



Da Energia aos Algoritmos: 200 Anos de Matemática em uma Jornada até a Computação Quântica

Um curso imersivo sobre como estruturas hamiltonianas, álgebra linear e teorias da complexidade moldam os sistemas físicos que hoje processam informação — e os algoritmos que podem transformar o futuro da computação

Sobre o Autor

Marcos Eduardo Elias é matemático, engenheiro, empresário e pesquisador multidisciplinar com atuação destacada nas fronteiras entre finanças, ciência de dados, física matemática e computação quântica. Formado em Engenharia Mecatrônica pela POLI-USP, é doutor em Matemática pela Universidade Estatal de São Petersburgo, com foco em análise real, complexa e funcional. Complementou sua formação com mestrado em Direito pela FGV-SP e MBA pela Universidade de Pittsburgh, nos Estados Unidos.

Ao longo de mais de duas décadas, Marcos Elias fundou e liderou diversas instituições financeiras e tecnológicas de vanguarda. Foi o criador da GAS Investimentos (posteriormente incorporada pela Vinci Partners), da Empiricus, da Turing (pioneira em high-frequency trading com inteligência artificial no Brasil), da Modena Capital e da Actus. Também atuou como sócio da Link Corretora, onde inovou ao introduzir relatórios de análise direta e comparações internacionais de ações brasileiras — abordagem que se tornaria padrão no mercado.

Sua trajetória acadêmica inclui passagens como professor no Ibmec, Insper e FGV-SP, onde lecionou entre 1997 e 2006. Em paralelo à carreira empresarial, Marcos tem se dedicado à pesquisa e à formação de talentos por meio do Ramanujan Institute, centro de excelência voltado à matemática pura, física teórica e computação de fronteira. O instituto promove uma abordagem transdisciplinar, reunindo pesquisadores de diversas áreas para investigar estruturas fundamentais da realidade computável.

Nos últimos anos, sua atuação tem se expandido para o campo da computação quântica e da Web3. É fundador da HoloSystems Quantum, empresa dedicada ao desenvolvimento de algoritmos quânticos aplicados à otimização, simulação de materiais e finanças estruturadas.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Também lidera a Equiverse, plataforma que integra inteligência artificial, blockchain e sistemas complexos para aplicações em ciência de dados e governança algorítmica.

Em 2025, lançou o token ITO por meio da plataforma Kiyosito, um ecossistema descentralizado que une notificações de trade em tempo real com financiamento de startups baseado em performance. A proposta do ITO é redefinir a relação entre investidores e empreendedores, utilizando contratos inteligentes e princípios de finanças descentralizadas para criar um modelo sustentável, transparente e meritocrático de alocação de capital.

Marcos Elias é reconhecido por sua capacidade de transitar entre teoria e prática, combinando rigor matemático com visão estratégica e espírito empreendedor. Seu trabalho reflete um compromisso contínuo com a inovação estrutural — seja na modelagem de algoritmos inspirados em Hamiltonianas, na criação de mercados descentralizados ou na formação de uma nova geração de pensadores capazes de operar nas fronteiras entre matemática, física e computação.

INTRODUÇÃO:

Seja bem-vindo a um curso desenhado não apenas para transmitir técnicas, mas para provocar uma transformação na forma como compreendemos os fundamentos da computação, da física e da matemática — e como essas áreas se entrelaçam para formar o alicerce de uma nova era tecnológica.

“Da Energia aos Algoritmos: 200 Anos de Matemática em uma Jornada até a Computação Quântica” é uma travessia conceitual pela espinha dorsal da ciência: dos princípios variacionais clássicos às arquiteturas algorítmicas do século XXI. Aqui, não estudaremos a computação quântica como uma coleção de portas lógicas ou curiosidades tecnológicas: estudaremos sistemas físicos como algoritmos naturais, e algoritmos como extensões da estrutura energética da realidade.

Ao longo de 360 horas, nosso percurso será guiado pela ideia de que compreender um Hamiltoniano é compreender não apenas a dinâmica de um sistema físico, mas também a estrutura computacional de problemas complexos — desde otimizações clássicas até heurísticas inspiradas em tunelamento quântico. Exploraremos por que álgebra linear é a verdadeira linguagem operacional da natureza, como teoria da complexidade molda os limites computacionais do mundo físico, e como redes neurais e variações contínuas podem simular estados quânticos em máquinas clássicas com surpreendente eficiência.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Este não é um curso sobre o futuro — é um curso sobre o presente que já nasceu com os traços do futuro. Uma formação para mentes que não apenas querem dominar tecnologias emergentes, mas compreendê-las em sua profundidade estrutural. Esperamos, aqui, não apenas formar especialistas, mas formar **exploradores da fronteira matemática da realidade computável**.

OS PROTAGONISTAS DA COMPUTAÇÃO QUÂNTICA ALGORÍTMICA

Richard P. Feynman

Físico americano e ganhador do Nobel, Feynman foi o primeiro a sugerir explicitamente que certos sistemas físicos — como moléculas complexas — não poderiam ser simulados de forma eficiente por computadores clássicos, e que uma nova máquina, baseada em princípios quânticos, seria necessária. Em sua icônica palestra de 1981 no MIT, afirmou: "*Nature isn't classical, damn it, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical.*" Isso deu origem à ideia de computação quântica como modelo físico, não apenas lógico. Feynman não criou algoritmos, mas mudou o paradigma: do computar como abstração para o computar como fenômeno.

David Deutsch

Matemático e físico teórico de Oxford, Deutsch publicou em 1985 o artigo que define o **modelo do computador quântico universal de portas**. Ao introduzir o conceito de Turing universal no domínio quântico, ele estabeleceu as bases formais para algoritmos sobre superposições. Foi também pioneiro em argumentar, do ponto de vista da epistemologia científica (e não apenas da física computacional), que o conhecimento do universo requer modelos computacionais coerentes com a mecânica quântica. Deutsch é também o criador do algoritmo quântico para teste de paridade (Deutsch-Jozsa) — um dos primeiros a mostrar separação entre classes P e BQP para casos oraculares.

Peter Shor

Matemático do MIT, Shor entrou para a história ao apresentar, em 1994, um algoritmo quântico eficiente para fatorar inteiros em tempo polinomial, quebrando o sistema RSA. Isso transformou a computação quântica de curiosidade acadêmica em ameaça prática à criptografia moderna. Além disso, Shor foi pioneiro em sistemas de **correção de erro quântico**, desenvolvendo o primeiro código que protege qubits contra ruídos locais. Seus trabalhos impulsionaram

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



experimentos reais, investimentos institucionais e estratégias de tolerância a falhas em arquiteturas quânticas.

Lov Grover

Cientista da Bell Labs, Grover criou em 1996 o algoritmo de **busca não estruturada** com aceleração quântica quadrática, permitindo encontrar um item em uma lista de N elementos com apenas \sqrt{N} consultas. Seu algoritmo se tornou uma sub-rotina fundamental para outras estruturas — como otimização e amplitude amplification. Grover também discutiu os limites de aceleração em algoritmos sem estrutura algébrica e influenciou profundamente a formulação de algoritmos heurísticos e aproximados em ambientes NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum).

Charles H. Bennett

Pesquisador da IBM Research, Bennett é um dos fundadores da **informação quântica moderna**. Com Gilles Brassard, criou o protocolo BB84 de **criptografia quântica**, e com colegas demonstrou o fenômeno de **teletransporte quântico** em 1993. Suas contribuições foram fundamentais para a noção de entropia quântica, irreversibilidade computacional e computação reversível — hoje pilar de circuitos eficientes em física da informação. Bennett é também um dos principais pensadores sobre as fronteiras entre física e teoria da informação.

Emanuel Knill & Raymond Laflamme

Knill e Laflamme, do Los Alamos National Laboratory, co-propuseram o modelo de computação **DQC1** (Deterministic Quantum Computation with one qubit), mostrando que mesmo com mínima coerência quântica, certos traços de operadores podem ser estimados com vantagens computacionais. Seus trabalhos questionaram o papel do emaranhamento como único recurso computacional e abriram portas para arquiteturas híbridas com baixa profundidade. Também contribuíram decisivamente em códigos de correção de erros e na teoria de sistemas quânticos ruidosos.

Aram W. Harrow, Avinatan Hassidim & Seth Lloyd (HHL)

Trio responsável pelo algoritmo HHL, publicado em 2009, que propõe a solução de sistemas lineares de equações do tipo $Ax = b$ usando circuitos quânticos com complexidade logarítmica em N . Isso representou um divisor de águas na álgebra linear quântica, com impacto em aprendizado de máquina, análise espectral e simulações químicas. Apesar de requisitos fortes

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



(condicionamento e acesso oracular), o HHL desencadeou uma linha de pesquisa sobre block-encoding, qubitization e simulação eficiente de Hamiltonianas.

Scott Aaronson

Teórico da complexidade computacional e professor da UT Austin, Aaronson é um dos maiores divulgadores e inovadores em fundamentos da computação quântica. Contribuiu para limites da classe BQP, para modelos como postBQP e para argumentos sobre separações entre universos computacionais. Seu trabalho sobre boson sampling, random oracle separations e *shadow tomography* moldou o campo da verificação de processos quânticos. Aaronson também é responsável por trazer precisão conceitual ao debate público sobre o poder real dos computadores quânticos.

Thomas Vidick & Umesh Vazirani

Vidick (Caltech) e Vazirani (UC Berkeley) lideraram a integração entre **teoria de jogos quânticos, verificação interativa e complexidade algorítmica**. Com colaboradores, provaram o famoso resultado MIP* = RE, revelando que verificadores quânticos podem resolver problemas tão difíceis quanto os problemas recursivamente enumeráveis. Isso conecta mecânica quântica com limites computacionais da matemática de Gödel. Vazirani também é um dos fundadores teóricos do modelo de circuitos quânticos e coautor do algoritmo Deutsch-Jozsa.

Mario Szegedy

Teórico da computação e criador de algoritmos baseados em **quantum walks** (caminhadas quânticas), Szegedy generalizou estruturas probabilísticas para o domínio unitário. Suas técnicas permitem resolver problemas de busca, conectividade e marcação em grafos com aceleração quadrática. Introduziu métodos espectrais para avaliar o comportamento de operadores de transição quântica — aplicáveis em diversas áreas, da química à biologia computacional.

Ashley Montanaro

Professor da Universidade de Bristol, Montanaro é especialista em algoritmos quânticos para problemas clássicos como SAT, otimização convexa e aprendizado supervisionado. Demonstrou separações entre algoritmos clássicos e quânticos via lower bounds e compôs arquiteturas eficientes para tarefas como amostragem e compressão de dados. Seu trabalho recente envolve

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



métodos robustos e tolerantes a ruído — úteis para algoritmos em hardware ruidoso com circuitos de baixa profundidade.

Kristan Temme & Jarrod McClean

Pesquisadores da IBM (Temme) e da Google Quantum AI (McClean), ambos são protagonistas da era dos algoritmos variacionais. McClean liderou o estudo de **barren plateaus** (regiões de gradiente quase nulo no espaço de parâmetros), enquanto Temme propôs métodos de mitigação de erro e inferência clássica assistida. Juntos, seus trabalhos consolidaram a abordagem VQE como rota viável para extração de estados fundamentais de Hamiltonianas reais, mesmo com hardwares imperfeitos.

Guglielmo Mazzola & Giuseppe Carleo

Líderes na interseção entre aprendizado profundo e mecânica quântica. Em 2017, Carleo e Troyer propuseram o uso de **Redes de Boltzmann Restritas (RBM)** para representar funções de onda — criando as **Neural Quantum States**. Mazzola complementou com abordagens para simulação térmica e otimização baseada em aprendizado não supervisionado. Juntos, mostraram que redes neurais profundas podem capturar coerência, emaranhamento e transições de fase em sistemas quânticos fortemente correlacionados.

Yuan Su, Dominic Berry & Nathan Wiebe

Trio responsável por avanços teóricos em **simulação de Hamiltonianas** com precisão quântica. Introduziram técnicas como **qubitização, block-encoding e quantum singular value transformation**, permitindo simulações de evolução temporal com complexidade quase ótima. Esses métodos permitiram acelerar algoritmos de química quântica, decomposição espectral e aprendizado linear. Essas inovações estruturaram algoritmos com compressão subespacial e técnicas de amplificação espectral robustas, otimizando operações fundamentais como decomposição singular, regressão e simulação de evolução temporal.

Daniel Gottesman

Matemático e físico do Perimeter Institute, Gottesman é referência absoluta em **correção de erros quânticos**. Desenvolveu o **formalismo estabilizador**, que permite representar e manipular códigos quânticos complexos em estruturas algebraicamente eficientes. Foi um dos primeiros a mostrar como qubits físicos ruidosos podem ser protegidos por códigos de redundância em

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



espaços de Hilbert. Seus trabalhos pavimentaram o caminho para a computação quântica tolerante a falhas.

Barbara Terhal

Professora da RWTH Aachen, Terhal é reconhecida por seu trabalho em **verificação de processos quânticos, códigos topológicos e simulação de materiais fortemente correlacionados**. Contribuiu para métodos de certificação de saídas quânticas e para o uso de modelos como o código de superfície (surface code), hoje padrão em protótipos de correção de erros. Seu trabalho é essencial para arquiteturas escaláveis e análise realista de fidelidade em máquinas quânticas atuais.

Alan Aspuru-Guzik

Químico teórico e pesquisador multidisciplinar da Universidade de Toronto, Aspuru-Guzik foi um dos primeiros a aplicar algoritmos quânticos como VQE à **simulação de moléculas**, viabilizando aplicações em química quântica e design de materiais. Lidera iniciativas em aprendizado quântico e inteligência artificial aplicada a descoberta de fármacos. Seu grupo fundou empresas como Zapata Computing, que criam bibliotecas de algoritmos para sistemas híbridos quântico-clássicos.

O que são algoritmos "quantum-inspired"? Eles são algoritmos clássicos que se aproveitam de princípios matemáticos, heurísticas ou estruturas inspiradas na mecânica quântica (como superposição, interferência e tunelamento), mas **executados em hardware tradicional**, não em qubits.

Exemplos de aplicações já em uso:

- **Portfolio Optimization (finanças)**: empresas como Microsoft, Goldman Sachs e JP Morgan já usam algoritmos quantum-inspired para resolver problemas complexos de alocação de ativos, com resultados competitivos em relação a técnicas clássicas como gradient descent ou métodos estocásticos.
- **Logística e cadeias de suprimento**: o Microsoft Quantum Team desenvolveu algoritmos de otimização (como QIO — *Quantum-Inspired Optimization*) aplicados a roteirização de entregas, sequenciamento de produção e problemas do tipo *vehicle routing* com enormes espaços combinatórios.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- **Design molecular e farmacêutico:** simulações de estruturas moleculares ou docking protein-ligand estão começando a usar modelos inspirados em annealing quântico para escapar de mínimos locais em superfícies de energia potencial.
- **Machine Learning:** técnicas como *quantum-inspired tensor networks* estão sendo exploradas para compressão e generalização de modelos em deep learning — útil para edge computing e IA embarcada.

O ponto chave: esses algoritmos *não* exigem hardware quântico, mas trazem benefícios como redução da dimensionalidade de busca, escape mais eficiente de mínimos locais e exploração de soluções globais — tudo inspirado em fenômenos quânticos.

A DENSO, gigante japonesa de tecnologia automotiva, aplicou algoritmos *quantum-inspired* para resolver problemas complexos de roteirização e logística em suas operações. O sistema desenvolvido, chamado **Mk-D**, foi usado para otimizar rotas de entrega e alocação de recursos em tempo real.

Resultados reportados:

- **Redução de tempo de processamento:** de **30 minutos para menos de 1 minuto** em certos cenários de roteirização com múltiplas restrições.
- **Impacto adicional:** redução significativa de horas de trabalho humano e emissões de CO₂, graças à eficiência computacional e operacional.

O algoritmo usado simula o comportamento de sistemas quânticos (como *quantum annealing*) em hardware clássico, permitindo explorar rapidamente grandes espaços combinatórios — algo que algoritmos tradicionais de busca ou heurísticas genéricas demorariam muito mais para resolver.

Agendamento de robôs de transporte em laboratório automatizado (TRSP)

Um estudo publicado em *Scientific Reports* comparou três abordagens para resolver o problema de agendamento de robôs de transporte em um laboratório de alto rendimento:

- **Fujitsu Digital Annealer** (*quantum-inspired*)
- **D-Wave Leap Hybrid** (*quantum-classical*)
- **Gurobi Solver** (clássico, referência de mercado)

Resultados observados:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- O **Digital Annealer** da Fujitsu foi capaz de encontrar soluções de qualidade comparável ou superior ao Gurobi, mas com **redução de tempo de execução de até 80%** em certos cenários.
- Em instâncias com alta complexidade combinatória, o tempo caiu de **vários minutos para menos de 30 segundos**, mantendo a qualidade da solução.

Esse problema é NP-difícil e envolve múltiplas restrições temporais e espaciais — ideal para testar limites de otimização. O uso do Digital Annealer permitiu explorar rapidamente o espaço de soluções sem depender de heurísticas tradicionais.

Otimização de redes neurais profundas com técnicas quantum-inspired

Um estudo publicado na revista *Quantum Machine Intelligence* (2024) investigou o uso de **técnicas de otimização inspiradas em quântica combinadas com algoritmos de enxame (swarm intelligence)** para treinar redes neurais profundas em três conjuntos de dados distintos.

Resultados observados:

- **Redução no tempo de treinamento** de até 27% em relação a métodos clássicos como Adam e SGD.
- **Melhoria na acurácia e convergência mais estável**, especialmente em datasets com alta dimensionalidade e ruído.
- Técnicas como *Quantum-inspired Particle Swarm Optimization* e *Quantum-inspired Grey Wolf Optimizer* foram aplicadas com sucesso.

Essas abordagens simulam efeitos como superposição e tunelamento para escapar de mínimos locais durante o treinamento, algo que redes neurais profundas frequentemente enfrentam.

Esse tipo de aplicação é particularmente promissor para **edge AI**, onde o tempo de treinamento e a eficiência energética são críticos.

Eis aqui cinco companhias que estão na vanguarda global do desenvolvimento de algoritmos e soluções *quantum-inspired* — ou seja, que aplicam princípios da mecânica quântica em sistemas clássicos com impacto real:

1. Fujitsu

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- **Destaque:** Desenvolveu o **Digital Annealer**, um processador especializado que simula o comportamento de sistemas quânticos para resolver problemas combinatórios complexos.
- **Aplicações:** Logística, finanças, bioinformática.
- **Impacto:** Usado por empresas como DENSO e BMW para otimização em tempo real.

2. Microsoft

- **Destaque:** Criadora do **Azure Quantum**, que inclui uma suíte de algoritmos *quantum-inspired* para otimização (QIO).
- **Aplicações:** Portfolio optimization, roteirização, supply chain.
- **Impacto:** Parcerias com empresas como Repsol e Toyota para resolver problemas industriais com ganhos de performance mensuráveis.

3. Multiverse Computing

- **Destaque:** Startup espanhola que desenvolveu o **CompactifAI**, uma tecnologia de compressão de modelos de IA inspirada em redes tensoriais quânticas.
- **Aplicações:** Compressão de LLMs, finanças, energia, defesa.
- **Impacto:** Redução de até 95% no tamanho de modelos com até 80% de economia de custo de inferência.

4. NEC Corporation

- **Destaque:** Desenvolveu o **Vector Annealing**, uma abordagem *quantum-inspired* para problemas de otimização.
- **Aplicações:** Planejamento urbano, energia, transporte.
- **Impacto:** Usado em projetos de cidades inteligentes e redes elétricas.

5. Hitachi

- **Destaque:** Trabalha com algoritmos *quantum-inspired* para previsão de demanda e controle de sistemas industriais.
- **Aplicações:** Manufatura, energia, transporte ferroviário.
- **Impacto:** Integração com sistemas de controle em tempo real para eficiência energética e logística.

BMW + Zapata + MIT: Otimização da produção automotiva

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



A BMW, em parceria com a **Zapata Computing** e o **MIT Center for Quantum Engineering**, aplicou uma técnica chamada **GEO (Generator-Enhanced Optimization)** para otimizar o agendamento de produção de veículos em múltiplas fábricas.

O desafio:

- Sincronizar linhas de montagem com diferentes capacidades, turnos e restrições logísticas.
- Minimizar o tempo ocioso das linhas e evitar gargalos de produção.
- Lidar com milhares de variáveis e configurações possíveis — um problema combinatório de altíssima complexidade.

A solução:

- O GEO usa modelos generativos *quantum-inspired* que aprendem com os resultados de otimizadores clássicos e os superam iterativamente.
- Foram realizados **cerca de 1 milhão de testes de otimização** com diferentes algoritmos e configurações, usando a plataforma **Orquestra** da Zapata.

Resultados:

- O GEO **superou os otimizadores tradicionais em 71% dos casos**, reduzindo o tempo ocioso e melhorando o cumprimento das metas de produção mensal.
- A abordagem mostrou **robustez e escalabilidade**, mesmo em cenários com alta variabilidade e múltiplas restrições.

Esse projeto não só ofereceu soluções práticas para a BMW, como também serviu como um marco de como IA generativa e princípios quânticos podem transformar a manufatura automotiva.

D-Wave: entre o quântico e o *quantum-inspired*

A D-Wave é pioneira em **quantum annealing**, uma abordagem diferente do modelo de portas quânticas (gate-based) usado por IBM e Google. Embora a D-Wave opere com hardware quântico real, **muitos dos algoritmos que ela desenvolve — e que seus clientes usam — são híbridos ou inspirados em annealing quântico**, e podem ser simulados em hardware clássico. Isso a coloca em uma zona interessante entre o quântico puro e o *quantum-inspired*.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Além disso, a D-Wave tem investido em **plataformas híbridas**, como o **Leap Hybrid Solver**, que combina técnicas clássicas e quânticas para resolver problemas de otimização. Isso a torna relevante para o ecossistema *quantum-inspired*, mesmo que seu core seja quântico.

Outras pure plays listadas em bolsa:

Além da D-Wave (QBTS), outras empresas listadas que atuam com tecnologias correlatas incluem:

- **IonQ (IONQ)** — mais voltada ao modelo gate-based, mas com interesse crescente em algoritmos híbridos.
- **Rigetti Computing (RGTI)** — também gate-based, mas com iniciativas de integração com algoritmos clássicos.
- **Quantum Computing Inc. (QUBT)** — atua com hardware e software, incluindo simulações e algoritmos inspirados.

Essas empresas estão em estágios diferentes de maturidade e enfrentam desafios financeiros significativos, como você bem sabe. Mas do ponto de vista de **exploração de heurísticas quânticas em ambientes clássicos**, elas são players relevantes — especialmente quando se observa o movimento de "**quantum practicality**": entregar valor antes da supremacia quântica plena.

Entre as empresas *pure play* listadas em bolsa, a **D-Wave** é a que mais se destaca com **aplicações práticas reais já em produção**:

D-Wave Quantum (QBTS)

- **Ford Otosan**: reduziu o tempo de criação de cronogramas de produção em **mais de 80%** usando a plataforma híbrida da D-Wave.
- **NTT DOCOMO**: melhorou o desempenho de redes móveis em **15%**, otimizando alocação de recursos com algoritmos quânticos.
- **Pattison Food Group**: automatizou o agendamento de motoristas de entrega, reduzindo o esforço manual em **~80%**.
- **Japan Tobacco**: acelerou simulações de descoberta de fármacos com IA generativa híbrida.
- **Jülich Supercomputing Centre (Alemanha)**: integrou o sistema Advantage2 à infraestrutura exascale para pesquisa em otimização e IA.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Esses casos não são apenas *proofs of concept* — são **implementações em produção**, com ganhos mensuráveis em tempo, custo e eficiência.

O **problema de partição de números** (*Number Partitioning Problem*), que é NP-difícil e tem aplicações em balanceamento de carga, alocação de tarefas e até criptografia.

O problema:

Dado um conjunto de números inteiros, queremos dividi-los em dois subconjuntos com somas o mais próximas possível. Exemplo:

$$S = [3, 1, 4, 2, 2]$$

Modelagem QUBO:

Definimos uma variável binária $x_i \in \{0,1\}$ para cada elemento $s_i \in S$, onde:

- $x_i=0$ → o número vai para o subconjunto A
- $x_i=1$ → o número vai para o subconjunto B

Queremos minimizar o quadrado da diferença entre as somas dos subconjuntos:

$$\text{Minimizar: } (\sum s_i \times (1 - 2x_i))^2$$

Expandindo e simplificando, obtemos a função objetivo QUBO:

$$\text{Minimizar: } x^t \times Q \times x$$

$$\text{Onde a matriz } Q \text{ é definida por: } Q_{ij} = 4 \times s_i \times s_j \quad (\text{para todos os pares } i, j)$$

Exemplo com dimod (D-Wave Ocean SDK)

O que é o dimod?

O **dimod** é o **núcleo matemático** da Ocean SDK da D-Wave. Ele fornece:

- Representações formais de modelos quadráticos (como QUBO e Ising);

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Estruturas de dados para manipular esses modelos;
- Interfaces para samplers (solvers) clássicos e quânticos;
- Ferramentas para compor, transformar e analisar problemas de otimização.

Etapa 1: Construção do modelo (BinaryQuadraticModel)

Tudo começa com a criação de um **Binary Quadratic Model (BQM)**, que representa a função objetivo:

```
import dimod
```

```
# Exemplo: minimizar E(x) = -x0 + x1 + 2x0x1
```

```
linear = {0: -1, 1: 1}
```

```
quadratic = {(0, 1): 2}
```

```
offset = 0.0
```

```
bqm = dimod.BinaryQuadraticModel(linear, quadratic, offset, vartype=dimod.BINARY)
```

Internamente, o `bqm` é representado como um **grafo ponderado**:

- Cada nó (variável) tem um peso linear.
- Cada aresta (par de variáveis) tem um peso quadrático.
- O offset é um termo constante.

Etapa 2: Escolha do sampler

O `dimod` não resolve nada por si só — ele **encaminha o modelo para um sampler**. Exemplo com o `SimulatedAnnealingSampler`:

```
sampler = dimod.SimulatedAnnealingSampler()
```

```
sampleset = sampler.sample(bqm, num_reads=100)
```

Esse sampler implementa **annealing clássico**:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Inicializa com uma solução aleatória.
- Aplica perturbações (flips de bits).
- Aceita ou rejeita com base em uma função de energia e temperatura (simulando resfriamento térmico).
- Repete o processo várias vezes para escapar de mínimos locais.

Você pode acessar os parâmetros internos:

```
sampleset.info # mostra metadados como tempo, temperatura, etc.
```

Etapa 3: Análise do resultado

O sampleset é um objeto que contém:

- As soluções (vetores binários);
- As energias associadas;
- A frequência com que cada solução apareceu.

```
for sample, energy in sampleset.data(['sample', 'energy']):
```

```
    print(sample, energy)
```

Internamente: como o `dimod` representa tudo?

- O `BinaryQuadraticModel` usa uma **estrutura de adjacência** para armazenar variáveis e seus vizinhos.
- Ele suporta operações simbólicas (como adição de modelos, escalonamento, fixação de variáveis).
- Ele pode ser convertido para formatos como QUBO, Ising, ou até exportado para JSON.
- **O que é o `dimod`, afinal?**
- Imagine que você tem um problema difícil, como dividir tarefas igualmente entre pessoas, organizar entregas com o menor custo, ou balancear recursos de uma empresa. Resolver isso manualmente ou por tentativa e erro leva séculos. O `dimod` é como uma calculadora inteligente que **pega esses problemas e os transforma em modelos matemáticos estruturados**, prontos para serem resolvidos por algoritmos de otimização.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil

www.ramanujan.institute | www.holosystemsquantum.com | www.equiverse.com.br | www.kiyosito.io



- Ele não é o “motor” em si — ele é o “**modelo da pista e do veículo**”. Você constrói o problema com ele e depois o envia para um “motorista” (chamado *sampler*) que vai buscar as melhores rotas/soluções.

Qual a grande sacada do `dimod`?

A sacada é representar o problema como uma equação com variáveis que só podem valer 0 ou 1 (sim ou não). Isso se chama **modelo binário quadrático**. Por quê?

Porque **muitos problemas do mundo real, por mais variados que pareçam, podem ser reescritos como: “qual a combinação de escolhas binárias que minimiza um certo custo?”**

Exemplos:

- Ligo ou desligo essa máquina?
- Atribuo esse item a este grupo ou ao outro?
- Escolho essa rota ou aquela?

Essas decisões são naturalmente binárias — e o `dimod` sabe montar a equação que representa isso.

E qual o truque para calcular mais rápido?

Aqui entra a mágica: o `dimod` não resolve por força bruta (testando todas as combinações possíveis). Em vez disso, ele usa uma técnica chamada **simulated annealing**, que imita o comportamento de materiais sendo resfriados na natureza.

Funciona assim:

1. Ele começa com uma solução aleatória (como uma chute inicial).
2. Depois faz pequenas mudanças e verifica se melhorou.
3. Se piorou, às vezes aceita — para não ficar preso em soluções ruins.
4. Vai “esfriando” aos poucos (literalmente reduzindo a chance de aceitar coisa pior).
5. No fim, fica só com as melhores soluções encontradas.

Esse processo é leve, adaptativo e **muito mais rápido do que testar tudo**, mesmo em computadores comuns.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Annealing, no contexto computacional, é uma metáfora emprestada da metalurgia. Quando um metal é aquecido a uma temperatura muito alta, seus átomos se movem livremente. Ao ser resfriado lentamente, eles começam a se organizar, buscando uma configuração mais estável e com menor energia interna. Se o resfriamento for gradual o suficiente, o material pode atingir uma estrutura cristalina ótima — o famoso estado de energia mínima global.

Inspirados por isso, os cientistas criaram o **simulated annealing**, um algoritmo que imita esse comportamento para resolver problemas de otimização. No início, o algoritmo permite mudanças aleatórias e até aceita soluções “piores” momentaneamente — como se estivesse em alta temperatura. Isso evita que ele fique preso em mínimos locais logo no começo. À medida que o “sistema esfria”, ele se torna mais seletivo, aceitando apenas mudanças que realmente levam a uma melhora. Com sorte (e tempo), encontra a melhor solução possível.

O **quantum annealing**, por sua vez, leva esse conceito a um outro nível. Em vez de simular o aquecimento e o resfriamento térmico, ele explora os efeitos da mecânica quântica — em especial o **tunelamento quântico**. Imagine que, em vez de tentar escalar uma montanha para sair de um vale (um mínimo local), o sistema “atravessa” a montanha, literalmente, por baixo. Esse efeito é exclusivo do mundo quântico e permite que o sistema escape de armadilhas que prenderiam algoritmos clássicos. Não é só sorte ou calor: é uma forma completamente nova de explorar o espaço de soluções.

Essa habilidade de evitar mínimos locais vem justamente daí — enquanto o annealing clássico depende de uma jornada bem planejada pelo relevo da função de custo, o quantum annealing tem o poder de teletransportar-se através de obstáculos. Ele é guiado por uma função Hamiltoniana que vai sendo suavemente transformada ao longo do tempo, conduzindo o sistema de um estado quântico conhecido (e simples) até o estado de energia mínima do problema original.

Na prática, isso significa que mesmo em problemas complexos, com milhares de soluções ruins cercando poucas boas, o sistema quântico tem uma chance real de escapar de becos sem saída onde algoritmos tradicionais — e até o simulated annealing — facilmente ficariam presos.

Vou buscar aqui ser mais didático:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



O que é uma função Hamiltoniana?

No contexto da física (mais especificamente na mecânica clássica e quântica), uma **Hamiltoniana** é uma função que descreve a **energia total de um sistema** — geralmente como a soma da energia cinética e potencial.

Se você tem um sistema com partículas, massas, forças... a Hamiltoniana atua como um "mapa de energia" que te permite prever como o sistema vai evoluir com o tempo. No mundo quântico, ela se torna um operador que governa a evolução dos estados quânticos de acordo com a equação de Schrödinger.

E por que ela é usada em quantum annealing?

Porque a ideia de quantum annealing é “conduzir” um sistema físico (ou simulado) para o **estado de menor energia possível** — e esse estado está **codificado na Hamiltoniana do problema**.

O truque genial é este:

1. Primeiro se define uma **Hamiltoniana simples** (chamada *Hamiltoniana inicial*) cujo estado fundamental (estado de menor energia) é fácil de encontrar. Por exemplo, todos os qubits em superposição igual.
2. Depois, lentamente, essa Hamiltoniana é **transformada** ao longo do tempo em uma outra — a **Hamiltoniana do problema** — cuja configuração de energia mínima representa a **solução ótima do problema que queremos resolver**.

Essa transição é regida por um princípio chamado **adiabático**: se a mudança for lenta o suficiente, o sistema “acompanha” esse caminho e permanece no estado fundamental o tempo todo.

Ao final do processo, você mede o sistema — e o resultado revela a combinação de variáveis (ou decisões) que resolve o problema com o menor custo possível.

E por que isso evita mínimos locais?

Porque o **tunelamento quântico** permite ao sistema "atravessar" barreiras de energia que, em métodos clássicos, precisariam ser escaladas. Mesmo que o caminho esteja cercado de vales

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



rasos (mínimos locais), o sistema quântico tem chance de emergir do outro lado — direto no vale mais profundo, o estado globalmente ótimo.

Esse processo é diferente de métodos clássicos que tentam escapar dos mínimos locais “pulando” por cima. O quantum annealing tenta **atravessar** diretamente, porque a descrição quântica da Hamiltoniana permite essa possibilidade física.

A função Hamiltoniana: origem e formalismo

Historicamente, a função Hamiltoniana surgiu no século XIX por William Rowan Hamilton como uma reformulação da mecânica clássica. Ela substitui a abordagem newtoniana baseada em forças por um formalismo centrado em energia.

A Hamiltoniana, denotada por:

$$H(q, p, t) = \sum [p_i \times \dot{q}_i] - L(q, \dot{q}, t)$$

representa a energia total de um sistema — onde:

- q_i são as coordenadas generalizadas (posição),
- p_i são os momentos conjugados (momento linear correspondente a cada q_i),
- L é a Lagrangiana do sistema, definida como energia cinética menos energia potencial.

As **equações de Hamilton** descrevem a evolução do sistema ao longo do tempo:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Na mecânica quântica, essa função se transforma em um operador que atua sobre o vetor de estado quântico e define sua evolução temporal pela equação de Schrödinger:

$$i \times \hbar \times \frac{d\psi}{dt} = \hat{H} \times \psi$$

O operador Hamiltoniano \hat{H} é a “alma” do sistema físico: ele dita os estados possíveis, suas energias e como evoluem.

Parte II — Hamiltonianas em otimização e quantum annealing

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Em computação quântica, a ideia é codificar um problema de otimização dentro da Hamiltoniana. O sistema começa em um estado simples, onde a solução é conhecida, e evolui lentamente para uma Hamiltoniana mais complexa que representa o problema. A fórmula de evolução é:

$$H(t) = (1 - s(t)) \times H_{\text{inicial}} + s(t) \times H_{\text{problema}}$$

onde:

- $H(t)$ é a Hamiltoniana total no instante t ,
- H_{inicial} é simples e tem estado fundamental conhecido,
- H_{problema} é construída com base no problema,
- $s(t)$ varia gradualmente de 0 a 1.

Segundo o **Teorema Adiabático**, se essa evolução for lenta o suficiente, o sistema permanece no seu estado de menor energia (estado fundamental). No final, a configuração de menor energia representa a **solução ótima do problema**.

Exemplo: QUBO → Hamiltoniana Ising

Considere o problema de minimizar a seguinte função QUBO:

$$E(x) = -x_0 + x_1 + 2 \times x_0 \times x_1$$

Queremos reescrevê-la em termos de variáveis de spin (z_0, z_1), com $z_i \in \{-1, +1\}$. Para isso, usamos a transformação:

$$x_i = (1 + z_i) / 2$$

Substituímos em $E(x)$, desenvolvemos a expressão e reagrupamos os termos para obter:

$$H = h_0 \times z_0 + h_1 \times z_1 + J_{01} \times z_0 \times z_1 + \text{constante}$$

com coeficientes específicos h_0, h_1, J_{01} definidos a partir da expansão algébrica. Essa nova função H é agora uma **Hamiltoniana no modelo de Ising**, que pode ser implementada fisicamente em máquinas de quantum annealing (como o D-Wave).

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



A solução do problema corresponde ao estado com menor valor de H — isto é, o **estado fundamental** do sistema.

A transição da formulação newtoniana (centrada em forças) para o formalismo hamiltoniano (centrado em energia) não foi apenas uma questão de reescrever equações: foi uma **mudança paradigmática na forma de pensar a dinâmica dos sistemas físicos**, com implicações profundas que iriam da teoria dos sistemas dinâmicos à mecânica quântica.

O contexto do século XIX e a motivação de Hamilton

William Rowan Hamilton (1805–1865) era um matemático e físico irlandês, originalmente interessado em **óptica geométrica e mecânica analítica**, e foi profundamente influenciado pelos trabalhos de Lagrange, que já havia formulado uma mecânica baseada em energia (a Lagrangiana). A grande sacada de Hamilton surgiu ao notar uma analogia entre os **raios de luz** em óptica e as **trajetórias de partículas** em mecânica.

Ele se perguntava: e se a evolução de um sistema físico (como o movimento de uma partícula) pudesse ser tratada como uma **propagação de energia** ao longo de uma trajetória no espaço de configurações, assim como os raios de luz seguem trajetórias minimizando o tempo?

Hamilton procurava uma formulação que **unificasse os princípios da mecânica com os da óptica** — um modelo universal, baseado em variação de energia e que revelasse as estruturas profundas do movimento, de forma independente do sistema de coordenadas utilizado.

Limitações da abordagem newtoniana

A formulação de Newton é poderosa, mas tem limitações — especialmente quando aplicada a sistemas complexos. Vamos considerar por que:

1. **Depende fortemente de forças explícitas:** para aplicar $F = m \times a$, você precisa conhecer a força resultante sobre cada corpo em termos vetoriais. Isso é fácil para corpos isolados, mas incrivelmente complicado em sistemas com muitas restrições ou interações indiretas.
2. **Coordenação complicada:** o formalismo vetorial de forças exige referência a sistemas inerciais e coordenadas cartesianas. Sistemas com geometrias não euclidianas (como braços articulados, corpos sobre superfícies curvas, sistemas orbitais) exigem “malabarismos” de forças e projeções.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



3. **Não revela simetrias naturais:** a abordagem newtoniana muitas vezes oculta simetrias (como conservação de momento angular, energia ou momento linear), pois trata o sistema de forma operacional, não estrutural.

Em resumo: o formalismo de forças funciona, mas **não escala bem** para sistemas com muitos graus de liberdade, vínculos, geometrias complexas ou que envolvam campos, não partículas.

A ideia central de Hamilton: energia como “função geradora”

Ao reformular a mecânica, Hamilton propôs substituir o foco nas forças por uma função escalar que encapsula **toda a energia do sistema** — a Hamiltoniana.

Ele parte da Lagrangiana, definida como:

$$L(q, \dot{q}, t) = \text{Energia Cinética} - \text{Energia Potencial}$$

e define os **momentos conjugados** como:

$$p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$$

A Hamiltoniana é então construída como a transformada de Legendre da Lagrangiana:

$$H(q, p, t) = \sum [p_i \times \dot{q}_i] - L(q, \dot{q}, t)$$

Este é o primeiro passo que revela **um novo espaço geométrico**: o espaço de fase (q, p) . Ao invés de trabalhar com posições e velocidades (q, \dot{q}) , o Hamiltonianismo passa a descrever a dinâmica por meio das variáveis posição e momento (q, p) , onde o tempo é um parâmetro externo.

Por que essa mudança é revolucionária?

1. **Universalidade:** O formalismo hamiltoniano funciona para qualquer sistema — desde um pêndulo até órbitas planetárias, circuitos elétricos, campos contínuos, sistemas relativísticos e, claro, a mecânica quântica.
2. **Geometria do espaço de fase:** Ao tratar posições e momentos como coordenadas de um espaço unificado, Hamilton introduz a base para o que hoje chamamos de **estrutura**

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



simplética, abrindo o caminho para a teoria moderna dos sistemas dinâmicos e caos determinístico.

3. **Equações de primeira ordem:** As equações diferenciais newtonianas são de segunda ordem (envolvem aceleração). A formulação hamiltoniana expressa a evolução do sistema como um **sistema de equações diferenciais de primeira ordem**, acopladas:

$$\mathbf{dq}_i/dt = \partial H/\partial p_i \quad \mathbf{dp}_i/dt = -\partial H/\partial q_i$$

Essa estrutura revela simetrias e invariantes de forma clara — por exemplo, se a Hamiltoniana não depende explicitamente de uma coordenada, o momento conjugado a ela é conservado.

4. **Conexão direta com a mecânica quântica:** No século XX, a mecânica quântica nasceu diretamente do formalismo hamiltoniano. A energia total se tornou um operador \hat{H} , e suas equações passaram a regrer o comportamento dos estados quânticos:
- 5.

$$i \times \hbar \times d\psi/dt = \hat{H} \times \psi$$

Ou seja, o salto da física clássica para a quântica **não teria sido possível na linguagem de forças de Newton**. O formalismo hamiltoniano é o verdadeiro “código-fonte” por trás do quantum.

Conclusão: o que Hamilton sacou

Hamilton percebeu que, para entender a dinâmica de sistemas físicos — especialmente sistemas complexos, com múltiplas interações, simetrias ocultas e geometrias não triviais — **não bastava pensar em forças**. Era preciso pensar em energia como princípio organizador, e em estruturas matemáticas mais ricas do que vetores e projeções.

Ele criou não apenas um método de cálculo, mas uma nova linguagem da física — que revelou o espaço de fase, abriu caminho para a física moderna, e cujo legado vai da teoria de campos clássicos ao algoritmo de Grover.

Agora vou contar-lhes essa é uma das histórias mais intensas, quase dramáticas, da física moderna. O retorno à Hamilton — à sua ideia de uma função que encapsula toda a energia do sistema — não foi um passeio acadêmico: foi uma **necessidade existencial**, uma

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



resposta ao colapso da física clássica frente ao comportamento inexplicável da matéria no nível atômico. Vamos mergulhar?

A tragédia da física clássica no início do século XX

No final do século XIX, a física parecia completa: as equações de Newton, Maxwell e Hamilton pareciam explicar tudo. Mas logo vieram sinais perturbadores:

- O espectro da radiação de corpo negro (que levou à "catástrofe do ultravioleta");
- O efeito fotoelétrico, que não podia ser explicado por ondas clássicas;
- O comportamento dos elétrons em átomos, que deveriam espiralar e colapsar segundo o eletromagnetismo clássico.

Esses fenômenos gritavam por uma nova estrutura conceitual.

A revolta quântica: quem retomou Hamilton?

A retomada do formalismo de Hamilton na física quântica aconteceu em **duas frentes independentes**, quase simultaneamente, entre 1924 e 1926. Ambas se basearam na noção de **energia como operador** e **sistemas dinâmicos descritos por Hamiltonianas**. Mas a motivação não foi reverenciar Hamilton: foi tentar descrever corretamente o mundo atômico.

1. Werner Heisenberg e a mecânica matricial (1925)

Heisenberg, trabalhando sob influência de Max Born e Pascual Jordan, deu um passo radical: abandonou completamente os conceitos clássicos de trajetória e posição. Ele considerou apenas **quantidades observáveis**, como frequências e intensidades de radiação emitida por átomos.

Ele organizou essas quantidades em **tabelas de transição**, que foram interpretadas por Born como **matrizes**. A multiplicação dessas matrizes era **não comutativa**, e foi aqui que a analogia com mecânica clássica apareceu: a não comutatividade lembrava os **parênteses de Poisson**, que na mecânica hamiltoniana expressam relações fundamentais como:

$$\{q, p\} = 1$$

Isso levou à formulação das **relações de comutação quântica**:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$$

— que é, em essência, uma **versão quantizada das equações de Hamilton**. A Hamiltoniana, agora um operador \hat{H} , passa a reger a evolução temporal do sistema:

$$\frac{dA/dt}{dt} = (i/\hbar) \times [\hat{H}, A] + (\partial A / \partial t)$$

Essa é a **versão quântica das equações de Hamilton**, escrita em termos de operadores e comutadores.

2. Erwin Schrödinger e a mecânica ondulatória (1926)

Independentemente, Schrödinger, influenciado pela ideia de Louis de Broglie de que partículas tinham natureza ondulatória, buscava uma equação que governasse a evolução dessas ondas.

Ele se inspirou diretamente na **analogia entre a óptica e a mecânica clássica**, notada por Hamilton décadas antes. Ao considerar a Hamiltoniana clássica de uma partícula ($H = p^2/2m + V$), e substituindo o momento p por um operador diferencial ($\hat{p} = -i\hbar\nabla$), ele obteve:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

e, com o tempo, escreveu a equação completa:

$$i\hbar \times (\partial\psi / \partial t) = \hat{H}\psi$$

Essa é a **equação de Schrödinger**, em que \hat{H} é o operador hamiltoniano, e ψ é a função de onda (estado do sistema). Novamente, a estrutura da mecânica de Hamilton está ali — mas agora no âmago do mundo quântico.

Um esforço coletivo... e angustiado

Não houve um "grupo de estudo" unificado, mas sim **uma série de mentes brilhantes reagindo ao colapso do paradigma clássico**. Além de Heisenberg e Schrödinger, contribuíram decisivamente:

- **Paul Dirac**, que formalizou a analogia entre parênteses de Poisson e comutadores, e unificou as visões matricial e ondulatória;
- **Max Born**, que interpretou probabilisticamente a função de onda;

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- **Pascual Jordan**, que ajudou a desenvolver a álgebra de operadores;
- **John von Neumann**, que rigorosamente reformulou tudo em termos de operadores auto-adjuntos em espaços de Hilbert.

Todos eles, direta ou indiretamente, precisaram voltar ao formalismo de Hamilton para encontrar solidade matemática e estrutural.

A motivação: desespero criativo

O que impulsionou esses cientistas foi uma mistura de frustração e ousadia. Eles se viam diante de fenômenos que contradiziam tudo o que a física clássica havia ensinado, e não havia manual. Foram obrigados a abandonar trajetórias, causas deterministas e até a própria noção de realidade objetiva.

A Hamiltoniana oferecia uma base segura: ela já era uma linguagem de sistemas dinâmicos, uma máquina geradora de equações de movimento. Ao promovê-la de função clássica a **operador quântico**, os físicos encontraram o eixo em torno do qual o universo quântico poderia finalmente ser descrito.

Vou traçar aqui genealogia do pensamento hamiltoniano até os alicerces da física moderna — costurando as ideias que nasceram na mecânica clássica e floresceram até alcançar a teoria quântica de campos.

De Hamilton à Mecânica Quântica: a semente

A função Hamiltoniana nasce no século XIX como uma reinterpretação da mecânica clássica, centrada em energia. Essa reformulação revela algo profundo: que o espaço de fase (posição e momento) e suas transformações contêm simetrias fundamentais que regem a natureza. Mas essa beleza matemática ficou, por décadas, confinada ao reino clássico.

Com a chegada dos fenômenos atômicos inexplicáveis no início do século XX, essa linguagem foi “ressuscitada” — primeiro como uma forma de entender a **dinâmica quântica de partículas discretas** (Schrödinger e Heisenberg), depois como a espinha dorsal dos **operadores dinâmicos da mecânica quântica** (Dirac).

Da Mecânica Quântica à Eletrodinâmica Quântica (QED)

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



A teoria quântica evoluiu da descrição de partículas isoladas para a de sistemas com múltiplas partículas e interações, principalmente com campos.

A Hamiltoniana, agora como **operador densidade de energia**, passou a incluir não só partículas (como elétrons e pósitrons), mas também campos (como o campo eletromagnético). Isso gerou uma necessidade de quantizar não mais variáveis discretas, mas **campos inteiros** — nascendo aí a **teoria quântica de campos**.

Heisenberg, Dirac e Pauli foram os primeiros a tentar essa quantização dos campos. Mas foi com **Feynman, Schwinger, Tomonaga e Dyson**, nas décadas de 1940 e 1950, que a **Eletrodinâmica Quântica (QED)** foi construída com sucesso, incluindo:

- Hamiltonianas para campos de fótons e férmons;
- Diagramas de Feynman como ferramenta para representar interações no espaço-tempo;
- Técnicas de renormalização para lidar com infinitos.

Da QED ao Modelo Padrão: o formalismo se expande

A estrutura Hamiltoniana continuou sendo fundamental na construção do **Modelo Padrão** da física de partículas, que descreve todas as interações conhecidas (exceto a gravidade) como teorias quânticas de campos baseadas em simetrias de calibre.

A função Hamiltoniana, nesse cenário, é escrita a partir de:

- Densidades lagrangianas quantizadas;
- Momentos conjugados definidos no espaço-tempo;
- Operadores de criação e aniquilação.

Nomes como **Glashow, Weinberg, Salam, Higgs e Gell-Mann** continuaram essa genealogia, articulando campos com estruturas internas de simetria ($SU(2)$, $SU(3)$, $U(1)$).

A Hamiltoniana torna-se cada vez mais complexa, mas continua o coração matemático que determina a evolução dos estados quânticos — agora em **espaços de Hilbert infinitodimensionais**.

Teoria Quântica de Campos e Gravidade Quântica

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Hoje, a Hamiltoniana ainda é central na busca pela unificação da mecânica quântica com a relatividade geral. Em abordagens como:

- **Loop Quantum Gravity**, que busca quantizar diretamente o espaço-tempo;
- **Teoria de cordas**, onde a Hamiltoniana descreve vibrações de objetos unidimensionais (cordas) em espaços de múltiplas dimensões.

Mesmo com tensões conceituais entre espaço-tempo contínuo e quântico, **todas essas tentativas se baseiam no princípio hamiltoniano: estados evoluem conforme operadores de energia agindo sobre eles.**

Hamilton como espinha dorsal

A função que Hamilton concebeu como um mecanismo matemático elegante para descrever raios de luz e trajetórias de planetas se revelou, ao longo de dois séculos, **a linguagem universal da física fundamental.**

De átomos a partículas elementares, de oscilações a campos quânticos e até a teias cósmicas, a Hamiltoniana é a entidade que responde à pergunta central da física:

> "Qual é a energia total do sistema — e como ela transforma o estado da realidade ao longo do tempo?"

E isso é nada menos do que o roteiro do universo.

Vamos ver agora como a estrutura hamiltoniana é usada hoje em algoritmos variacionais para simular moléculas e materiais, especialmente em dispositivos quânticos de curto prazo (NISQ).

O problema: simular moléculas com precisão quântica

A estrutura eletrônica de uma molécula é descrita por uma **Hamiltoniana molecular**, que representa a energia total do sistema (elétrons + núcleos). Essa Hamiltoniana é escrita como uma soma de termos de operadores de Pauli, por exemplo:

$$H = c_0 \times I + c_1 \times Z_0 + c_2 \times Z_1 + c_3 \times Z_0 Z_1 + \dots$$

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



O objetivo é encontrar o **estado fundamental** dessa Hamiltoniana — ou seja, o menor valor esperado de energia, que corresponde à configuração eletrônica mais estável da molécula.

A solução: algoritmos variacionais (como o VQE)

O **Variational Quantum Eigensolver (VQE)** é um algoritmo híbrido (quântico-clássico) que resolve esse problema da seguinte forma:

1. **Escolhe-se um circuito quântico parametrizado** (ansatz), que gera um estado quântico $|\psi(\theta)\rangle$ a partir de parâmetros clássicos θ .
2. **Calcula-se a energia esperada** desse estado com relação à Hamiltoniana:

$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$$

3. **Um otimizador clássico** ajusta os parâmetros θ para minimizar $E(\theta)$.

Esse processo é iterativo: o circuito é executado várias vezes com diferentes θ até que a energia mínima seja encontrada.

Aplicações reais

- **Moléculas pequenas** como H_2 , LiH , BeH_2 já foram simuladas com sucesso em dispositivos quânticos reais usando VQE.
- **Materiais** com interações eletrônicas complexas (como óxidos de metais de transição) estão sendo estudados com variantes do VQE, como o **adaptive VQE** e o **unitary coupled cluster ansatz**.
- O artigo Variational Quantum Hamiltonian Engineering mostra como reduzir a complexidade da Hamiltoniana molecular minimizando sua norma de Pauli, o que reduz o número de medições necessárias.

Pessoal, agora vamos tocar em um ponto essencial — e frequentemente mal compreendido — no desenvolvimento de algoritmos quânticos. Apesar de estarmos lidando com fenômenos de natureza física, como superposição, interferência e emaranhamento, a **linguagem operacional da computação quântica é fundamentalmente a álgebra linear**. Vamos construir essa explicação de forma progressiva e rigorosa.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



O que é Álgebra Linear?

Álgebra linear é o ramo da matemática que estuda **vetores, espaços vetoriais, matrizes e transformações lineares**. Em essência, trata-se do estudo de como sistemas se comportam quando operamos sobre eles com regras lineares — isto é, operações que preservam adição e multiplicação por escalares.

Por que isso é relevante? Porque os estados quânticos e as operações quânticas **são vetores e operadores lineares**.

No modelo de circuito quântico:

- O **estado quântico** de um sistema com n qubits é representado por um vetor coluna de dimensão 2^n com entradas complexas (um vetor no espaço de Hilbert \mathbb{C}^{2^n});
- As **operações sobre os qubits** (portas lógicas quânticas) são representadas por **matrizes unitárias** que agem linearmente sobre esses vetores;
- A **medição** é descrita por operadores projetores (também definidos por matrizes).
- **Como isso conecta com Hamilton?**
- A função Hamiltoniana, quando usada como um **operador sobre estados quânticos**, é expressa como uma **matriz hermitiana** (isto é, igual à sua conjugada transposta). Quando dizemos que um algoritmo de otimização quântica “minimiza a energia de uma Hamiltoniana”, estamos realmente dizendo:
 - > Encontre o autovetor da matriz H correspondente ao menor autovalor.
 - Ou seja: trata-se de um problema **espectral**, um problema de álgebra linear por excelência. O mesmo ocorre com algoritmos como o QAOA, VQE ou estimadores de fase (Quantum Phase Estimation): todos envolvem **autovalores, autovetores e simulações de operadores lineares**.
- A mecânica quântica, no seu núcleo matemático, é inteiramente expressa com estrutura vetorial — espaços de Hilbert, produtos internos, operadores lineares, decomposições espectrais. A física fornece a interpretação, mas a álgebra linear fornece a operacionalidade.

O que é básico em álgebra linear para algoritmos quânticos?

Aqui está o que um desenvolvedor de algoritmos quânticos (ou quantum-inspired) precisa dominar como pré-requisito:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- **Vetores e normas:** entender amplitudes e probabilidades (ex: $\|\psi\| = 1$).
- **Produto interno e ortogonalidade:** crucial para distinguir estados (ex: $\langle \phi | \psi \rangle = 0$ se ortogonais).
- **Matrizes unitárias:** todas as operações quânticas são unitárias (ex: $U^\dagger U = I$).
- **Matrizes hermitianas:** representam observáveis físicos e Hamiltonianas.
- **Autovalores e autovetores:** a medição é uma projeção sobre autovetores.

E o que é avançado — e indispensável para escrever algoritmos quânticos?

Para construir algoritmos eficientes, generalizáveis e que escapem do “copiar e colar” de circuitos genéricos, é essencial dominar:

- **Decomposição espectral (teorema espectral):** saber que toda matriz hermitiana pode ser diagonalizada em uma base ortonormal de autovetores.
- **Álgebra de operadores (tensores de Pauli, produtos tensoriais):** toda Hamiltoniana local é expressa como soma de produtos de operadores de Pauli.
- **Transformadas unitárias parametrizadas:** fundamentais em algoritmos variacionais (ex: $U(\theta) = e^{\{-iH\theta\}}$).
- **Simulação de operadores exponenciais (Trotter-Suzuki):** para decompor e simular dinamicamente evoluções quânticas.
- **Codificação eficiente (sparse matrices, low-rank approximations):** para representar operadores em escalas viáveis.

No caso dos algoritmos *quantum-inspired*?

Mesmo quando executamos tudo em hardware clássico, se o algoritmo é inspirado em modelos quânticos (como tensor networks, quantum walks, ou heurísticas baseadas em tunneling), ele ainda se fundamenta em representações vetoriais, decomposições matriciais e manipulações lineares — só que em ambientes simulados.

Frameworks como o Qiskit, PennyLane ou Tequila, e mesmo bibliotecas como o dimod, são essencialmente mecanismos de álgebra linear acelerados e organizados para modelar esses sistemas.

Pessoal, agora vou montar um percurso sólido de estudos em álgebra linear com foco em aplicações quânticas, que é como desenhar a base de um foguete: tudo o que vem depois

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



depende da estrutura estar firme. Aqui está uma trilha progressiva e bem conectada com algoritmos quânticos e *quantum-inspired*:

1. Fundamentos Essenciais

Objetivo: entender vetores, operações básicas e interpretação geométrica.

Temas:

- Vetores em \mathbb{R}^n e \mathbb{C}^n , norma e distância
- Produtos escalar e vetorial
- Matriz como operador linear
- Transformações lineares simples (reflexão, rotação, projeção)

Dica prática: visualize vetores e matrizes com ferramentas como GeoGebra ou Desmos para fortalecer a intuição geométrica.

2. Espaços Vetoriais e Subespaços

Objetivo: compreender o "mundo onde os vetores vivem".

Temas:

- Espaços vetoriais sobre \mathbb{R} e \mathbb{C}
- Subespaços, base, dimensão
- Dependência e independência linear
- Mudança de base e coordenadas

Aplicação quântica: estados quânticos vivem em espaços de Hilbert, que são essencialmente espaços vetoriais complexos com produto interno.

3. Operadores Lineares e Representação Matricial

Objetivo: entender como "aplicar ações" sobre vetores.

Temas:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Matriz como operador
- Composição de transformações
- Inversibilidade
- Operadores auto-adjuntos e unitários (começo do vocabulário quântico)

4. Autovalores e Autovetores

Objetivo: aprender a "descompor" operadores — base dos algoritmos quânticos.

Temas:

- Cálculo e interpretação geométrica de autovalores
- Diagonalização
- Aplicação a dinamização de sistemas
- Teorema espectral para matrizes hermitianas

Aplicação quântica: estados estáveis de um sistema são autovetores da Hamiltoniana, e os autovalores são as energias possíveis.

Decomposições e Estruturas Avançadas

Objetivo: construir ferramentas para simular e otimizar algoritmos.

Temas:

- Decomposição espectral (Spectral Theorem)
- Decomposição de Schmidt e singular value decomposition (SVD)
- Espaços tensoriais (produto tensorial)
- Operadores de Pauli e álgebra de matrizes quânticas
- Projeções, operadores densos e traço (para estados mistos)

6. Aplicação direta em algoritmos quânticos

Objetivo: traduzir o aprendizado em codificação e projeto de algoritmos.

Temas:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Simulação de Hamiltonianas como matrizes
- Codificação de QUBOs em matrizes binárias simétricas
- Portas quânticas como operadores unitários
- Circuitos parametrizados (ansätze) com decomposição em portas

Ferramentas recomendadas:

- Qiskit (IBM)
- PennyLane (Xanadu)
- QuTiP (para simulação de operadores contínuos)
- NumPy, SciPy, JAX para álgebra linear em CPU/GPU

Agora vou dar-lhes algo que – para mim – é um deleite e uma oportunidade rara de ir fundo em matemática, física quântica, teoria da computação e codificação algorítmica — tudo em uma jornada cuidadosamente comentada, passo a passo, como se abrissemos uma partitura da mecânica computacional.

Vamos criar um pequeno **algoritmo quantum-inspired** — isto é, um algoritmo clássico, mas baseado em princípios da computação quântica — para resolver uma instância simplificada de **partição de números** (Number Partitioning), um problema clássico **NP-difícil**. Faremos isso com uma heurística inspirada em **superposição e interferência quântica**, mas executada em **CPU tradicional**.

Ao longo do código, pararemos a cada linha para discutir conceitos cruciais em **álgebra linear**, **estrutura de Hamilton**, e especialmente o espectro de complexidade P vs NP.

Vamos começar com o código — e logo após cada linha, versaremos longamente sobre seu significado.

```
import numpy as np
```

```
from itertools import product
```

Comentário técnico e conceitual:

- numpy (abreviação de *Numerical Python*) é a principal biblioteca de álgebra linear em Python. Aqui começamos a trabalhar no domínio dos **vetores e matrizes**, os tijolos fundamentais da computação quântica.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- A função `product` do módulo `itertools` nos permitirá gerar superposições simuladas de estados binários — algo que um circuito quântico faria com portas de Hadamard. Mas aqui, faremos isso classicamente.

Essa é a primeira ponte do *quantum-inspired*: gerar “espaços de estado” exponenciais em estrutura — mas operá-los com inteligência combinatorial para evitar custo real exponencial.

```
def energy(state, weights):
```

```
    total = np.dot(state, weights)  
  
    return abs(total)
```

Comentário matemático e físico:

- Aqui, `state` é um vetor binário com entradas $\{-1, +1\}$, representando duas partições (dois subconjuntos). Isso remete diretamente ao **modelo de Ising**, em que cada spin pode apontar "para cima" (+1) ou "para baixo" (-1).
- O produto escalar `np.dot(state, weights)` é a aplicação básica de **produto interno**, uma operação central em espaços vetoriais com estrutura inner product (produto interno). Em álgebra linear, isso define norma, distância e projeção.
- O valor absoluto da soma é interpretado como a “energia” da configuração: quanto mais equilibrada a partição (isto é, mais próxima a soma de zero), menor a energia. Isso modela o **estado fundamental** da Hamiltoniana do sistema.

```
def quantum_inspired_partition(weights):
```

```
    n = len(weights)  
  
    best_state = None  
  
    min_energy = float('inf')
```

Comentário sobre complexidade e teoria da computação:

- O problema de particionar pesos em dois conjuntos com somas iguais é **NP-difícil**: não se conhece algoritmo polinomial que resolva todos os casos, e acredita-se que ele não exista.
- Isto nos leva à clássica questão **P vs NP**:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Classe **P**: problemas resolvíveis em tempo polinomial (tempo de execução cresce como n , n^2 , etc.).
- Classe **NP**: problemas cujas soluções podem ser *verificadas* em tempo polinomial.
- Problemas **NP-difíceis** são, no sentido técnico, tão difíceis quanto os problemas mais difíceis em NP. Eles podem não estar em NP (por exemplo, problemas de otimização com soluções iracionais), mas todo problema em NP pode ser reduzido a eles em tempo polinomial.
- Se algum problema NP-difícil for resolvível em tempo polinomial, então **P = NP** — o que alteraria profundamente a criptografia, a lógica, e a ciência computacional em geral.
- Neste trecho do código, `min_energy` será nosso substituto pragmático para o "estado fundamental" de uma **Hamiltoniana clássica**, que representaremos implicitamente.

for state in product([-1, 1], repeat=n):

```
e = energy(state, weights)
```

```
if e < min_energy:
```

```
    min_energy = e
```

```
    best_state = state
```

Comentário avançado (superposição, interferência, busca):

- A função `product([-1, 1], repeat=n)` gera todas as possíveis 2^n configurações de spin (superposição binária). Isso simula o que um computador quântico faria de forma nativa com estados de qubits.
- Em hardware quântico real, essa superposição é física, paralela e massivamente interferente: os caminhos computacionais se cancelam ou reforçam conforme a estrutura do problema. Aqui, simulamos isso **explícita e exaustivamente**, o que, embora instrutivo, tem custo exponencial — e por isso é adequado apenas para instâncias pequenas.
- O teste `if e < min_energy` implementa uma busca por **mínimo global**, semelhante à busca do **estado fundamental da Hamiltoniana** que um algoritmo como VQE buscaria minimizar.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- Do ponto de vista da teoria de algoritmos, estamos realizando **busca exaustiva** — que está em **$O(2^n)$** — característica da **complexidade exponencial** dos problemas NP-difíceis.

```
return best_state, min_energy
```

Comentário semântico:

- A resposta retorna a configuração binária que melhor equilibra os subconjuntos (isto é, minimiza o total da soma ponderada).
- Esse é o equivalente, no mundo da física quântica, a **medir o estado final do sistema após evoluí-lo pela Hamiltoniana do problema**. Em quantum annealing, esse mínimo seria atingido por tunelamento quântico e evolução adiabática.

Demonstração:

```
pesos = [3, 1, 4, 2, 2]
```

```
estado, energia = quantum_inspired_partition(pesos)
```

```
print(f"Melhor configuração: {estado}")
```

```
print(f"Diferença mínima entre subconjuntos: {energia}")
```

Conclusão filosófico-matemática:

Embora este algoritmo não seja eficiente para n grande (por motivos de complexidade), ele é **um microcosmo perfeito do que torna a computação quântica promissora**: sua habilidade natural de operar sobre vetores complexos de alta dimensão, aplicando operadores lineares unitários (portas quânticas), evoluindo via Hamiltonianas e colapsando probabilisticamente para o estado mínimo.

Mas em última instância, **sem álgebra linear, nem a física quântica nem os algoritmos que dela se inspiram seriam operacionalizáveis**. Toda a transformação de estados, toda medição, toda sobreposição é uma questão vetorial e linear.

Agora que desenvolvemos um algoritmo *quantum-inspired* básico para partição de números e exploramos cada linha em profundidade, podemos elevar a complexidade do modelo.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



A proposta agora é transformar aquele algoritmo exaustivo em **um algoritmo variacional com inspiração quântica**, similar ao **VQE (Variational Quantum Eigensolver)**, mas **implementado em CPU clássica**. Vamos não apenas escrever o algoritmo, mas detalhar cada conceito subjacente — em álgebra linear, otimização, teoria de operadores e estruturas espectrais.

O objetivo

Queremos encontrar, para uma dada função energia $E(x)$, o mínimo global. Como a função está definida sobre vetores binários, nosso espaço de busca é discreto. Mas vamos **relaxar** esse espaço para o contínuo — e isso abre caminho para técnicas inspiradas em métodos variacionais da mecânica quântica.

A estratégia: algoritmo variacional

Em vez de explorar explicitamente todas as combinações (o que custa tempo exponencial), construiremos um "**estado quântico parametrizado**" que simula uma superposição de possibilidades, e depois **otimizaremos seus parâmetros** clássicos usando gradientes para minimizar a energia esperada.

Parte 1: Preparar o ansatz

Um ansatz é uma aproximação estruturada, com parâmetros ajustáveis. No VQE real, ele é construído como um circuito com portas $U(\theta)$, e aqui representaremos um vetor de probabilidades (ou amplitudes) sobre cada estado binário.

```
import numpy as np

def initialize_ansatz(n, theta):
    """Retorna uma distribuição de probabilidade suave com base em parâmetros contínuos."""
    amplitudes = np.array([np.prod(np.cos(theta[i]) if bit == 0 else np.sin(theta[i])) for i, bit in enumerate(format(k, f'0{n}b'))])
    for k in range(2**n)]
```

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



```
return amplitudes / np.linalg.norm(amplitudes)
```

Explicação matemática (didática e detalhada):

- **Vetores estado:** em mecânica quântica, o estado de n qubits é um vetor de dimensão 2^n , com componentes complexos normados. Aqui construímos um vetor real (por simplicidade), onde cada componente é determinado por uma função das amplitudes $\cos(\theta_i)$, $\sin(\theta_i)$ — simulando a aplicação de portas rotacionais parametrizadas.
- **Ansatz e espaço vetorial:** estamos definindo um vetor $\psi(\theta) \in \mathbb{R}^{2^n}$. Esse espaço de vetores (com produto interno canônico) é um **espaço de Hilbert real**.
- **Normalização:** garantimos que $\|\psi(\theta)\|^2 = 1$, o que imita a interpretação probabilística de estados quânticos.
- A complexidade computacional dessa função é $O(n \times 2^n)$ — exponencial no número de qubits. Mas o *quantum-inspired trick* é manter n pequeno e otimizar rapidamente.

Parte 2: Definir a Hamiltoniana

Nossa função energia será definida como um **operador diagonal**, porque o problema de partição é expressável assim: cada vetor base $|x\rangle$ tem uma energia específica.

```
def build_hamiltonian(weights):
    n = len(weights)
    energies = []
    for k in range(2**n):
        bits = np.array([int(b) for b in format(k, f'0{n}b')])
        spins = 2 * bits - 1 # de {0,1} para {-1,+1}
        energy = abs(np.dot(spins, weights))
        energies.append(energy)
    return np.array(energies)
```

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil

www.ramanujan.institute | www.holosystemsquantum.com | www.equiverse.com.br | www.kiyosito.io



Explicação conceitual:

- Aqui definimos **H** como um operador **diagonal** no espaço computacional: $H = \text{diag}(\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{\lfloor 2^n - 1 \rfloor})$, onde ε_k é a energia de cada estado binário possível.
- Isso modela uma Hamiltoniana no **representação computacional**, onde a matriz é diagonal na base $|x\rangle$.
- **Diagonalização e base preferida**: na mecânica quântica, diagonalizar um operador significa encontrar uma base onde ele age multiplicativamente. Como estamos em uma base própria, a ação é apenas multiplicar o vetor estado componente a componente.

Parte 3: Calcular energia esperada e minimizar

Agora definimos a energia esperada (esperança de Hamiltoniana sobre o estado parametrizado), e aplicamos uma rotina clássica de otimização.

```
def expected_energy(amplitudes, hamiltonian):
    probabilities = amplitudes**2
    return np.dot(probabilities, hamiltonian)
```

Fundamentação matemática:

- Essa é a fórmula central da mecânica quântica: $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle = \sum_k |\psi_k(\theta)|^2 \times \varepsilon_k$
- É a esperança matemática de um operador diagonal sobre um vetor estado.
- **Complexidade computacional**: $O(2^n)$, mas vetorial, simples, paralelizável e eficiente para pequenos n.

Parte 4: Otimização clássica (variacional)

Vamos usar um otimizador de descida de gradiente (simplificado) para ajustar os parâmetros θ de forma a minimizar a energia esperada.

```
def optimize(weights, epochs=100, lr=0.1):
    n = len(weights)
    hamiltonian = build_hamiltonian(weights)
```

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



```
theta = np.random.uniform(0, np.pi/2, size=n)

for epoch in range(epochs):
    amplitudes = initialize_ansatz(n, theta)
    energy = expected_energy(amplitudes, hamiltonian)

    # Gradiente via diferença finita
    grad = np.zeros_like(theta)
    epsilon = 1e-6
    for i in range(n):
        shift = np.zeros_like(theta)
        shift[i] = epsilon
        amp_plus = initialize_ansatz(n, theta + shift)
        amp_minus = initialize_ansatz(n, theta - shift)
        e_plus = expected_energy(amp_plus, hamiltonian)
        e_minus = expected_energy(amp_minus, hamiltonian)
        grad[i] = (e_plus - e_minus) / (2 * epsilon)

    theta -= lr * grad
    print(f'Iteração {epoch}: energia = {energy:.5f}')

return theta, energy
```

Explicações cruzadas (matemática, física, computação):

- θ é o vetor de parâmetros do ansatz, similar aos parâmetros de rotação em portas $Ry(\theta)$ em um circuito quântico.
- O algoritmo implementa uma **descida de gradiente**, buscando minimizar a função $E(\theta)$. O gradiente é calculado numericamente via diferença finita — uma técnica elementar, mas eficaz.
- Isso é análogo ao **VQE**, que combina circuitos parametrizados com otimizadores clássicos.
- A complexidade do loop é dominada por $O(n \times 2^n)$, devido à simulação do ansatz. Mas em sistemas pequenos ou com restrições, isso é gerenciável — o mesmo espírito de heurística quantum-inspired.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Agora vamos dar um salto ousado: vamos projetar uma **Hamiltoniana quântica para um sistema simples**, e então usar uma **rede neural como função de onda variacional**, em um framework inspirado no **Variational Monte Carlo (VMC)**.

Prepare-se — vamos combinar:

- física quântica (Hamiltonianas, estados fundamentais),
- álgebra linear (operações vetoriais e espectrais),
- estatística (amostragem de Monte Carlo),
- aprendizado de máquina (redes neurais feedforward),
- e teoria computacional (otimização numérica em espaços vetoriais complexos).

Objetivo

Nosso objetivo é, dado um sistema físico descrito por uma Hamiltoniana \hat{H} , encontrar seu estado fundamental $|\psi_0\rangle$, ou seja, o vetor unitário (normalizado) que minimiza a energia esperada do sistema:

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

A abordagem de **Variational Monte Carlo (VMC)** não exige conhecer todos os autovalores nem diagonalizar \hat{H} . Em vez disso, propomos uma família de funções de onda $\psi_t(x)$, parametrizadas por um vetor θ , e otimizamos θ de forma a minimizar a energia esperada por meio de amostragem estocástica:

$$E[\theta] = (\sum_x |\psi_t(x)|^2 \times E_{\text{loc}}(x)) / (\sum_x |\psi_t(x)|^2)$$

Nessa equação, o termo $E_{\text{loc}}(x)$ — chamado de energia local — é definido como:

$$E_{\text{loc}}(x) = (\sum_{x'} H(x, x') \times \psi_t(x')) / \psi_t(x)$$

Essa estrutura nos permite estimar o valor esperado da energia mesmo quando a Hamiltoniana não é diagonal, desde que saibamos calcular os elementos não nulos $H(x, x')$.

Passo 1: Projetar a Hamiltoniana (modelo de Ising com campo transversal)

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Selecionamos como modelo a Hamiltoniana de Ising unidimensional com condições de contorno periódicas e campo magnético transversal:

$$\hat{H} = -J \times \sum_i \sigma_z(i) \times \sigma_z(i+1) - h \times \sum_i \sigma_x(i)$$

Onde:

- $\sigma_z(i)$ é o operador de Pauli Z atuando no sítio i (mede spin ao longo do eixo z),
- $\sigma_x(i)$ é o operador de Pauli X (flipa o spin em i),
- J é o acoplamento entre spins vizinhos,
- h é a intensidade do campo magnético na direção transversal (eixo x).

Note que:

- O primeiro termo da Hamiltoniana é **diagonal** na base computacional ($|x\rangle$), pois $\sigma_z \times \sigma_z$ retorna valores +1 ou -1.
- O segundo termo é **não-diagonal**: σ_x atua mudando (flipando) o estado de um qubit individual.

Esse modelo é simples o suficiente para construir, mas complexo o bastante para exigir coerência quântica (interferência) na função de onda.

Passo 2: Escolher a função de onda (rede neural variacional)

Propomos uma função de onda parametrizada na forma:

$$\psi_t(x) = \exp(f_t(x))$$

Em que $f_t(x)$ é uma rede neural escalar (por exemplo, uma MLP com uma camada oculta), que mapeia uma configuração binária de spins em \mathbb{R}^+ via exponenciação. Isso garante:

- Positividade de ψ (necessária para amostragem),
- Interpolabilidade (a função $f_t(x)$ pode aprender padrões arbitrários nas configurações de spin),
- Diferenciabilidade (ótimo para descida de gradiente via backpropagation).

Implementação (PyTorch)

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Começamos importando bibliotecas:

```
import numpy as np
import torch
import torch.nn as nn
import torch.optim as optim
```

Rede Neural: função de onda

```
class PsiNet(nn.Module):
    def __init__(self, n, hidden_dim=16):
        super().__init__()
        self.net = nn.Sequential(
            nn.Linear(n, hidden_dim),
            nn.Tanh(),
            nn.Linear(hidden_dim, 1)
        )
    def forward(self, x):
        return torch.exp(self.net(x).squeeze())
```

- **Entrada x:** vetor de spins com valores $\{-1, +1\}$, representando uma configuração binária.
- **Saída:** escalar positivo $\psi(x)$, interpretado como amplitude da função de onda.
- **A tangente hiperbólica** introduz não linearidades suaves e simetria central (útil para modelar inversões de spin).

Cálculo da Energia Local

```
def local_energy(psi_model, x, J=1.0, h=1.0):
    E = 0.0
    # Termo de interação diagonal:  $-J \times s_i \times s_{i+1}$ 
    for i in range(len(x)):
```

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



```
E += -J * x[i] * x[(i+1)%len(x)]  
  
# Termo de flip não-diagonal: -h × (ψ(x') / ψ(x))  
  
for i in range(len(x)):  
  
    x_flipped = x.clone()  
  
    x_flipped[i] *= -1  
  
    ratio = psi_model(x_flipped.unsqueeze(0)) / psi_model(x.unsqueeze(0))  
  
    E += -h * ratio.item()  
  
return E
```

Explicação:

- O termo **diagonal** computa diretamente $\sigma_z \times \sigma_z$.
- O termo **não-diagonal** implementa σ_x : inverte um spin, calcula $\psi(x')/\psi(x)$, e soma sua contribuição. Isso corresponde ao elemento de matriz $\langle x | \sigma_x | x' \rangle$.

Amostragem de configurações (Monte Carlo)

```
def sample_spin_configs(n, N_samples):  
  
    configs = []  
  
    for _ in range(N_samples):  
  
        spins = np.random.choice([-1, 1], size=n)  
  
        configs.append(spins)  
  
    return torch.tensor(configs).float()
```

As amostras seguem uma distribuição uniforme em $\{-1, +1\}^n$. Essa é uma estimativa bruta; versões mais sofisticadas usam amostragem ponderada, como Metropolis-Hastings.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Loop de otimização VMC

```
def train_vmc(n=8, samples=200, epochs=100, lr=1e-2):
```

```
    model = PsiNet(n)
```

```
    optimizer = optim.Adam(model.parameters(), lr=lr)
```

```
    for epoch in range(epochs):
```

```
        configs = sample_spin_configs(n, samples)
```

```
        energies = [local_energy(model, x) for x in configs]
```

```
        amplitudes = model(configs)
```

```
        probs = amplitudes**2
```

```
        probs /= probs.sum()
```

```
E_exp = sum(e*p.item() for e,p in zip(energies, probs))
```

```
loss = torch.tensor(E_exp, requires_grad=True)
```

```
optimizer.zero_grad()
```

```
loss.backward()
```

```
optimizer.step()
```

```
print(f'Iteração {epoch}: energia esperada = {E_exp:.6f}')
```

O que está acontecendo aqui:

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil

www.ramanujan.institute | www.holosystemsquantum.com | www.equiverse.com.br | www.kiyosito.io



1. Geramos **configs**, amostras do espaço de spin.
2. Para cada x em configs:
 - o Calculamos $E_{loc}(x)$.
 - o Calculamos $\psi_t(x)$ via a rede.
3. Derivamos a **distribuição de probabilidade**:

$$p(x) = |\psi_t(x)|^2 / \sum_x' |\psi_t(x')|^2$$

4. Calculamos a energia esperada:

$$E[\theta] \approx \sum_x p(x) \times E_{loc}(x)$$

5. Realizamos **backpropagation** sobre $E[\theta]$ — isto é, minimizamos a energia esperada via otimização estocástica de θ .

Reflexão Final — A elegância de VMC

A grande sacada do Variational Monte Carlo é que ele evita dois dos principais gargalos da computação quântica:

- **Não precisamos da matriz completa de \hat{H}** — só dos elementos não-nulos (locais).
- **Não precisamos armazenar vetores de dimensão 2^n explicitamente** — usamos aproximações via redes neurais e amostragem.

Além disso, VMC nos dá um espaço de busca muito mais rico do que aproximações lineares: podemos explorar funções de onda não triviais, modelar coerência, e incorporar simetrias.

O custo computacional total depende de:

- O número de amostras por época (linear),
- O custo de forward pass na rede (linear em número de parâmetros),
- O número de épocas (definido empiricamente pela convergência).

CONCLUSÃO:

Ao longo deste curso, nossa proposta foi construir não apenas uma linha conceitual sólida sobre computação quântica e otimização, mas, sobretudo, uma arquitetura intelectual capaz de integrar

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



álgebra linear avançada, fundamentos da mecânica quântica, teoria da complexidade, linguagens da física matemática e técnicas modernas de aprendizado de máquina, em torno de um eixo comum: o uso de Hamiltonianas como descrição formal da estrutura de problemas computacionais.

Partimos da motivação histórica de William Rowan Hamilton no século XIX — cuja genialidade consistiu não apenas em formular um novo método de cálculo, mas em inaugurar um novo paradigma: a ideia de que energia, não forças, deveria ser a linguagem estrutural da dinâmica de sistemas complexos. Esse ponto de partida nos permitiu mapear a transição conceitual da mecânica clássica para a mecânica quântica: a promoção da função Hamiltoniana a operador sobre espaços vetoriais complexos, e sua centralidade na equação de Schrödinger, na teoria de operadores, e, por fim, na computação quântica moderna.

Exploramos como a retomada dessa ideia — muitas vezes por diferentes cientistas de forma independente, como Schrödinger, Heisenberg, Dirac e Jordan — foi a resposta conceitual necessária diante da falência preditiva da física clássica no regime atômico. Em todos esses caminhos, vimos que o uso de operadores hermitianos, autovalores, estruturas de comutadores e parênteses de Poisson foram naturalmente herdados do formalismo hamiltoniano e reconfigurados na linguagem dos estados quânticos em espaços de Hilbert.

Essa herança nos conduziu a um olhar muito preciso sobre o papel da álgebra linear. Deixou de ser um recurso matemático auxiliar para se tornar a própria moldura da computação quântica e de seus algoritmos — do controle de portas unitárias aos simuladores de Hamiltonianas, da estrutura matricial de observáveis às decomposições espectrais necessárias para algoritmos variacionais e quantificação de entropia. Essa constatação exigiu que discutíssemos com profundidade todas as noções fundamentais da disciplina: espaços vetoriais complexos, operadores lineares e autoadjuntos, teoremas espectrais, decomposições em operadores de Pauli, produtos tensoriais e até princípios de otimização sobre subespaços parametrizados.

Ao longo das discussões mais práticas, migramos de problemas canônicos de otimização — como a partição de números — para suas modelagens como problemas binários quadráticos (QUBO) e, posteriormente, para sua expressão como Hamiltonianas discretas. Com isso, construímos uma ponte natural entre problemas NP-difíceis, sistemas físicos interativos (como o modelo de Ising) e algoritmos heurísticos inspirados em estruturas quânticas, mesmo implementados em hardware clássico.

Nesse sentido, propusemos e dissecamos um algoritmo *quantum-inspired* completo, linha a linha, com comentários matemáticos meticulosos. Mostramos como é possível simular o

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



comportamento de superposição e interferência via somatórios combinatórios, como a função de energia pode ser formalizada via produto interno e como o conceito de estado fundamental, tão presente na física, pode ser reinterpretado como uma solução ótima de problemas combinatórios sob o ponto de vista computacional. Esse estudo permitiu contextualizar, com precisão, a diferença entre problemas pertencentes às classes P e NP, o que é uma redução polinomial, e quais problemas são considerados NP-difíceis.

Partindo dessa base, demos um passo além: reestruturamos o algoritmo original em um modelo variacional de inspiração quântica, onde trocamos a busca exaustiva por parametrizações contínuas e diferenciáveis sobre funções de onda. Mostramos como construir um ansatz — uma aproximação funcional — capaz de simular um circuito quântico parametrizado, e como calcular a energia esperada via integrais discretizadas sobre distribuições de probabilidade induzidas.

Isso nos levou naturalmente à abordagem do VQE (Variational Quantum Eigensolver) e seu equivalente clássico: o método de Monte Carlo Variacional (VMC). E foi nessa transição que incorporamos estruturas modernas de aprendizado de máquina, especialmente redes neurais paramétricas, como função de onda. Exploramos com precisão como a arquitetura MLP (perceptron multicamada) pode ser vista como uma função suave sobre o espaço de spins, e como ela pode ser calibrada, via descida de gradiente, para se aproximar do estado fundamental de uma Hamiltoniana não-diagonal — sem nunca precisar conhecer a matriz completa de \hat{H} . A isso chamamos de otimização baseada em amostragem local — onde apenas o quociente entre amplitudes é necessário, e não a função de onda como um todo.

O método VMC revelou, assim, a beleza do compromisso computacional moderno: quando não podemos operar diretamente sobre as estruturas completas (como vetores em \mathbb{C}^{2^n} ou matrizes $2^n \times 2^n$), projetamos aproximações espertezas — circuitos parametrizados, heurísticas probabilísticas, redes neurais não-lineares — que capturam características fundamentais do espaço de solução com custo muito inferior.

Encerramos esse percurso com reflexões cruciais: que o progresso em algoritmos quânticos e quantum-inspired dependerá não apenas de avanços em hardware, mas da nossa capacidade de modelar, abstrair e compreender profundamente as estruturas matemáticas que tornam possível a representação, compressão e manipulação inteligente de estados e operadores. E esse entendimento passa invariavelmente por domínio técnico em álgebra linear, teoria espectral, análise funcional, fundamentos de mecânica quântica e estruturas probabilísticas — somado a uma intuição madura sobre otimização, estrutura combinatória e teoria da complexidade.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil

www.ramanujan.institute | www.holosystemsquantum.com | www.equiverse.com.br | www.kiyosito.io



Este curso não foi apenas sobre algoritmos: foi sobre o modo como diferentes disciplinas matemáticas se entrelaçam para resolver problemas que antes pareciam intratáveis. Foi sobre como o formalismo de Hamilton deixou de ser apenas um método histórico da física clássica e se transformou na gramática universal dos sistemas físicos computacionais. E foi, sobretudo, sobre como o pensamento matemático e computacional podem, juntos, redescrever o espaço das possibilidades algorítmicas — inclusive aquelas que ainda não existem, mas que já compreendemos, em sua forma estrutural, por meio da linguagem da energia.

Esse nosso curso não como uma compilação de técnicas, mas como uma cartografia conceitual e operacional para futuros exploradores da fronteira entre matemática, física e computação. E se há uma última mensagem, ela é esta: os sistemas quânticos não apenas executam algoritmos — eles são algoritmos. E compreender sua estrutura é, ao mesmo tempo, compreender os limites e as possibilidades da computação no século XXI.

GLOSSÁRIO TÉCNICO DETALHADO:

Aqui está um glossário técnico detalhado, abrangendo os principais termos, conceitos e operadores que exploramos ao longo do curso "**Da Energia aos Algoritmos**". A proposta é servir como uma referência precisa e rigorosa — voltada a pesquisadores e alunos de pós-graduação com maturidade matemática e computacional.

Hamiltoniana (Hamiltonian) Função que representa a energia total de um sistema físico, geralmente expressa como a soma das energias cinética e potencial. No formalismo quântico, torna-se um operador hermitiano que rege a evolução do estado do sistema via a equação de Schrödinger. É o objeto central de otimização em algoritmos variacionais quânticos.

Estado Fundamental (Ground State) Estado de energia mínima de um sistema físico descrito por uma Hamiltoniana. Representa a solução ótima em problemas de otimização modelados por métodos quantum-inspired.

Espaço de Hilbert Espaço vetorial complexo com produto interno definido, completo em norma. É o palco onde vivem os estados quânticos (vetores de estado), operadores hermitianos e evoluções unitárias.

Produto Interno (Inner Product) Operação que associa a dois vetores um número escalar complexo. Em \mathbb{C}^n , definido por $\langle \psi, \varphi \rangle = \sum_i \psi_i^* \varphi_i$. Permite definir ortogonalidade, comprimento e projeção.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Operador Hermitiano Operador linear auto-adjunto, ou seja, $A = A^\dagger$. Possui autovalores reais e autovetores ortogonais. Representa observáveis físicos e Hamiltonianas.

Autovalores e Autovetores Dados um operador A , um escalar λ e vetor $v \neq 0$, temos $A v = \lambda v$. Os autovalores (λ) representam quantidades físicas mensuráveis; os autovetores (v) representam os estados correspondentes.

Diagonalização Processo de representar um operador em uma base onde ele atua multiplicativamente. Fundamental para entender dinâmicas quânticas e para decomposição espectral de Hamiltonianas.

Comutador Dado dois operadores A e B , o comutador é definido como $[A, B] = AB - BA$. Mede o grau de não-comutatividade entre operações. Na mecânica quântica, está diretamente ligado ao princípio da incerteza.

Operadores de Pauli Trio de matrizes fundamentais:

- $\sigma_x = [[0, 1], [1, 0]]$
- $\sigma_y = [[0, -i], [i, 0]]$
- $\sigma_z = [[1, 0], [0, -1]]$ São operadores hermitianos que geram o grupo $SU(2)$, base para manipulação de qubits e construção de Hamiltonianas.

Produto Tensorial Operação que combina dois espaços vetoriais em um novo de dimensão produto. Permite a construção de estados compostos (como vários qubits). $A \otimes B$ representa a ação simultânea de operadores sobre subsistemas independentes.

Qubit Unidade básica de informação quântica. Estado quântico de duas dimensões representado como: $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. É o análogo quântico do bit clássico, com propriedades de superposição e interferência.

Superposição Princípio segundo o qual um estado quântico pode existir simultaneamente como combinação linear de múltiplos estados base.

Tunelamento Quântico Fenômeno onde um sistema quântico transita entre estados separados por barreiras de energia, mesmo que classicamente proibido. Em algoritmos de quantum annealing, permite escapar de mínimos locais.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Teorema Adiabático Quântico Afirma que se a evolução de uma Hamiltoniana for lenta o suficiente, o sistema permanece no estado fundamental durante toda a evolução. Base para quantum annealing e algoritmos variacionais.

Modelo de Ising Modelo de spins clássicos ou quânticos com interações locais, normalmente expressos como: $H = -J \sum \sigma_z(i) \sigma_z(i+1) - h \sum \sigma_x(i)$ Utilizado para representar otimização combinatória, transições de fase e simulações quânticas.

QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) Modelo de otimização definido como: $\min x^T Q x$, com $x \in \{0,1\}^n$ Usado para representar problemas NP-difíceis, como partição de números, MaxCut, e colorização de grafos.

VQE (Variational Quantum Eigensolver) Algoritmo híbrido (quântico e clássico) que busca o estado fundamental de uma Hamiltoniana parametrizando uma função de onda e otimizando sua energia esperada com otimizadores clássicos.

VMC (Variational Monte Carlo) Versão clássica do VQE. Usa uma função de onda parametrizada (ex: rede neural), calcula a energia local por amostragem e otimiza os parâmetros via descida de gradiente.

Ansatz Suposição funcional — geralmente uma função de onda parametrizada — usada como aproximação controlada em métodos variacionais. Pode ser um circuito quântico ou uma rede neural.

Rede Neural Variacional Rede neural usada como função de onda para representar estados quânticos em algoritmos VMC. Mapeia uma entrada binária (como uma configuração de spins) para uma amplitude escalar.

Energia Local Dada uma configuração x , é o valor esperado da Hamiltoniana sobre x , considerando contribuições vizinhas: $E_{loc}(x) = \sum_{x'} H(x, x') \psi(x') / \psi(x)$ É estimada ponto a ponto durante VMC.

Esperança de Energia (Energy Expectation) Valor médio da energia sobre a distribuição $|\psi(x)|^2$: $E[0] = \sum_x p(x) \times E_{loc}(x)$, com $p(x) = |\psi(x)|^2 / \text{normalização}$

Amostragem de Monte Carlo Técnica para estimar integrais ou esperanças matemáticas via amostragem aleatória. No VMC, usada para evitar a enumeração completa do espaço de estados (exponencial).

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Simulated Annealing Algoritmo de otimização inspirado no processo físico de resfriamento térmico. Evita mínimos locais aceitando, com certa probabilidade, soluções piores no início.

Quantum Annealing Versão quântica do annealing. Usa evolução adiabática de uma Hamiltoniana, com efeitos de tunelamento, para encontrar o estado fundamental do problema.

Classe P Conjunto dos problemas solucionáveis em tempo polinomial determinístico.

Classe NP Problemas cuja solução pode ser verificada em tempo polinomial.

Problemas NP-Difíceis (NP-Hard) Problemas tão difíceis quanto os mais difíceis de NP. Se qualquer um deles tiver uma solução em P, então P = NP.

Problemas NP-Completos Problemas que estão em NP e são NP-difíceis. Reduções entre eles são essenciais na análise de complexidade.

Descida de Gradiente (Gradient Descent) Método de otimização contínua que ajusta parâmetros na direção do gradiente negativo da função de custo.

Retropropagação (Backpropagation) Algoritmo para computar o gradiente de uma função de custo em redes neurais, aplicando a regra da cadeia sobre composições de funções.

Otimizador (Optimizer) Algoritmo que ajusta os parâmetros de um modelo para minimizar uma função de custo. Exemplos: SGD, Adam, RMSProp.

Espaço de Fase (Phase Space) Espaço definido por coordenadas generalizadas (posição) e seus momentos conjugados. Estrutura simplética do formalismo hamiltoniano.

Transformada de Legendre Transforma funções $L(q, \dot{q})$ em $H(q, p)$, trocando variáveis para obter equações de Hamilton a partir da Lagrangiana.

Parênteses de Poisson Definido como $\{f, g\} = \sum (\partial f / \partial q_i) \partial g / \partial p_i - \partial f / \partial p_i \partial g / \partial q_i$. Fundamentais na mecânica clássica e predecessores dos comutadores na mecânica quântica.

Norma Euclidiana Medida do “tamanho” de um vetor: $\|x\| = \sqrt{(\sum x_i^2)}$. Fundamental para normalização de estados.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor. Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Operador Unitário Operador linear que preserva norma: $U^\dagger U = I$. Representa transformações reversíveis em estados quânticos (como portas lógicas quânticas).

BIBLIOGRAFIA COMENTADA:

Abaixo está uma bibliografia comentada e ordenada que percorre o espectro completo daquilo que discutimos neste curso: de clássicos fundacionais a artigos seminais contemporâneos. Essa lista foi construída com o espírito da nossa jornada — transversal, técnica e historicamente consciente — abrangendo matemática, física, computação e ciência da informação quântica. Organizei em cinco blocos cronológicos e temáticos, da física clássica à computação quântica e algoritmos variacionais.

1. Fundamentos da Mecânica Clássica e Formalismo Hamiltoniano

William Rowan Hamilton

- *On a General Method in Dynamics* (1834)
 - Artigo original onde Hamilton introduz o formalismo que leva seu nome. Essencial para compreender o nascimento da dinâmica canônica.

Goldstein, H., Poole, C. & Safko, J.

- *Classical Mechanics* (3^a ed., Pearson)
 - Referência clássica sobre o formalismo lagrangiano e hamiltoniano. Contém uma apresentação rigorosa das equações de Hamilton, estrutura de fase e transformadas canônicas.

Arnold, V.I.

- *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (Springer, Graduate Texts in Mathematics)
 - Obra matemática profundamente geométrica. Introduz a estrutura simplética dos espaços de fase e conecta a teoria de Hamilton às ideias modernas de geometria diferencial.

2. Do Formalismo Hamiltoniano à Mecânica Quântica

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Dirac, P. A. M.

- *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford University Press)
 - Obra fundamental que estabelece a linguagem dos operadores, espaços de Hilbert e comutadores. Integra diretamente a álgebra de Poisson com estruturas quânticas.

Landau, L. & Lifshitz, E.

- *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory* (Vol. 3, Course of Theoretical Physics)
 - Um clássico russo. Clareza formal impressionante e excelentes desenvolvimentos matemáticos dos postulados da mecânica quântica.

Sakurai, J. J. & Napolitano, J.

- *Modern Quantum Mechanics* (Cambridge University Press)
 - Leitura indispensável para alunos de pós-graduação. Apresenta a formulação de Schrödinger e Heisenberg com profundidade técnica.

Schrödinger, E.

- *Quantisierung als Eigenwertproblem* (1926)
 - Série de artigos onde Schrödinger apresenta a mecânica ondulatória e sua equação. Disponível em inglês como "Quantization as an Eigenvalue Problem".

3. Álgebra Linear e Estrutura Matemática da Computação Quântica

Axler, S.

- *Linear Algebra Done Right* (Springer)
 - Uma abordagem moderna e conceitual. Dá ênfase a operadores e autovalores sem depender de matrizes desde o início.

Trefethen, L. N. & Bau, D.

- *Numerical Linear Algebra* (SIAM)
 - Essencial para implementação eficiente de algoritmos e simulações.

Nielsen, M. & Chuang, I.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



- *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press)
 - A “bíblia” da computação quântica. Formalismo completo, incluindo algoritmos, circuitos, teoria de complexidade e fundamentos de informação quântica.

Preskill, J.

- *Lecture Notes on Quantum Computation* (Caltech, 1998)
 - Notas altamente influentes e gratuitas online. Cobrem QFT, complexidade, algoritmos variacionais e mais.

4. Computação Quântica, Otimização e Variational Algorithms

Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S.

- *A Quantum Approximate Optimization Algorithm* (arXiv:1411.4028)
 - Paper fundador do QAOA, propondo o uso de Hamiltonianas como objetos centrais na otimização aproximada com qubits.

Peruzzo, A. et al.

- *A variational eigenvalue solver on a quantum processor* (Nature Communications, 2014)
 - Artigo que introduz o VQE, marco nos algoritmos híbridos para encontrar autovalores de Hamiltonianas em sistemas reais.

Carleo, G. & Troyer, M.

- *Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks* (Science, 2017)
 - Primeiro uso bem-sucedido de redes neurais (Restricted Boltzmann Machines) como funções de onda. Fundação dos métodos VMC baseados em aprendizado profundo.

McClean, J.R. et al.

- *The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms* (New Journal of Physics, 2016)
 - Uma análise detalhada e formal dos algoritmos híbridos. Estabelece bases para teoria de expressividade, barren plateaus e eficiência.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil



Cerezo, M. et al.

- *Variational Quantum Algorithms* (Nature Reviews Physics, 2021)
 - Revisão de estado da arte sobre VQE, QAOA, seus desafios e perspectivas. Leitura panorâmica fundamental para pesquisadores.

5. Teoria da Complexidade, NP-Dificuldade e Reduções

Papadimitriou, C.

- *Computational Complexity* (Addison-Wesley)
 - Tratado abrangente sobre classes P, NP, reduções, completude e estruturas hierárquicas. Obra de referência em teoria da computação.

Garey, M. R. & Johnson, D. S.

- *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness* (W.H. Freeman)
 - Clássico absoluto. Apresenta as principais reduções conhecidas, fundamentos de complexidade e a noção de problemas NP-difíceis.

Arora, S. & Barak, B.

- *Computational Complexity: A Modern Approach* (Cambridge University Press)
 - Obra moderna e rigorosa. Traz linguagem atual, probabilística e interativa da complexidade computacional.

Dr. Marcos Elias Matemático, engenheiro, pesquisador e empreendedor Fundador do Ramanujan Institute, HoloSystems Quantum, Equiverse e Kiyosito Av. Brigadeiro Faria Lima, 2277 – 4º andar Jardim Paulistano – São Paulo – SP – CEP 01489-901 Brasil