% dos dados para a geração dos parâmetros usados pelos algoritmos. O restante foi utilizado para simular o funcionamento dos sistemas, resultando em um fluxo de 104 dias para o teste.

Para a execução dos métodos clássicos, foram utilizados dois computadores: o primeiro, composto por um processador i5-10400 2.90GHz com 16GB de memória RAM, responsável pelo Sistema de Recomendação, e o segundo, composto por um processador i7-6700K 4.8GHz, também com 16GB de memória RAM, responsável pelo *Simulated Annealing*. O sistema de fluxo de retiradas e reinserções foi testado somente nos métodos que envolvem computação clássica, conforme já mencionado. Todas as comparações entre as execuções quânticas e clássicas serão medidas pelo nível de energia do estoque, seguindo a lógica de que quanto menor a energia, mais próximo do ideal segundo o Hamiltoniano implementado.

Para verificar se de fato haveriam ganhos com a implementação dos sistemas, foram criados dois testes de controle. O primeiro realiza a inserção dos itens de forma totalmente aleatória, respeitando a capacidade das prateleiras. O segundo método de controle implementa a mesma sequência de passos que o Sistema de Recomendação, porém gerando recomendações aleatórias (escolhendo uma prateleira aleatória que possibilite inserção) sempre que não houver possibilidade para prateleira dedicada. A intenção nesse último modelo era simular algo próximo à situação real da fábrica. Os resultados obtidos para todos os métodos clássicos podem ser visualizados na tabela 1.

Método	Nº Reinscrções (420×12)	Nº Reinscrções (300×20)
Aleatório	53.162 ± 244 reinscrções	74.798 ± 322 reinscrções
Aleatório com Regras	9.511 ± 266 reinscrções	7.175 ± 712 reinscrções
Sis. de Recomendação	8.129 reinscrções	6.258 reinscrções
Sim. Annealing (1 <i>run</i>)	8.235 ± 174 reinscrções	9.063 ± 266 reinscrções
Sim. Annealing (10 <i>runs</i>)	2.064 ± 164 reinscrções	1.624 ± 98 reinscrções
Sim. Annealing (100 <i>runs</i>)	2.194 ± 88 reinscrções	1.611 ± 179 reinscrções

Tabela 1 – Resultados do teste entre o *Simulated Annealing*, Sistema de Recomendação e métodos de controle para estoques de tamanhos 420×12 e 300×20 .

Como o *Simulated Annealing* é um método estocástico, executar mais de uma vez garante maior chance de encontrar estados de menor energia. De fato, executar mais de

uma vez garantiu configurações melhores para inserção dos itens, chegando a uma redução de 75% entre executar apenas 1 vez e executar 10 ou 100 vezes para o estoque 420×12 e de 82% para o estoque 300×20 . Apesar da redução, é observado que existe pouca diferença entre executar 10 ou 100 vezes, principalmente ao observar o intervalo de valores dos resultados. Nesse caso, optar por 10 execuções traz ainda um ganho de tempo, como pode ser observado nas tabelas 2 e 3.

Método	Tempo Médio - Inserção	Tempo Médio - Reinscrição
Aleatório	$(0,037 \pm 0,007)ms$	$(0,052 \pm 0,022)ms$
Aleatório com Regras	$(82,26 \pm 2,391)ms$	$(82,26 \pm 2,391)ms$
Sis. de Recomendação	$\approx 5,1 \cdot 10^{-3}ms$	$\approx 5,1 \cdot 10^{-3}ms$
Sim. Annealing (1 run)	$(5,4 \pm 0,5)ms$	$(9 \pm 0,7)ms$
Sim. Annealing (10 runs)	$(53 \pm 4)ms$	$(113 \pm 88)ms$
Sim. Annealing (100 runs)	$(496 \pm 3)ms$	$(500 \pm 60)ms$

Tabela 2 – Tempo médio gasto para realizar uma instrução de inserção e reinscrição no estoque 420×12 .

Método	Tempo Médio - Inserção	Tempo Médio - Reinscrição
Aleatório	$(0,036 \pm 0,007)ms$	$(0,058 \pm 0,031)ms$
Aleatório com Regras	$(12,21 \pm 0,865)ms$	$(12,21 \pm 0,865)ms$
Sis. de Recomendação	$\approx 5,9 \cdot 10^{-3}ms$	$\approx 5,9 \cdot 10^{-3}ms$
Sim. Annealing (1 run)	$(5,2 \pm 0,5)ms$	$(11 \pm 8)ms$
Sim. Annealing (10 runs)	$(50,1 \pm 0,3)ms$	$(113 \pm 91)ms$
Sim. Annealing (100 runs)	$(516 \pm 38)ms$	$(1053 \pm 920)ms$

Tabela 3 – Tempo médio gasto para realizar uma instrução de inserção e reinscrição no estoque 300×20 .

No quesito tempo, o Sistema de Recomendação leva a maior vantagem, sendo pelo menos 3 ordens de grandeza mais rápido que seus concorrentes. Essa redução faz ainda mais diferença ao lembrar que, em operações de retirada que geram reinscrições, é altamente provável que haja mais de um item a ser retirado. Ou seja, cada retirada tem um acréscimo de tempo proporcional à quantidade de reinscrições geradas. Utilizando o *Simulated Annealing* com 100 runs, o tempo de espera para a geração da ordem de organização do estoque pode facilmente passar de menos de um segundo para mais de cinco segundos, um tempo de resposta já considerado lento para este problema em questão.

Analisando a possibilidade de paralelização das tarefas para redução de tempo, ambos os métodos clássicos podem ser otimizados. O *Simulated Annealing* pode ter cada run distribuída em um núcleo (seja de um computador comum ou de um cluster), que é conveniente que a quantidade de runs seja estritamente menor que a quantidade de núcleos. Uma análise inicial verificou que ao paralelizar, o tempo por run aumenta consideravelmente, porém ainda pode ser conveniente por reduzir o tempo total. Mais estudos ainda são necessários para verificar a viabilidade de paralelização nos sistemas da fábrica.

Para o Sistema de Recomendação é possível implementar técnicas de paralelismo tanto na fase de geração dos parâmetros M quanto na busca pela melhor recomendação. O uso do paralelismo beneficiaria mais a fase de atualização dos parâmetros, que poderia ser realizada durante a operação do sistema sem gerar atrasos consideráveis para o usuário, em comparação com a geração das recomendações que já é considerada rápido o bastante.

Para uma comparação justa com o modelo usando *Quantum Annealing*, conforme mencionado anteriormente, os testes implementaram apenas as operações de inserção e tamanhos diferentes de estoque. Dado que o uso de 10 *runs* resultou no menor custo-benefício dentre os resultados do *Simulated Annealing*, foi definido esse modelo para a comparação. Ainda, é necessário definir um tempo máximo de *annealing* para a execução nos dispositivos da D-Wave. Foi definido então, para ambos os métodos envolvendo *annealing*, um tempo limite de 40 segundos. Os resultados podem ser vistos no gráfico da figura 7.

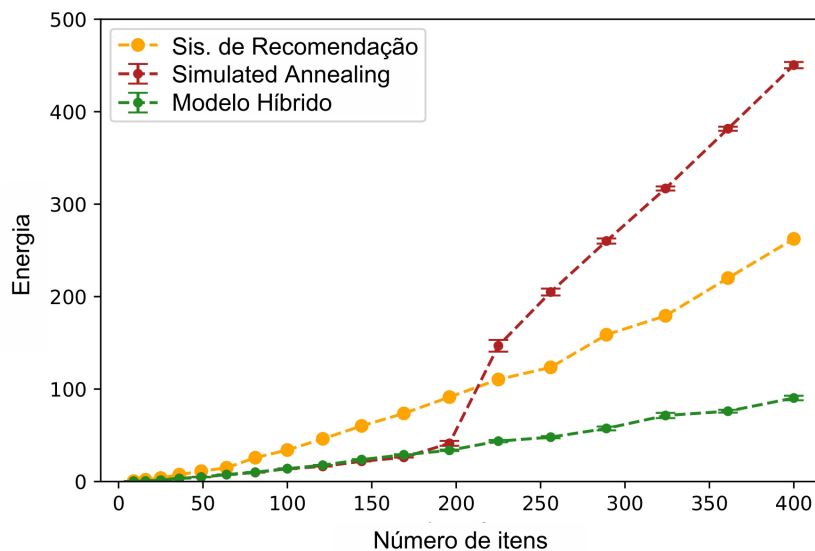


Figura 7 – Resultado do cálculo das energias do estoque para inserções de diferentes números de itens em diferentes configurações de estoque (número de prateleiras e número de posições em cada prateleira): 3×3 , 4×4 , \dots , 20×20 , usando: Sistema de Recomendação, *Simulated Annealing* e *Quantum Annealing* pelos *Solvers* da D-Wave (Modelo Híbrido). Fonte: retirado de [38].

Tanto o *Simulated Annealing* quanto o *Quantum Annealing* encontram os mesmos resultados para estoques quadrados que comportem até cerca de 200 itens, resultados esses melhores que aqueles encontrados pelo Sistema de Recomendação. Após esse valor o *Simulated Annealing* aponta para um grande crescimento nos valores de energia, enquanto os outros dois modelos seguem com um aumento mais suave. É esperado que aumentar o tempo de *annealing* para o *Simulated* gere resultados melhores, porém é importante observar que o Modelo Híbrido obtém melhores resultados gastando menos tempo de *annealing*. Os resultados apontam que o Modelo Quântico tem potencial de gerar melhores

soluções em menor tempo para estoques superiores a 20×20 , seguindo uma extrapolação dada pelo crescimento dos dados.

O artigo [37] apresenta um estudo mais aprofundado comparando as estratégias envolvendo o *Quantum* e o *Simulated Annealing* para essa primeira fase de testes. Também foi considerado como métrica a energia final do estoque, realizando apenas as inserções. Foram testados ajustes no método de *Simulated Annealing*, que levou a resultados iguais ou mais próximos do *Quantum Annealing* à medida que a dimensão de estoque diminuía. O tempo gasto para encontrar uma solução no *Simulated Annealing* também tendeu a ser maior. Também é comentado sobre a utilização em estoques maiores que o apresentado aqui. Sob análise, o *solver* CQM é capaz de lidar com a alocação de cerca de 1000 itens e configurações de estoques envolvendo até 6400 posições no total, a cada execução.

Na segunda fase de testes, dessa vez considerando que as prateleiras tem tamanhos diferentes e características que comportam apenas determinados tipos de SKUs e SKUIDs. Conforme mencionado, todas essas informações foram extraídas da base de dados da fábrica, dessa vez com informações mais detalhadas de onde foi possível extrair, inclusive, o número de reinserções reais durante o intervalo de testes. Os resultados obtidos podem ser visualizados no gráfico da figura 8.

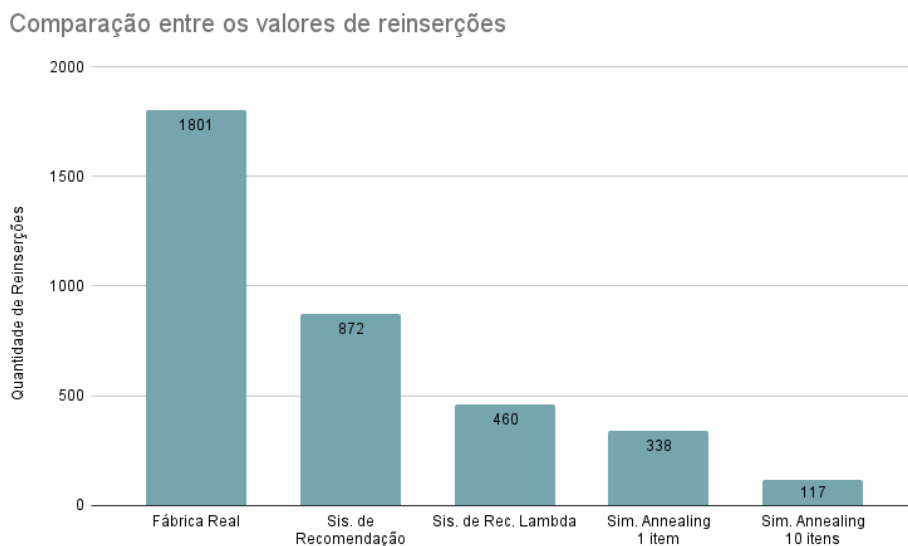


Figura 8 – Resultados obtidos para o número de reinserções comparando os testes realizados com os dados reais em um mesmo período, sendo aproximados os valores obtidos para o *Simulated Annealing*, devido ao caráter estocástico do método. Fonte: autoria própria.

Notavelmente, os métodos estudados geram uma redução considerável na quantidade de reinserções durante os processos. Para o Sistema de recomendações a redução é de 51,6%, sendo o tempo de recomendação muito próximo ao já observado ($5,5 \cdot 10^{-3}ms$). Para o *Simulated Annealing* a redução foi ainda maior, chegando a cerca de 88%. Observando

essa enorme redução, foi realizado um teste utilizando os parâmetros λ para a geração das recomendações, que fez com que a redução do Sistema de Recomendação passasse de 51,6% para 74,45%. Esse valor questiona a ideia inicial de a correlação $\{X = i, Y = j\} \neq \{X = j, Y = i\}$, para esse problema em específico.

6.1 Conclusão

Em resumo, o Sistema de Recomendação leva vantagem no tempo de geração de recomendações e apresentou uma redução considerável nas reinserções, principalmente ao ser ajustado para utilizar os parâmetros λ 's. Apesar de um pouco mais lento, mas ainda aplicável, o *Simulated Annealing* alcançou uma redução ainda maior, obtendo 88% menos reinserções que o método atual da fábrica. Ambos métodos tem potencial de aplicação prática e podem ser facilmente integrados como um módulo de um sistema de gerenciamento já existente.

Com relação à abordagem quântica, apesar do tamanho da instância apresentada ter sido menor que as configurações reais da fábrica, o estudo em [37] aponta que a capacidade do *solver* é mais que suficiente para comportar as configurações da fábrica real. A curva de energia com aumento suave aponta que o modelo tem potencial de oferecer soluções melhores se considerado o mesmo tempo gasto pelo *Simulated Annealing* não paralelizado. Porém, mesmo com a paralelização, estima-se que a qualidade dos resultados do *Quantum Annealing* continue menor, devido ao comportamento da curva de energia e a capacidade de encontrar melhores mínimos locais, conforme abordado em 3.2.1. Além disso, esse resultado pode apresentar melhoria no futuro, tanto em tempo quanto em otimização, com o desenvolvimento dos dispositivos tolerantes à falhas (FTQC).

7 Correspondência entre a Função de Correlação $g^{(2)}(\tau)$ e a Métrica *Lift* e Proposta de Aplicação

A partir das informações anteriores da seção 4.3 sobre o Algoritmo Apriori e a métrica *Lift* para Regras de Associação, encontrou-se uma correspondência com a função de correlação $g^{(2)}(\tau)$ utilizada na óptica quântica. Antes de entrar em mais detalhes, serão apresentados os fundamentos da óptica quântica na seção 7.1, onde também são apresentados os diferentes estados dos campos ópticos, seguido por um detalhamento sobre a função $g^{(2)}(\tau)$ na seção 7.2, para enfim aprofundar nessa correspondência e na sua proposta de aplicação para o desenvolvimento de um algoritmo de recomendação quântico na seção 7.3.

7.1 Fundamentos de Óptica Quântica

O eletromagnetismo clássico consegue lidar com a maioria dos problemas que envolve óptica, porém isso apenas acontece quando aspectos quânticos da luz não estão presentes e que influenciam os resultados das medidas, como por exemplo o comportamento onda-partícula da luz no experimento de dupla fenda [59, 95]. Para os demais casos, onde o algoritmo em fase de desenvolvimento está inserido, a teoria quântica é a escolha mais eficiente e precisa [59, 81]. Para iniciar os conceitos de óptica quântica necessários, o primeiro passo será a demonstração da quantização de um campo eletromagnético livre, segundo a quantização de Born-Heisenberg-Jordan [59, 98].

Partindo da descrição do eletromagnetismo clássico, introduzimos as equações de Maxwell no vácuo, que descrevem o campo elétrico \vec{E} e magnético \vec{B} :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{B} &= 0, & \nabla \cdot \vec{E} &= 0, \\ \nabla \times \vec{B} &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, & \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (7.1)$$

sendo c a velocidade da luz no vácuo. Respeitando essas mesmas equações, é possível escrever o campo elétrico e magnético em função do vetor potencial transversal \vec{A} :

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t), \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Utilizando as equações 7.1 e 7.2, e respeitando a propriedade de transversalidade do campo, $\nabla \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0$, podemos derivar uma equação de onda homogênea para esse

mesmo vetor potencial a partir das equações de Maxwell acima:

$$\nabla^2 \vec{A}(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A}(\vec{r}, t) = 0. \quad (7.3)$$

Para encontrar a forma de $\vec{A}(\vec{r}, t)$, será realizada uma expansão em série de Fourier. As condições de contorno são definidas a partir de uma caixa quadrada perfeitamente condutora, com arestas de tamanho L , onde um campo que obedece a equação de onda 7.3 é confinado. A expansão resulta em:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_0^{\frac{1}{2}} L^{\frac{3}{2}}} \sum_{\vec{k}} \sum_s \mathcal{A}_{\vec{k}_s}(t) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}}, \quad (7.4)$$

onde ϵ_0 é a constante dielétrica do vácuo, \vec{k}_s é o vetor de onda de componentes $k_s^{(m)} = \frac{2\pi n_m^{(s)}}{L}$ com $m = \{1, 2, 3\}$ e $n_m^{(s)} \in \mathbb{Z}$ e $s = 1, 2$ indica os possíveis graus de liberdade de polarização do respectivo modo. Para parametrizar corretamente a forma vetorial de $\vec{A}(\vec{r}, t)$, define-se uma base de vetores ortonormais $\{\vec{\epsilon}_1, \vec{\epsilon}_2\}$

$$\begin{aligned} \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^* \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}_{s'}} &= \delta_{ss'}, \\ \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^* \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}_{s'}} &= \frac{\vec{k}_s}{|\vec{k}_s|}, \end{aligned} \quad (7.5)$$

e as variáveis $\omega = c|\vec{k}_s|$ e $u_{\vec{k}_s}(t) = c_{\vec{k}_s} e^{-i\omega t}$, a partir dos quais encontra-se a expressão vetorial para $\vec{A}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_s \left[u_{\vec{k}_s}(t) \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s} e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} + u_{\vec{k}_s}^*(t) \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^* e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right]. \quad (7.6)$$

Substituindo $\vec{A}(\vec{r}, t)$ segundo a equação 7.6 nas equações de campo elétrico e magnético 7.2, obtêm-se as equações de campo:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_s i\omega \left[u_{\vec{k}_s}(t) \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s} e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} - u_{\vec{k}_s}^*(t) \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^* e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right], \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \frac{i}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}} \sum_{\vec{k}} \sum_s i\omega \left[u_{\vec{k}_s}(t) (\vec{k}_s \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} - u_{\vec{k}_s}^*(t) (\vec{k}_s \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^*) e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right], \end{aligned} \quad (7.7)$$

onde $e^{\pm i\vec{k}_s \cdot \vec{r}}$ representa a propagação do campo e $\vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}$ é transverso à propagação. Baseando-se nessa equação, é possível descrever a energia do campo a partir da Hamiltoniana:

$$H = \frac{1}{2} \int_{L^3} \left[\epsilon_0 E^2(\vec{r}, t) + \frac{B^2(\vec{r}, t)}{\mu_0} \right] dr^3 = 2 \sum_{\vec{k}_s} \sum_s \omega^2 |u_{\vec{k}_s}(t)|^2. \quad (7.8)$$

A Hamiltoniana integrada sobre a densidade local de energia e a expressão final representa a energia como uma soma sobre todos os modos do campo. Adentrando mais no formalismo

Hamiltoniano, é conveniente reescrever essa equação em função de variáveis canônicas, nesse caso dadas por $q_{\vec{k}_s}(t)$ e $p_{\vec{k}_s}(t)$:

$$\begin{aligned} q_{\vec{k}_s}(t) &= u_{\vec{k}_s}(t) + u_{\vec{k}_s}^*(t), \\ p_{\vec{k}_s}(t) &= -i\omega[u_{\vec{k}_s}(t) - u_{\vec{k}_s}^*(t)], \\ \frac{\partial}{\partial t} q_{\vec{k}_s}(t) &= p_{\vec{k}_s}(t), \\ \frac{\partial}{\partial t} p_{\vec{k}_s}(t) &= -\omega^2 q_{\vec{k}_s}(t). \end{aligned} \quad (7.9)$$

Reescrevendo a Hamiltoniana, obtemos:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_s} \sum_s \left[p_{\vec{k}_s}^2(t) + \omega^2 q_{\vec{k}_s}^2(t) \right], \quad (7.10)$$

com as equações de movimento:

$$\frac{\partial H}{\partial p_{\vec{k}_s}} = \frac{\partial q_{\vec{k}_s}}{\partial t}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_{\vec{k}_s}} = -\frac{\partial p_{\vec{k}_s}}{\partial t}. \quad (7.11)$$

A expressão da Hamiltoniana 7.10 é análoga à soma de Hamiltonianas de osciladores harmônicos independentes com massa unitária, onde o termo $p_{\vec{k}_s}^2(t)$ é análogo à velocidade de uma partícula e o termo $q_{\vec{k}_s}^2(t)$ à posição. Nesse caso, não estamos trabalhando com posição e velocidade, mas sim com um campo com amplitudes p e q associadas.

Ao fazer a quantização canônica, p e q se tornam os operadores de momento e posição, respectivamente, e H também se torna um operador. Dito isso, definimos as comutações desses operadores:

$$\begin{aligned} [q_{\vec{k}_s}(t), p_{\vec{k}'_s}(t)] &= i\hbar \delta_{\vec{k}\vec{k}'}^3 \delta_{ss'}, \\ [q_{\vec{k}_s}(t), q_{\vec{k}'_s}(t)] &= 0, \\ [p_{\vec{k}_s}(t), p_{\vec{k}'_s}(t)] &= 0. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Observa-se que, como o resultado dos dois últimos comutadores é igual a 0, isso permite medidas independentes do mesmo operador em coordenadas distintas. Usando os operadores p e q podemos escrever o campo elétrico e magnético como:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \frac{i}{2\epsilon_0^{\frac{1}{2}} L^{\frac{3}{2}}} \sum_k \sum_s \left\{ \left[\omega q_{\vec{k}_s}(t) + i p_{\vec{k}_s}(t) \right] \epsilon_{\vec{k}_s} e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right. \\ &\quad \left. - \left[\omega q_{\vec{k}_s}(t) + i p_{\vec{k}_s}(t) \right]^* \epsilon_{\vec{k}_s}^* e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right\}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned} \vec{B}(\vec{r}, t) &= \frac{i}{2\epsilon_0^{\frac{1}{2}} L^{\frac{3}{2}}} \sum_k \sum_s \left\{ \left[q_{\vec{k}_s}(t) + \frac{i}{\omega} p_{\vec{k}_s}(t) \right] k \times \epsilon_{\vec{k}_s} e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right. \\ &\quad \left. - \left[q_{\vec{k}_s}(t) + \frac{i}{\omega} p_{\vec{k}_s}(t) \right]^* k \times \epsilon_{\vec{k}_s}^* e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}} \right\}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Refinando a quantização do campo, são introduzidos os operadores de aniquilação a e criação a^\dagger , tal que $a_{\vec{k}_s}(t) = a_{\vec{k}_s} e^{-i\omega t}$ e $a_{\vec{k}_s}^\dagger(t) = a_{\vec{k}_s}^\dagger e^{i\omega t}$, também conhecidos como operadores escada. Esses operadores atuam destruindo ou criando fótons na base de estados de Fock, levando o sistema para os estados de energia adjacentes, na forma:

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}_s} |n_{\vec{k}_s}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}_s}} |n_{\vec{k}_s} - 1\rangle, \\ a_{\vec{k}_s}^\dagger |n_{\vec{k}_s}\rangle &= \sqrt{n_{\vec{k}_s} + 1} |n_{\vec{k}_s} + 1\rangle, \end{aligned} \quad (7.15)$$

sendo $n_{\vec{k}_s}$ o número de excitações (fótons) no modo \vec{k}_s , associado ao respectivo estado de Fock, que será apresentado adiante. Para não gerar inconsistências, ao aplicar o operador de aniquilação no estado fundamental, o resultado sempre será 0 ($a_{\vec{k}_s} |0\rangle = 0$), pois não existe estado de energia inferior. Os operadores a e a^\dagger satisfazem as relações de comutação:

$$\begin{aligned} [a_{\vec{k}_s}(t), a_{\vec{k}'_{s'}}^\dagger(t)] &= \delta_{kk'}^3 \delta_{ss'}^3, \\ [a_{\vec{k}_s}(t), a_{\vec{k}'_{s'}}(t)] &= 0, \\ [a_{\vec{k}_s}^\dagger(t), a_{\vec{k}'_{s'}}^\dagger(t)] &= 0. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Os operadores p e q são reescritos usando os operadores a e a^\dagger na forma:

$$\begin{aligned} p_{\vec{k}_s}(t) &= -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} [a_{\vec{k}_s}(t) - a_{\vec{k}_s}^\dagger(t)], \\ q_{\vec{k}_s}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} [a_{\vec{k}_s}(t) + a_{\vec{k}_s}^\dagger(t)]. \end{aligned} \quad (7.17)$$

É importante ressaltar que p e q são operadores hermitianos, diferentemente de a e a^\dagger que não são hermitianos. Por meio dessa relação, pode-se reescrever o hamiltoniano da eq. 7.10 em função de a e a^\dagger

$$H = \sum_k \sum_s \hbar\omega \left[a_{\vec{k}_s}^\dagger(t) a_{\vec{k}_s}(t) + \frac{1}{2} \right]. \quad (7.18)$$

O mesmo também pode ser feito com o campo elétrico e magnético, transformando-os em operadores escritos em função dos operadores de aniquilação e destruição:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \sum_k \sum_s \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0}} \left[ia_{\vec{k}_s} \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s} e^{i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega t)} - ia_{\vec{k}_s}^\dagger \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^* e^{-i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega t)} \right], \\ B &= \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \sum_k \sum_s \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega\epsilon_0}} \left[ia_{\vec{k}_s} (\vec{k}_s \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}) e^{i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega t)} - ia_{\vec{k}_s}^\dagger (\vec{k}_s \times \vec{\epsilon}_{\vec{k}_s}^*) e^{-i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega t)} \right], \end{aligned} \quad (7.19)$$

obtendo, por fim, a quantização dos campos elétrico e magnético.

O Hamiltoniano em 7.18 representa a soma dos operadores número de fótons em cada modo, multiplicado pela energia do fóton em cada modo, somado a flutuação do

vácuo $\frac{1}{2}\hbar\omega$ em cada modo [95]. Os autovalores desse Hamiltoniano são $\hbar\omega(n_{k_s} + \frac{1}{2})$, com $n_{k_s} = (0, 1, 2, \dots)$, e seus autoestados $|n_{k_s}\rangle$, chamados de estados de número ou estados de Fock, são os autoestados do operador de número $n = a^\dagger a$ [42, 95]. O conjunto de estados $\{|n_{k_s}\rangle\}$ são ortonormais entre si e completos ($\sum_{n_{k_s}=0}^{\infty} |n_{k_s}\rangle \langle n_{k_s}| = 1$), formando uma base no espaço de Hilbert denominada base de Fock, muito usada na óptica quântica, principalmente em problemas envolvendo laser. Estados de Fock são caracterizados por serem estados com um número bem definido de fótons [20].

7.1.1 Estados Térmicos

Voltando na história da Mecânica Quântica, a partir das pesquisas de Planck em 1900 sobre a distribuição espectral da luz térmica emitida por corpos negros, foram descobertos os princípios quânticos da luz [95]. Um corpo negro, estudado por Planck, pode ser modelado como uma cavidade com radiação em equilíbrio térmico com as paredes da cavidade. Nesse cenário, a radiação está acoplada a um banho térmico, porém considerando que esse acoplamento seja fraco, o campo pode ser tratado como um sistema isolado [42].

Cerca de 50 anos mais tarde, Hanbury-Brown e Twiss desenvolveram um experimento para medir a correlação por meio da intensidade, a partir do qual foram descobertos efeitos quânticos da luz que não eram explicados pela função de correlação clássica [42, 95]. Anos mais tarde, com o aprimoramento das técnicas e equipamentos, passou a ser possível distinguir fontes térmicas usando as estatísticas de contagem de fótons [95].

A partir dessa contextualização, estados térmicos são gerados pela emissão de fótons devido à agitação térmica dos átomos, como por exemplo, no sistema de radiação de corpo negro citado anteriormente [20, 42]. Uma fonte de luz térmica é também uma fonte incoerente. É possível gerar estados “pseudo”-térmicos, a partir de uma mistura de estados de Fock, conforme exposto em [20].

O número médio de fótons de um campo térmico é calculado como [42]:

$$\langle n \rangle = Tr[n\rho_{Th}] = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} n \exp\left(\frac{-\hbar\omega n}{k_B T}\right), \quad (7.20)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann, Z a função partição e T a temperatura. A distribuição da contagem de fótons:

$$P_n(T) = \frac{(\alpha\tau)^n}{I_0 n!} \int_0^\infty I^n \exp\left[-I\left(\alpha\tau + \frac{1}{I_0}\right)\right] dI = \frac{1}{1 + \langle n \rangle} \left(\frac{\langle n \rangle}{1 + \langle n \rangle}\right)^n, \quad (7.21)$$

sendo τ um intervalo de tempo de contagem e $\langle n \rangle = \alpha\tau I_0$, com I_0 a intensidade [95]. Mais detalhes sobre as estatísticas e propriedades serão acrescentados na seção 7.2, ao analisar as correlações dos estados.

7.1.2 Estados Coerentes

Estados coerentes $|\alpha\rangle$ são os estados quânticos mais próximos dos estados clássicos [42]. Um exemplo é um laser altamente estabilizado operado bem acima do limiar [95]. Estados coerentes são autoestados do operador de aniquilação a [42, 81, 95]:

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

Expandindo o estado coerente $|\alpha\rangle$ em função dos estados de Fock na forma $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$, é possível defini-los como

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (7.22)$$

Diferentemente dos estados de número, os estados coerentes formam um conjunto super-completo, ou seja, seus estados não são ortogonais. Dessa forma, qualquer estado coerente pode ser escrito em função de um conjunto de outros $\{|\alpha\rangle\}$ [81].

O valor esperado do operador n é dado por $\langle n \rangle = \langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2$ [42, 81]. Ao realizar uma medida em $|\alpha\rangle$, a probabilidade de encontrar n fótons é dada pela distribuição de Poisson [81]:

$$p(n) = \langle n | \alpha \rangle \langle \alpha | n \rangle = \frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2}}{n!}. \quad (7.23)$$

Ainda, o valor esperado do campo elétrico em estados coerentes tem o mesmo formato clássico. Dado o operador de campo elétrico:

$$E_x(\vec{r}, t) = i \left(\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} [a e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}) - \omega t} - a^\dagger e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}) - \omega t}]. \quad (7.24)$$

Ao calcular o valor esperado $\langle E_x \rangle = \langle \alpha | E_x | \alpha \rangle$, com α escrito na sua forma polar $|\alpha|e^{i\theta}$, é obtido

$$\langle \alpha | E_x(\vec{r}, t) | \alpha \rangle = 2|\alpha| \left(\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \text{sen}(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} - \theta), \quad (7.25)$$

onde já pode ser percebida a similaridade com a equação clássica de um campo sinusoidal. Sendo

$$\langle \alpha | E_x^2(\vec{r}, t) | \alpha \rangle = \frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V} [1 + 4|\alpha|^2 \text{sen}^2(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} - \theta)], \quad (7.26)$$

o valor das flutuações no campo elétrico do estado coerente é dado por:

$$\Delta E_x \equiv \langle (\Delta E_x)^2 \rangle^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{\hbar\omega}{2\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (7.27)$$

que é o mesma flutuação do vácuo [42]. Assim como a flutuação é mínima para o campo elétrico, o produto das incertezas dos operadores também é o valor mínimo, por exemplo

$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}$, assim como para o vácuo [42, 81]. Por esse motivo, estes são os estados do campo que apresentam o maior grau de afinidade com o comportamento da radiação eletromagnética clássica emitida por distribuições oscilantes de corrente [20].

A evolução temporal de um estado coerente ainda mantém todas as características de um estado coerente [42]. Supondo um campo livre de um modo descrito pelo Hamiltoniano $H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. A evolução temporal de um estado coerente em um campo livre de interações é descrita por:

$$|a, t\rangle \equiv \exp\left(-i\frac{Ht}{\hbar}\right) |\alpha\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} e^{-i\omega t n} |\alpha\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle. \quad (7.28)$$

Por último, outra forma de gerar estados coerentes é através da aplicação de um operador de deslocamento D , também chamado de *Displacement*, no estado de vácuo $D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ [81, 95]. Ou seja, o estado coerente também pode ser definido como o estado após deslocamento do estado fundamental do Hamiltoniano do oscilador harmônico. O operador de deslocamento pode ser escrito como $D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)$, sendo α um número complexo referente ao estado coerente gerado.

7.1.3 Estados Comprimidos

Estados comprimidos, ou do inglês *squeezed states*, são uma classe de estados nos quais, em uma das quadraturas, há menos flutuações do que em um estado coerente. Porém, como consequência, a quadratura canonicamente conjugada terá mais flutuação, de forma que o princípio da incerteza não seja violado [81, 95].

Dados os operadores de amplitude X_1 e X_2 , tais que:

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{1}{2}(a + a^\dagger), \\ X_2 &= \frac{1}{2i}(a - a^\dagger), \end{aligned} \quad (7.29)$$

e satisfazem $[X_1, X_2] = \frac{i}{2}$, são análogos sem dimensionalidade dos operadores de posição e momento:

$$\begin{aligned} q &= \frac{\sqrt{2\hbar/m\omega}}{2}(a + a^\dagger), \\ p &= -i\frac{\sqrt{2\hbar m\omega}}{2}(a - a^\dagger). \end{aligned} \quad (7.30)$$

Substituindo os operadores q e p pelos operadores X_1 e X_2 no operador de campo elétrico quantizado obtêm-se

$$E(t) = 2\varepsilon_0 \text{sen}(kz)[X_1 \cos(\omega t) + X_2 \text{sen}(\omega t)], \quad (7.31)$$

onde é possível notar que os operadores X_1 e X_2 são associados a amplitudes de campo que oscilam com uma diferença de fase de $\frac{\pi}{2}$, e portanto estão em quadratura [42, 81]. Determina-se que existe *squeezing* na quadratura se:

$$\langle(\Delta X_1)^2\rangle < \frac{1}{4} \text{ ou } \langle(\Delta X_2)^2\rangle < \frac{1}{4}. \tag{7.32}$$

Lembrando que apenas um dos valores precisa ser satisfeito, pois caso ambos fossem satisfeitos violaria o princípio de incerteza. Se $\langle(\Delta X_1)^2\rangle = \langle(\Delta X_2)^2\rangle = \frac{1}{4}$, então é um estado coerente [42]. Visualmente, é possível representar estados coerentes e comprimidos utilizando funções de Wigner. As funções de Wigner de um estado coerente $\alpha = 0$ e de um estado comprimido podem ser observados na Figura 9.

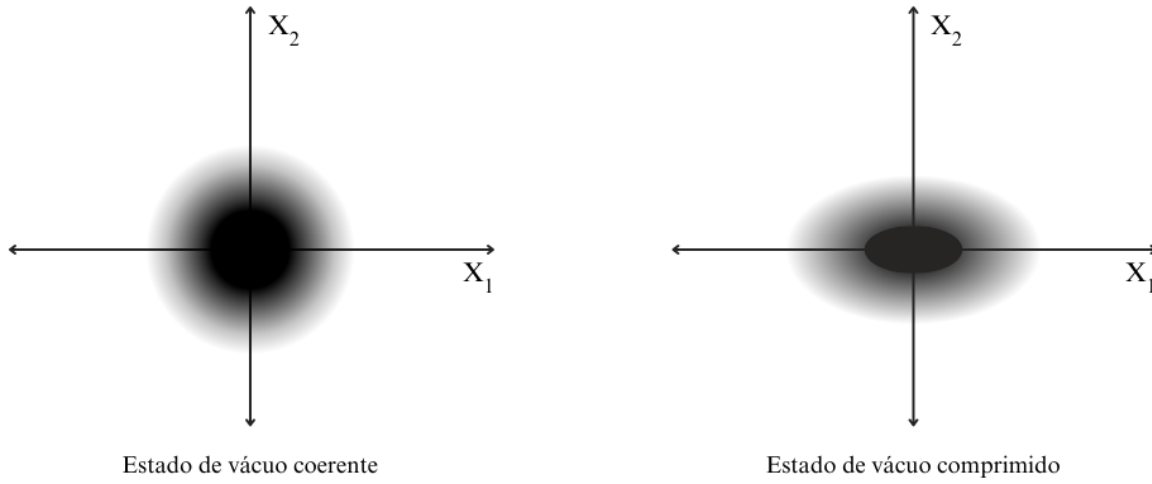


Figura 9 – Comparação entre um estado de vácuo coerente (à esquerda) e um estado de vácuo comprimido (à direita). É possível observar que enquanto o estado coerente tem as amplitudes iguais em cada quadratura, o estado comprimido é reduzido em uma quadratura (X_2) enquanto a outra quadratura (X_1) é ampliada. Fonte: autoria própria.

A probabilidade de se medir n fótons em um estado comprimido é dada por:

$$p(n) = \frac{1}{(n! \cosh(r))} \left[\frac{\tanh(r)}{2} \right]^n \exp \left[-|\alpha|^2 - \frac{\tanh(r)}{2} ((\alpha^*)^2 e^{i\theta} + \alpha^2 e^{-i\theta}) \right] \left| H_n \left(\frac{\alpha + \alpha^* e^{i\theta} \tanh(r)}{\sqrt{2e^{i\theta} \tanh(r)}} \right) \right|^2, \tag{7.33}$$

onde r e θ são o parâmetro e o ângulo de compressão. H_n são os polinômios de Hermite [42]. O formato do gráfico da função acima será mais largo ou estreito que uma distribuição de Poisson, dependendo da quadratura que é comprimida [42, 95]. Outro detalhe interessante é a presença de oscilações que aparecem para valores altos de r , que demonstram interferências no espaço de fase [95].

O operador de *squeezing* é dado por:

$$S(\xi) = \exp \left(\frac{1}{2} (\xi^* a^2 - \xi a^{\dagger 2}) \right), \tag{7.34}$$

no qual $\xi = re^{i\theta}$, sendo r o parâmetro de *squeezing*, pertencente ao intervalo $0 \leq r < \infty$, e θ tendo valor entre $0 \leq \theta \leq 2\pi$ [42, 95]. O parâmetro r é responsável pelo grau de amplificação ou compressão das componentes da amplitude.

Um estado de vácuo comprimido (estado coerente comprimido com $\alpha = 0$) pode então ser gerado através da aplicação do operador de *squeezing* no estado de vácuo [95].

7.2 Funções Quânticas de Correlação

Determinar as propriedades quânticas da luz requer medir as estatísticas do campo, mais precisamente pela contagem de fótons. A contagem requer um detector, por exemplo, um átomo de dimensão pequena comparado ao comprimento de onda da luz analisado, que se ioniza ao absorver um fóton emitido pelo campo, realizando assim uma detecção. Por meio da contagem de fótons, é possível descrever funções que medem a correlação entre as detecções e assim obter informações sobre o estado (térmico, coerente,...) e os seus efeitos quânticos presentes.

Separando o operador de campo elétrico (aqui sem a notação vetorial, por simplicidade) em $E(x) = E^{(+)}(x) + E^{(-)}(x)$, sendo $x = (\vec{r}, t)$ e ρ o operador densidade, pode-se definir a função quântica de correlação de primeira ordem como [42, 81]:

$$G^{(1)}(x_1, x_2) = Tr[\rho E^{(-)}(x_1)E^{(+)}(x_2)]. \quad (7.35)$$

Essa função mede a correlação da luz que chega em x_1 e x_2 , funcionando como uma medida de interferência [42]. Ela pode ser escrita na sua forma normalizada [42, 95]:

$$g^{(1)}(x_1, x_2) = \frac{G^{(1)}(x_1, x_2)}{\sqrt{G^{(1)}(x_1, x_1)G^{(1)}(x_2, x_2)}}, \quad (7.36)$$

cujos resultados indicam: [42]

$$\begin{cases} \text{se } g^{(1)}(x_1, x_2) = 1, \text{ resulta em coerência completa;} \\ \text{se } 0 < g^{(1)}(x_1, x_2) < 1, \text{ resulta em coerência parcial;} \\ \text{se } g^{(1)}(x_1, x_2) = 0, \text{ não há coerência.} \end{cases} \quad (7.37)$$

Os pontos (x_1, x_2) onde $g^{(1)}(x_1, x_2) = 1$ indicam que há maior visibilidade do padrão de franjas da interferência. Apesar dessa função conseguir medir o comprimento de coerência da luz ou determinar seu grau de monocromaticidade, ela não é capaz de fornecer informações sobre as propriedades estatísticas da luz [42, 81]. Assim, não é possível distinguir um feixe de laser de uma luz gerada por uma fonte térmica, por exemplo. Para mais informações, recorre-se à função de correlação de segunda ordem:

$$G^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1) = Tr[\rho E^{(-)}(x_1)E^{(-)}(x_2)E^{(+)}(x_2)E^{(+)}(x_1)] \quad (7.38)$$

e a sua forma normalizada

$$g^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1) = \frac{G^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1)}{G^{(1)}(x_1, x_1)G^{(1)}(x_2, x_2)}. \quad (7.39)$$

Essa função é interpretada como a probabilidade condicional de detectar um fóton em r_1 no tempo t_1 e outro em r_2 no tempo t_2 . Em uma posição fixa, a função $g^{(2)}$ depende apenas da diferença de tempo $\tau = t_2 - t_1$. Substituindo os operadores de campo elétrico pelos operadores a e a^\dagger , a função de segunda ordem é escrita como [81]:

$$g^{(2)}(\tau) = \frac{\langle a^\dagger(t)a^\dagger(t+\tau)a(t+\tau)a(t) \rangle}{\langle a^\dagger a \rangle^2}. \quad (7.40)$$

Dessa forma, em um campo de um modo sem atraso nas detecções, obtém-se [81]:

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle}{\langle a^\dagger a \rangle^2}. \quad (7.41)$$

Para campos estatisticamente estacionários, tanto luz coerente quanto luz térmica satisfazem $g^{(2)}(0) \geq g^{(2)}(\tau)$ [81]. Pode-se definir um campo como coerente em segunda ordem se $|g^{(1)}(x_1, x_2)| = 1$ e $g^{(2)}(x_1, x_2; x_2, x_1) = 1$ [42]. Em estados multimodos coerentes, também vale a igualdade $g^{(2)}(\tau) = 1$, que significa que os fótons chegam aleatoriamente espaçados, seguindo uma distribuição poissoniana [42, 81].

A distribuição pode mudar para outras configurações de campo. Aqueles onde $g^{(2)}(0) > 1$, seguem uma distribuição super-poissoniana, enquanto $g^{(2)}(0) < 1$ são sub-poissonianos [81]. Para acontecer uma distribuição sub-poissoniana, pode ser necessário que elementos do campo tenham probabilidade negativa, o que ocasiona o efeito de *photon antibunching* [95], explicado a seguir. Apesar de essas duas características serem relacionadas, é importante manter em mente que são fenômenos distintos.

Tomando τ_c como o tempo de coerência da luz, quando o campo satisfaz $g^{(2)}(\tau) < g^{(2)}(0)$ para $\tau < \tau_c$, os fótons tendem a ser detectados “agrupados”. Esse efeito é chamado de *photon bunching* [42, 81]. Já nos casos onde $g^{(2)}(\tau) > g^{(2)}(0)$, os fótons tentem a chegar em intervalos uniformes, o que é chamado de *photon antibunching*. Nesse caso, a probabilidade de detectar fótons no intervalo τ é menor que em um estado coerente [42, 81]. Porém, como $g^{(2)}(\tau) \rightarrow 1$ em uma escala de tempo suficientemente longa, um campo sub-poissoniano ($g^{(2)}(0) < 1$) vai sempre exibir *antibunching* em alguma escala. [95]. Na figura 10 a seguir, é demonstrada um esquema com a comparação dos intervalos de detecção de *photon bunching* e *antibunching* com uma luz coerente.

Um campo em um estado térmico de um modo resulta em $g^{(2)}(\tau) = 2$, o que significa alta probabilidade de detectar fótons em coincidência [42]. Também marca a característica de uma distribuição super-poissoniana. Já para um estado térmico multimodo, é encontrado $g^{(2)}(\tau) = 1 + |g^{(1)}(\tau)|^2$, sendo $1 \leq g^{(2)}(\tau) \leq 2$ [42]. Em particular, fontes de luz térmicas costumam exibir o efeito de *photon bunching*. [42].

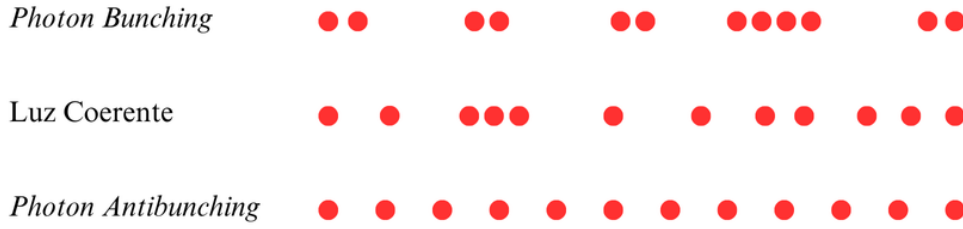


Figura 10 – Representação do comportamento dos fótons de acordo com a propriedade do campo. Fonte: autoria própria.

Por último, é importante ressaltar que funções de correlação de ordens superiores também são capazes de distinguir a natureza da luz, bem como os seus efeitos quânticos. A partir das funções para $G^{(1)}$, $g^{(1)}$, $G^{(2)}$ e $g^{(2)}$, é possível generalizar para a n -ésima ordem de correlação como [42]:

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n; x_n, \dots, x_1) = \text{Tr}[\rho E^{(-)}(x_1) \dots E^{(-)}(x_n) E^{(+)}(x_n) \dots E^{(+)}(x_1)],$$

$$g^{(n)}(x_1, \dots, x_n; x_n, \dots, x_1) = \frac{G^{(n)}(x_1, \dots, x_n; x_n, \dots, x_1)}{G^{(1)}(x_1, x_1) \dots G^{(1)}(x_n, x_n)}. \quad (7.42)$$

7.3 Análise e Aplicação da Correspondência

Conforme apresentadas as propriedades do campo, é possível por meio da função $g^{(2)}(\tau)$ encontrar correlações entre os fótons, incluindo a possibilidade de serem detectados “agrupados” ou espaçados. Retomando a função $g^{(2)}$ de maneira resumida:

$$\begin{cases} g^{(2)}(\tau) \leq g^{(2)}(0) : \text{fóton bunching;} \\ g^{(2)}(0) = 1 : \text{estado coerente;} \\ g^{(2)}(\tau) \geq g^{(2)}(0) : \text{fóton antibunching.} \end{cases} \quad (7.43)$$

Ou seja, fazendo uma analogia entre o espaçamento dos fótons com a possibilidade de correlação entre o conjunto (X, Y) dado pela medida de *Lift*:

$$\begin{cases} \text{se } \textit{Lift}(X, Y) > 1: \text{ existe uma correlação positiva entre os itens,} \\ \text{se } \textit{Lift}(X, Y) = 1: \text{ a correlação é independente,} \\ \text{se } \textit{Lift}(X, Y) < 1: \text{ existe uma correlação negativa entre os itens,} \end{cases} \quad (7.44)$$

é possível notar uma correspondência no comportamento de ambas as funções. A partir disso, iniciou-se um estudo para verificar a viabilidade da implementação de um algoritmo de recomendações a partir do uso de propriedades quânticas da luz. Esse estudo ainda está em progresso, mas um contexto sobre a proposta é oferecido a seguir.

Primeiramente, implementar o cálculo da correlação não é uma tarefa complicada. Além disso, para implementar experimentalmente, conforme o experimento de Hanbury-Brown e Twiss, necessita-se principalmente de um *beam-splitter*, já presente em

computadores fotônicos, e do contador de fótons. Devido à sua simplicidade, espera-se que o algoritmo tenha um custo temporal competitivo com as demais propostas quânticas.

Suponhamos inicialmente um sistema de dois qubits $|\psi\rangle = |q_1, q_2\rangle$ representando uma base de dados de dois itens. Relacionando a medida de 0 a ausência do item na regra de associação e 1 a sua presença, e dada uma superposição dos estados $|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$ representando todas as combinações possíveis. É conveniente definir as informações clássicas nas variáveis de probabilidade do estado, como número de vezes que o conjunto aparece na base de dados ou outra métrica como o *suporte*. Os detalhes sobre codificação de informação clássica em estados quânticos podem ser encontrados em [80]. O cálculo da função de correlação para esse caso é:

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_1 a_2 \rangle}{\langle a_1^\dagger a_1 \rangle \langle a_2^\dagger a_2 \rangle} = \frac{|\delta|^2}{(|\gamma|^2 + |\delta|^2)(|\beta|^2 + |\delta|^2)}. \quad (7.45)$$

Já para um estado de três qubits na superposição: $\alpha_0|0, 0, 0\rangle + \alpha_1|00, 1\rangle + \alpha_2|010\rangle + \alpha_3|011\rangle + \alpha_4|100\rangle + \alpha_5|101\rangle + \alpha_6|110\rangle + \alpha_7|111\rangle$, com $\sum_i \alpha_i = 1$, onde cada α_i significa a medida da base de dados, temos

$$g^{(2)}(0) = \frac{\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3^\dagger a_1 a_2 a_3 \rangle}{\langle a_1^\dagger a_1 \rangle \langle a_2^\dagger a_2 \rangle \langle a_3^\dagger a_3 \rangle} \quad (7.46)$$

$$g^{(2)}(0) = \frac{|\alpha_7|^2}{(|\alpha_4|^2 + |\alpha_5|^2 + |\alpha_6|^2 + |\alpha_7|^2)(|\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2 + |\alpha_6|^2 + |\alpha_7|^2)(|\alpha_1|^2 + |\alpha_3|^2 + |\alpha_5|^2 + |\alpha_7|^2)} \quad (7.47)$$

Considerar os valores de α_i da mesma forma que é utilizado no algoritmo Apriori pode inviabilizar a geração de recomendações. Supondo a transação $[i_1 = 1, i_2 = 0, i_3 = 1]$, esta contribuiria para a amplitude dos estados $|100\rangle$, $|001\rangle$ e $|101\rangle$, assim como no Apriori. Nesse contexto, os estados com menos itens representados terão mais incrementos em seu valor, de forma que quanto mais itens tiver o conjunto que o estado representa, menor o valor de $|\alpha_i|^2$. Assim, $g^{(2)}(0)$ sempre resultaria em um valor inferior a 1, levando sempre a uma distribuição sub-poissoniana. Conforme mencionado anteriormente, um campo sub-poissoniano apresenta o efeito de *antibunching* em alguma escala. A contribuição desse efeito ainda está sob análise para verificar o grau de comprometimento do problema.

Uma solução seria considerar a transcrição do banco de dados para as amplitudes de forma direta, de forma que a transação $[i_1 = 1, i_2 = 0, i_3 = 1]$ contribua apenas para o estado $|101\rangle$. Nesse caso, conjuntos maiores continuariam com a tendência de terem valores menores, porém a flexibilidade para os valores aumentam e isso pode diminuir a presença indevida de *antibunching*. Outra possibilidade é considerar a programação da informação em estados do tipo $\alpha|0^{\otimes n}\rangle + \beta|1^{\otimes n}\rangle$, gerando amostras de cada conjunto e comparando seus valores para gerar a recomendação.

Essas observações foram feitas considerando que os dados são clássicos, porém existe a possibilidade de aplicação desse algoritmo sobre dados quânticos. Para estes,

não é comprovado que a mesma lógica de valores que o algoritmo Apriori apresenta seja válida. Também é possível a aplicação como gerador de parâmetros para outros algoritmos quânticos, como o que foi feito nessa pesquisa para o *Quantum Annealing*. Gerar os parâmetros diretamente no computador quântico pode diminuir o custo na tradução dos dados entre os paradigmas clássico e quântico, além de evitar interferência no sistema com a operação de medida. Isso também possibilita que haja a atualização dos valores, caso necessário, ao executar novamente o cálculo da correlação, mesmo enquanto o outro algoritmo quântico está sendo processado.

8 Conclusão

O problema abordado, chamado de problema de gerenciamento de estoques, se baseia em otimizar a alocação de itens em uma determinada configuração de armazenamento, nesse caso em específico de forma que respeite a ordenação FIFO e minimize a ocorrência de realocação de itens. Para esse objetivo foram propostos três estratégias diferentes para a resolução do problema de gerenciamento de estoque, sendo uma delas necessária para a geração de parâmetros das outras duas. Para o desenvolvimento dos métodos, foram estudados tópicos de computação quântica, em especial computação adiabática e quantum annealing, além de estratégias de mineração de dados para algoritmos de recomendação. Surgiram então os algoritmos denominados como *Quantum Annealing*, *Simulated Annealing* e Sistema de Recomendação, sendo esse último responsável também por gerar os parâmetros necessários para o Hamiltoniano executado nos outros dois.

O Sistema de Recomendação obteve a dianteira em relação ao tempo gasto para geração de recomendações e apresentou uma redução considerável nas reinsertões, principalmente ao ser ajustado para utilizar os parâmetros λ 's. Porém, a superioridade em relação às reduções de reinsertão ficou com o *Simulated Annealing*, que obteve 88% menos reinsertões que o método atual da fábrica, apesar de um pouco mais lento. Ambos os métodos têm potencial de aplicação prática e podem ser facilmente integrados como um módulo para o sistema de gerenciamento já existente na empresa.

Com relação à abordagem quântica, apesar do tamanho da instância apresentada ter sido menor que as configurações reais da fábrica, é possível expandir essa aplicação para comportar as configurações reais. Além disso, nos resultados apresentados, o aumento suave da curva de energia aponta que o modelo tem potencial de oferecer soluções melhores se considerado o mesmo tempo gasto pelo *Simulated Annealing* e também estima-se que a qualidade das soluções no geral ainda se mantenha superior de modo geral. Apesar de os computadores quânticos ainda estarem no estágio de desenvolvimento da tecnologia, com presença de muito ruído (era NISQ), foram obtidos resultados promissores. Com a evolução e criação de computadores tolerantes à falha (FTQC), os resultados tendem a ser ainda melhores. Apesar disso, os ganhos já o tornam aplicável para os dias atuais.

A partir do estudo das regras de associação e estratégias de mineração de dados para o desenvolvimento dos sistemas citados anteriormente, foi notada a semelhança entre as regras de associação *Lift* e a função de correlação $g^{(2)}(\tau)$. Iniciou-se um estudo em óptica quântica, que se seguirá a um estudo em dispositivos fotônicos, para o desenvolvimento de um algoritmo que unisse esses dois tópicos. Computadores fotônicos também podem utilizar as portas quânticas apresentadas durante a fundamentação e a transcrição do

algoritmo para um circuito de portas também está elencada nas tarefas a serem realizadas. O algoritmo de recomendação ainda está em fase de desenvolvimento e exploração, mas aponta diversas possibilidades de aplicação e viabilidade mesmo apesar dos questionamentos apresentados. Além disso, os ganhos teorizados justificam o desenvolvimento.

Como trabalhos futuros será dado prosseguimento ao desenvolvimento do algoritmo quântico de recomendação, juntamente com a sua comparação com outros algoritmos quânticos e clássicos, em especial [89, 52]. Além disso, será dado prosseguimento à implantação dos métodos anunciados aqui na empresa parceira, que deverá ser realizado via um projeto de Pesquisa Inovativa em Pequenas Empresas (PIPE-FAPESP) na startup NtropiQ, ligada ao nosso projeto, que está elaborando a proposta a ser submetida à FAPESP. Por meio dessa nova etapa, serão testados na prática os sistemas desenvolvidos e comparados com os resultados simulados.

Referências

- [1] AARTS, E.; KORST, J.; MICHIELS, W. Simulated Annealing. Em: BURKE, E.K.; KENDALL, G. (Ed.). **Search Methodologies: Introductory Tutorials In Optimization And Decision Support Techniques**. Springer, p. 187-210, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- [2] ABBASS, H. What is artificial intelligence?. **IEEE Transactions On Artificial Intelligence**. v. 2, 94-95, 2021. Citado na página 37.
- [3] AGRAWAL, R.; SRIKANT, R. Fast algorithms for mining association rules. **Proc. 20th int. conf. very large data bases**, v. 1215, p. 487–499, 1994. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 43.
- [4] AHARONOV, D. et. al. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation. **SIAM Review**, v. 50, n. 4, p. 755-787, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 32.
- [5] ALBASH, T.; LIDAR, D. Adiabatic quantum computation. **Reviews Of Modern Physics**. v. 90, 2018. Citado na página 32.
- [6] ALBERT, D. On quantum-mechanical automata. **Physics Letters A**, v. 98, n. 5-6, p. 249-252, 1983. Citado na página 27.
- [7] ANDELKOVIC, A. Implementation of Just-in-sequence concept in automotive industry—comparison of Austrian and Serbian model. **Industrija**. v. 45, n. 3, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- [8] BARENCO, A. et. al. **Elementary gates for quantum computation**. Physical Review A. v. 52, n. 5, 1995. Citado na página 31.
- [9] BELL, J. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. **Physics**. v. 1, n. 3, p. 195—200, 1964. Citado na página 24.
- [10] BENIOFF, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines. **Journal Of Statistical Physics**. v. 22, p. 563–591, 1980. Citado na página 27.
- [11] BERBERIAN, S. **Introduction to Hilbert Space**. AMS Chelsea, 1999. Citado na página 16.
- [12] BERNSTEIN, Ethan; VAZIRANI, Umesh. Quantum complexity theory. In: **Proceedings of the twenty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing**, p. 11-20, 1993. Citado na página 27.

- [13] BERTOLINI SISTEMAS DE ARMAZENAMENTO. **O que é o sistema Flow Rack?** Disponível em: <<https://www.bertoliniarmazenagem.com.br/post/o-que-e-o-sistema-flow-rack%3F/23>>. Acesso em: 20 fev. 2025. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 47.
- [14] BIAMONTE, J.; LOVE, P. Realizable Hamiltonians for universal adiabatic quantum computers. **Physical Review A**, v. 78, 2008. Citado na página 34.
- [15] BOOTHBY, K. et. al. Next-Generation Topology of D-Wave Quantum Processors. **ArXiv preprint arXiv:2003.00133**, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 35.
- [16] BORN, M. Quantenmechanik und Statistik. **Naturwissenschaften**. v. 15, p. 238-242, 1927. Citado na página 15.
- [17] BORN, M.; FOCK, V. Beweis des adiabatenatzes. **Zeitschrift Für Physik**. v. 51, p. 165-180, 1928. Citado na página 32.
- [18] BRASIL, Câmara dos Deputados. **Projeto de Lei 21/2020, de 4 de fev. de 2020**. Estabelece fundamentos, princípios e diretrizes para o desenvolvimento e a aplicação da inteligência artificial no Brasil; e dá outras providências. Brasília: Câmara dos Deputados, 2020. Disponível em: <<https://www.camara.leg.br/proposicoesWeb/fichadetramitacao?idProposicao=2236340>>. Acesso em: 7 jan. 2025. Citado na página 37.
- [19] BRUZEWICZ, C. et. al. **Trapped-ion quantum computing: Progress and challenges**. Applied Physics Reviews, v. 6, n. 2, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 31.
- [20] CARDOSO, F. **Superposição de Estados Comprimidos de Dois Modos e Aplicações em Informação Quântica**. Orientador: Celso J. Villas-Bôas. 2019. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 63 e 65.
- [21] CHAN, F.; CHAN, H. Improving the productivity of order picking of a manual-pick and multi-level rack distribution warehouse through the implementation of class-based storage. **Expert Systems With Applications**, v. 38, n. 3, p. 2686-2700, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- [22] CLAUSER, J. et. al. Proposed experiment to test local hidden-variable theories. **Physical Review Letters**. v. 23, n. 15, p. 880-884, 1969. Citado na página 24.
- [23] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**. 1977. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.

- [24] CONDON, E. Remarks on Uncertainty Principles. **Science**, v. 69, p. 573-574, 1929. Citado na página 23.
- [25] CORMEN, T. et. al. **Introduction to algorithms**. The MIT Press, 4 ed. 2022. Citado na página 39.
- [26] DATE, P.; POTOK, T. Adiabatic quantum linear regression. **Scientific Reports**. v. 11, 2021. Citado na página 31.
- [27] DEUTSCH, D. Quantum theory, the Church–Turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings Of The Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 400, n. 1818, p. 97-117, 1985. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 29.
- [28] DEUTSCH, D. Quantum computational networks. **Proceedings Of The Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences**. v. 425, n. 1868, p. 73-90, 1989. Citado 3 vezes nas páginas 27, 29 e 31.
- [29] D-WAVE SYSTEMS. Hybrid Solver for Constrained Quadratic Models. **D-Wave Whitepapers Series**, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 51.
- [30] D-WAVE SYSTEMS. **Featured Applications**. Disponível em: <<https://www.dwavequantum.com/learn/featured-applications/>>, Acesso em 02 de janeiro de 2025 Citado 2 vezes nas páginas 13 e 31.
- [31] D-WAVE SYSTEMS. **Resource Library**. Disponível em: <<https://www.dwavesys.com/learn/resource-library/>>, Acesso em 02 de janeiro de 2025 Citado na página 31.
- [32] D-WAVE SYSTEMS. **Scientific Publications**. Disponível em: <<https://www.dwavesys.com/learn/publications/>>, Acesso em 02 de janeiro de 2025 Citado na página 31.
- [33] EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?. **Physical Review**. v. 47, n. 10, p. 777-780, 1935. Citado na página 24.
- [34] FARHI, E.; GOLDSTONE, J.; GUTMANN, S. Quantum adiabatic evolution algorithms versus simulated annealing. **ArXiv Preprint Quant-ph/0201031**, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 32, 33 e 40.
- [35] FERNANDES, G. et. al. Íons Aprisionados como Arquitetura para Computação Quântica. **Revista Brasileira De Ensino De Física**, v. 45, 2022. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 31.

- [36] FERNANDES, G. **Algoritmo Quântico para o Problema de Gerenciamento de Estoque**. Orientador: Celso J. Villas-Bôas. 2023. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2023. Citado 3 vezes nas páginas [33](#), [34](#) e [50](#).
- [37] FERNANDES, G. et. al. Optimization Algorithm for Inventory Management on Classical, Quantum and Quantum-Hybrid Hardware. **ArXiv Preprint ArXiv:2411.11756**, 2024. Citado 6 vezes nas páginas [13](#), [14](#), [49](#), [50](#), [56](#) e [57](#).
- [38] FERNANDES, G. et. al. **Addressing the Inventory Management Problem through classical, quantum and quantum-hybrid hardware**. 2024. Apresentação realizada na Second Quantum Computing School ICTP-SAIFR, de 7 a 18 de outubro de 2024. Citado 3 vezes nas páginas [7](#), [52](#) e [55](#).
- [39] FERNANDES, G. et. al. Método e sistema para otimização de gerenciamento de estoques em prateleiras gravitacionais. **Patente BR 10 2024 018867 5**, 13 de set. de 2024. Citado 3 vezes nas páginas [13](#), [14](#) e [43](#).
- [40] FEYNMAN, R. Simulating Physics with Computers. **International Journal of Theoretical Physic**, v. 21, n. 6/7, 1982. Citado na página [27](#).
- [41] FOULDS, L. The heuristic problem-solving approach. **Journal Of The Operational Research Society**, v. 34, p. 927-934, 1983. Citado na página [39](#).
- [42] GERRY, C. & KNIGHT, P. **Introductory quantum optics**. Cambridge university press, 2005. Citado 7 vezes nas páginas [63](#), [64](#), [65](#), [66](#), [67](#), [68](#) e [69](#).
- [43] GIBNEY, E. D-Wave upgrade: How scientists are using the world's most controversial quantum computer. **Nature**, v. 541, n.7638 p. 447-448, 2017. Citado na página [31](#).
- [44] GREENBERGER, D. M.; HORNE, M. A.; ZEILINGER, A. Going beyond Bell's theorem. Em: KAFATOS, M. (Ed.). **Bell's Theorem, Quantum Theory And Conceptions Of The Universe**. Springer Science & Business Media, 2013. p. 69-72, 1989. Citado na página [24](#).
- [45] HARTREE, D. Calculating Instrument and Machine. 1949. Citado na página [37](#).
- [46] HOGG, T. Adiabatic quantum computing for random satisfiability problems. **Physical Review A**, v. 67, 2003. Citado na página [31](#).
- [47] HORODECKI, R. et. al. Quantum entanglement. **Reviews Of Modern Physics**. v. 81, p. 865-942, 2009. Citado na página [24](#).
- [48] HUSSEIN, N.; ALASHQUR, A.; SOWAN, Bilal. Using the interestingness measure lift to generate association rules. **Journal of Advanced Computer Science & Technology**, v. 4, n. 1, p. 156, 2015. Citado na página [42](#).

- [49] IRIE, H. et. a. Quantum annealing of vehicle routing problem with time, state and capacity. **Quantum Technology And Optimization Problems: First International Workshop QTOP 2019**, Munich, Germany, 18 de março de 2019, Anais do evento 1. p. 145-156, 2019. Citado na página 31.
- [50] JAVA POINT. **Apriori Algorithm**. Disponível em: <https://www.javatpoint.com/apriori-algorithm>, Acesso em: 14 de jan. de 2025. Citado na página 43.
- [51] KASIRAJAN, V. The Quantum Superposition Principle and Bloch Sphere Representation. Em: **Fundamentals of Quantum Computing**. Springer, p. 75–104, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- [52] KERENIDIS, I.; PRAKASH, A. Quantum Recommendation Systems, **arXiv preprint arXiv:1603.08675**, 2016. Citado na página 74.
- [53] KIRKPATRICK, S.; GELATT JR, C.; VECCHI, M. Optimization by simulated annealing. **Science**, v. 220, p. 671-680, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 40.
- [54] KOTSIANTIS, S.; KANELLOPOULOS, D. Association rules mining: A recent overview. **GESTS International Transactions on Computer Science and Engineering**, v. 32, n. 1, p. 71–82, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 41 e 42.
- [55] LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. Deep learning. **Nature**, v. 521, p. 436-444, 2015. Citado na página 38.
- [56] LESCH, V. et. al. A Case Study on Optimization of Warehouses. **ArXiv Preprint ArXiv:2112.12058**, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- [57] LIANG, Min; YANG, Li. On a class of quantum Turing machine halting deterministically. **Science China Physics, Mechanics and Astronomy**, v. 56, p. 941-946, 2013. Citado na página 27.
- [58] LUCAS, A. Ising formulations of many NP problems. **Frontiers In Physics**. v. 2, p. 5, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 33, 34, 39 e 50.
- [59] MANDEL, L; WOLF, E. **Optical Coherence and Quantum Optics**. Cambridge University Press, 1995. Citado na página 59.
- [60] MCGEOCH, C. Theory versus practice in annealing-based quantum computing. *Theoretical Computer Science*. v. 816, p. 169-183, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 33 e 34.
- [61] MCMAHON, D. **Quantum Computing Explained**. Wiley, 2008. Citado 3 vezes nas páginas 24, 25 e 32.

- [62] MENABREA, L. F. Sketch of the analytical engine invented by Charles Babbage. In: TAYLOR, Richard (ed.). **Scientific Memoirs**, Selected from the Transactions of Foreign Academies of Science and Learned Societies, and from Foreign Journals. Tradução: Ada L. Lovelace, v. 3, p. 666-731, 1843. Citado na página 37.
- [63] METROPOLIS, N. et. al. Equation of state calculations by fast computing machines. **The Journal Of Chemical Physics**, v. 21, p. 1087–1092, 1953. Citado na página 39.
- [64] MIHARA, Takashi; NISHINO, Tetsuro. Quantum computation and NP-complete problems. In: **Algorithms and Computation: 5th International Symposium, ISAAC'94 Beijing, PR China, August 25–27, 1994 Proceedings 5**. Springer Berlin Heidelberg, p. 387-395, 1994. Citado na página 27.
- [65] NAGARNAIK, P.; THOMAS, A. Survey on recommendation system methods. **2nd International Conference On Electronics And Communication Systems (ICECS)**, Coimbatore, India, p. 1603-1608, 2015. Citado na página 41.
- [66] NAKAHARA, M.; OHMI, T. **Quantum computing: from linear álgebra to physical realizations**. CRC press, 2008. Citado 12 vezes nas páginas 13, 15, 17, 18, 19, 20, 24, 25, 27, 29, 30 e 31.
- [67] NASTASI, Gianluca et al. Implementation and comparison of algorithms for multi-objective optimization based on genetic algorithms applied to the management of an automated warehouse. *Journal of Intelligent Manufacturing*, v. 29, p. 1545-1557, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- [68] NIELSEN, M.; CHUANG, I. **Quantum Computation and Quantum Information**. Cambridge University Press, 10th Anniversary Edition, 2010. Citado 17 vezes nas páginas 13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 29, 30 e 31.
- [69] NISHINO, Tetsuro. Quantum computation and NP-complete problems. In: **Quantum Information II**, p. 125-134, 2000. Citado na página 27.
- [70] NOBLE, J. **O que é o algoritmo Apriori?**. Disponível em: <https://www.ibm.com/br-pt/topics/apriori-algorithm>, Acesso em: 14 de jan. de 2025. Citado na página 43.
- [71] PAPADIMITRIOU, Christos M. **Computational complexity**. Addison-Wesley, 1994. Citado na página 27.
- [72] PRESKILL, J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. **Quantum**. v. 2 p. 79, 2018. Citado na página 13.
- [73] PRUWGOVECKI, E. *Quantum Mechanics in Hilbert Space*. Academic Press, 2 ed., 1982. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 16.

- [74] PYTHON FOUNDATION. **Pypi - Apyori 1.1.2**. Disponível em: <https://pypi.org/project/apyori/>, Acesso em: 14 de jan. de 2025. Citado na página 43.
- [75] RICARDO, A. et. al. Warehouse optimization using a trapped-ion quantum processor. **ArXiv Preprint ArXiv:2411.17575**, 2024. Citado 3 vezes nas páginas 14, 31 e 47.
- [76] ROBERTSON, H. The Uncertainty Principle. **Physical Review**, v. 34, p. 163-164, 1929. Citado na página 23.
- [77] RUSSELL, S.; NORVIG, P. **Artificial Intelligence: a modern approach**. Pearson, 3 ed., 2016. Citado 3 vezes nas páginas 37, 38 e 40.
- [78] SCHRÖDINGER, E. About Heisenberg Uncertainty Relation. **Proceedings Of The Prussian Academy Of Sciences**, XIX, p. 296-303, 1930. Citado na página 23.
- [79] SCHULD, M. PETRUCCIONE, F. **Machine learning with quantum computers**. Springer, 2021. Citado na página 38.
- [80] SCHULD, M. PETRUCCIONE, F. **Supervised learning with quantum computers**, Springer, 2018. Citado na página 70.
- [81] SCULLY, M. O.; ZUBAIRY, M. S. **Quantum optics**. American Association of Physics Teachers, 1999. Citado 6 vezes nas páginas 59, 64, 65, 66, 67 e 68.
- [82] SHAH, L.; GAUDANI, H.; BALANI, P. Survey on recommendation system. **International Journal Of Computer Applications**. v. 137, n. 7, p. 43-49, 2016. Citado na página 41.
- [83] SHARMA, L.; GERA, A. A survey of recommendation system: Research challenges. **International Journal Of Engineering Trends And Technology (IJETT)**. v. 4, n. 5, p. 1989-1992, 2013. Citado na página 41.
- [84] SHEIKH, H.; PRINS, C.; SCHRIJVERS, E. Artificial Intelligence: Definition and Background. Em: **Mission AI**. Springer, Cham, 2023. Citado na página 37.
- [85] SHEPELEV, V. et. al. Evolution Of Industrial Complexes: From Industrial Parks To Science And Technology Parks. **European Proceedings Of Social And Behavioural Sciences**, v. 57, 2018. Citado na página 45.
- [86] SHIN, S. et. al. How "quantum" is the D-Wave machine? **ArXiv Preprint ArXiv:1401.7087**, 2014. Citado na página 31.
- [87] SILVER, E. An overview of heuristic solution methods. **Journal Of The Operational Research Society**, v. 55, p. 936-956, 2004. Citado na página 39.

- [88] SOUZA, P. J. P. et. al. Computação Quântica Adiabática: Do Teorema Adiabático ao Computador da D-Wave. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 43, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 32 e 34.
- [89] TANG, E. A quantum-inspired classical algorithm for recommendation systems. **51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing**, Association for Computing Machinery (ACM), New York, NY, USA p. 217–228, 2019. Citado na página 74.
- [90] THUN, J.; MARBLE, R.; SILVEIRA-CAMARGOS, V. A conceptual framework and empirical results of the risk and potential of just in sequence-a study of the german automotive industry. **Journal Of Operations And Logistics**, v. 1, N. 2, 2007. Citado na página 45.
- [91] TOCCI, R.; WIDMER, N.; MOSS, G. **Sistemas digitais: princípios e aplicações**. Pearson Prentice Hall, 11 ed. 2011. Citado na página 28.
- [92] TOLEDO PIZA, A. F. R. **Mecânica Quântica**. EdUSP, 2003. Citado 4 vezes nas páginas 15, 19, 20 e 23.
- [93] TURING, A. Computing machinery and intelligence. **Mind** v.49, p. 433-460, 1950. Citado na página 37.
- [94] UNIÃO EUROPÉIA, Comissão Européia. Comunicação da Comissão ao Parlamento Europeu, ao Conselho Europeu, ao Conselho, ao Comitê Econômico e Social Europeu e ao Comitê Das Regiões. **Inteligência artificial para a Europa**. Bruxelas, 25 de abril de 2018. Disponível em: <<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/PT/TXT/?uri=CELEX:52018DC0237>>. Acesso em: 7 jan. 2025. Citado na página 37.
- [95] WALLS, D. F.; MILBURN, G. J. **Quantum Optics**. Springer, 2 ed., 2008. Citado 7 vezes nas páginas 59, 63, 64, 65, 66, 67 e 68.
- [96] WANG, P. On defining artificial intelligence. **Journal Of Artificial General Intelligence**. v. 10, n. 2, p. 1-37, 2019. Citado na página 37.
- [97] WANG, Y.; MOU, S.; WU, Y. Storage assignment optimization in a multi-tier shuttle warehousing system. **Chinese Journal Of Mechanical Engineering**, v. 29, p. 421-429, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 45.
- [98] WEINBERG, S. **The quantum theory of fields**. Cambridge university press, v. 1, 1995. Citado na página 59.
- [99] ZAECH, J. et. al. Adiabatic quantum computing for multi object tracking. **Anais de The IEEE/CVF Conference On Computer Vision And Pattern Recognition**. p. 8811-8822, 2022. Citado na página 31.

-
- [100] ZAGOSKIN, A. et. al. How to test the “quantumness” of a quantum computer? **Frontiers In Physics**, v. 2, 2014. Citado na página 31.
- [101] ZETTILI, N. **Quantum mechanics: concepts and applications**. John Wiley & Sons, 2 ed., 2009. Citado 9 vezes nas páginas 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22 e 23.
- [102] ZHANG, D. et al. **The AI Index 2022 Annual Report**. AI Index Steering Committee, Stanford Institute for Human-Centered AI, Stanford University, 2022. Citado na página 13.