

# A Functional Contribution Framework for Quantum Software Engineering

María Cecilia Pezzini<sup>1</sup>, Claudia Pons<sup>1,2,3</sup>, and Luis Mariano Bibbó<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Informática, Universidad Nacional de La Plata, Argentina  
[c\\_pezzini@hotmail.com](mailto:c_pezzini@hotmail.com), [cpons@lifa.info.unlp.edu.ar](mailto:cpons@lifa.info.unlp.edu.ar),  
[lmbibbo@lifa.info.unlp.edu.ar](mailto:lmbibbo@lifa.info.unlp.edu.ar)

<sup>2</sup> Comisión de Investigaciones Científicas (CIC), Buenos Aires, Argentina

<sup>3</sup> Facultad de Tecnología Informática, Universidad Abierta Interamericana, Argentina

**Resumen** Quantum Software Engineering (Q-SE) requires tools that enable reproducible and quantitative analysis of the functional behavior of quantum algorithms, beyond their overall correctness. This paper introduces *SMEF* (Software Engineering Module Evaluation Framework), a functional attribution framework based on Shapley values, aimed at quantifying the contribution of functional blocks within a quantum implementation under explicit metrics defined by the analyst.

The framework evaluates partial circuit configurations that preserve the physical execution order, allowing the global behavior to be decomposed into block-level functional contributions, in coherence with both the operational semantics of the algorithm and the axiomatic properties of the attribution mechanism. SMEF does not seek to reinterpret the underlying quantum dynamics; instead, it provides reproducible and comparable functional metrics that support core Q-SE activities such as auditing, validation, systematic comparison of implementations, and detection of functional anomalies.

The proposal is validated through two case studies: (i) the hypercube search of the SKW algorithm and (ii) the phase estimation (QPE) stage of Shor's algorithm. In both cases, the resulting contribution profiles are consistent with the expected functional role of the analyzed blocks and enable the identification of functional deviations without requiring gate-level inspection of the circuit.

**Keywords:** Quantum software engineering · Shapley values · Functional attribution.

## Una marco de contribución funcional para la Ingeniería de Software Cuántico

**Resumen.** La Ingeniería de Software Cuántico (Q-SE) requiere herramientas que permitan analizar de manera reproducible y cuantitativa

Received August 2025; Accepted November 2025; Published February 2026



This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International License.

el comportamiento funcional de algoritmos cuánticos, más allá de su corrección global. En este trabajo se presenta *SMEF* (Software Engineering Module Evaluation Framework), un marco de atribución funcional basado en valores de Shapley, orientado a cuantificar la contribución de bloques funcionales dentro de una implementación cuántica bajo métricas explícitas definidas por el analista.

El marco evalúa configuraciones parciales del circuito que preservan el orden físico de ejecución, permitiendo descomponer el comportamiento global en contribuciones funcionales atribuibles a cada bloque, en coherencia con la semántica operacional del algoritmo y con las propiedades axiomáticas del mecanismo de atribución empleado. *SMEF* no busca reinterpretar la dinámica cuántica subyacente, sino proporcionar métricas funcionales reproducibles y comparables, útiles para actividades propias de la Q-SE, tales como auditoría, validación, comparación sistemática de implementaciones y detección de anomalías funcionales. La propuesta se valida mediante dos casos de estudio: (i) la búsqueda sobre hipercubos del algoritmo SKW y (ii) la etapa de estimación de fase (QPE) del algoritmo de Shor. En ambos casos, los perfiles de contribución obtenidos resultan coherentes con el rol funcional esperado de los bloques analizados y permiten identificar desviaciones funcionales sin necesidad de inspeccionar el circuito a nivel de compuertas.

**Palabras clave:** Ingeniería de software cuántico · Valores de Shapley · Atribución funcional.

## 1. Introducción

El desarrollo de sistemas cuánticos se apoya en el modelo de circuitos cuánticos (Nielsen y Chuang, 2011) y, de manera creciente, en enfoques metodológicos propios de la Ingeniería de Software Cuántico (Q-SE), orientados a adaptar a este dominio prácticas de especificación, prueba, verificación y gestión de la calidad (Paltenghi y Pradel, 2024).

En este contexto, el interés no se limita a la corrección formal de los algoritmos, sino que se extiende a aspectos de ingeniería tales como la reproducibilidad de resultados, la comparación sistemática de implementaciones y la detección de desviaciones respecto de comportamientos esperados. Si bien los enfoques actuales de análisis permiten caracterizar el comportamiento global de un circuito y verificar su corrección, no están orientados a proporcionar una descomposición funcional y modular que permita atribuir de manera cuantitativa responsabilidades a los distintos bloques que componen una implementación. En particular, estos enfoques no permiten responder preguntas como:

- ¿Qué bloques contribuyen efectivamente al comportamiento observado?
- ¿Cómo se distribuyen las responsabilidades dentro de una implementación bajo métricas explícitas y reproducibles?

Este trabajo presenta **SMEF (Software Engineering Module Evaluation Framework)**, un marco de atribución funcional basado en valores de Shapley

que cuantifica la contribución de bloques de un circuito respecto de una función de valor definida por el analista (p. ej., probabilidad de éxito u observables operacionales). Apoyado en las propiedades axiomáticas del valor de Shapley, SMEF produce una descomposición cuantitativa del comportamiento del circuito mediante la evaluación sistemática de configuraciones parciales que preservan el orden físico de ejecución.

El marco no busca reinterpretar la dinámica cuántica del algoritmo, sino proporcionar métricas funcionales orientadas a actividades propias de la Q-SE, como la comparación de implementaciones, la caracterización del rol de cada bloque y la detección de desviaciones respecto de un comportamiento de referencia.

La propuesta se valida mediante dos casos de estudio representativos de arquitecturas cuánticas con naturaleza y estructura distintas: (i) el paso de búsqueda del algoritmo SKW sobre hipercubos y (ii) la etapa de estimación de fase (QPE) del algoritmo de Shor. Estos casos se utilizan para evaluar la consistencia numérica del mecanismo de atribución, la coherencia funcional de las contribuciones obtenidas con el rol esperado de los bloques, y la sensibilidad del análisis a la elección de la métrica funcional. De este modo, los estudios de caso no buscan reanalizar el funcionamiento físico de los algoritmos, sino validar la aplicabilidad de SMEF como herramienta de evaluación orientada a actividades propias de la Ingeniería de Software Cuántico.

## 2. Estado del Arte

La necesidad de herramientas que permitan descomponer cuantitativamente el comportamiento de circuitos cuánticos surge al contrastar los enfoques actuales con las actividades propias de la **Ingeniería de Software Cuántico (Q-SE)**.

El **análisis teórico-algorítmico** caracteriza los algoritmos cuánticos mediante propiedades globales del sistema, como la convergencia en caminatas cuánticas (Aharonov et al., 2001; Kempe, 2003; Portugal, 2013) o la estimación de fase en el algoritmo de Shor (Nielsen y Chuang, 2011; Shor, 1997). Si bien estos enfoques proporcionan una comprensión formal del funcionamiento ideal de los algoritmos, operan en niveles de abstracción que no permiten cuantificar la contribución funcional de subrutinas específicas dentro de una implementación concreta.

En paralelo, el *quantum software testing* ha producido herramientas eficaces para la detección de defectos y la validación estadística de programas cuánticos (Huang y Martonosi, 2019; Paltenghi y Pradel, 2024). No obstante, las métricas empleadas en estos enfoques suelen ser globales (por ejemplo, fidelidad o tasa de error) o binarias (pasa/no pasa), sin desglosar cuantitativamente en qué medida cada componente individual influye en el resultado observado.

Recientemente, han surgido trabajos que incorporan mecanismos de atribución basados en **valores de Shapley** con distintos objetivos. En particular, estos mecanismos se han utilizado para mejorar la interpretabilidad de circuitos en el contexto de *quantum machine learning* (Heese et al., 2025), así como para

estudiar algoritmos cuánticos destinados a la estimación de valores de Shapley en problemas cooperativos (Burge et al., 2023).

A diferencia de estos enfoques, **SMEF** adopta los valores de Shapley como un mecanismo de evaluación funcional orientado a la Q-SE, destinado a cuantificar de manera reproducible la contribución de bloques modulares al desempeño operacional de una implementación cuántica concreta, bajo métricas explícitas y preservando la semántica operacional del circuito.

### 3. Marco SMEF

SMEF define una metodología de análisis para algoritmos cuánticos, en la cual una implementación se concibe como un sistema modular evaluable mediante una función de valor, en el sentido de la teoría de juegos cooperativos. Este encuadre permite atribuir de manera cuantitativa la contribución de los bloques funcionales que integran un circuito, bajo métricas explícitas y reproducibles.

#### 3.1. Metodología y definición formal del marco

En SMEF, un algoritmo cuántico se representa como una composición secuencial de operadores unitarios agrupados en bloques funcionales:

$$U_{\text{total}} = U_L \cdots U_1, \quad (1)$$

donde cada operador  $U_b$  representa un bloque funcional de la implementación, definido como una agrupación de uno o más operadores unitarios según la semántica operacional del circuito analizado.

Esta representación permite interpretar el circuito cuántico como una secuencia ordenada de unidades funcionales identificables, cada una de las cuales constituye un elemento de análisis dentro del marco.

Sobre los estados cuánticos inducidos por configuraciones parciales se definen *métricas funcionales* como aplicaciones:

$$M : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{R}, \quad (2)$$

donde  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  denota el conjunto de estados cuánticos (matrices densidad) sobre el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Estas métricas asignan un valor real a cada estado y capturan, de manera operativa y reproducible, un criterio de desempeño del algoritmo respecto de su objetivo, permitiendo comparar configuraciones parciales de una misma implementación bajo un marco de evaluación común.

Cuando el criterio de desempeño puede expresarse mediante un operador hermitiano  $H = H^\dagger$ , la métrica funcional inducida adopta la forma:

$$M_H(\rho) = \text{Tr}(H\rho). \quad (3)$$

La formulación general en términos de matrices densidad  $\rho$  permite abarcar tanto estados puros como mixtos.

En un escenario ideal en el cual la evolución del sistema se mantiene en estados puros, la métrica inducida puede evaluarse de manera equivalente como  $M_H(\psi) = \langle \psi | H | \psi \rangle$ , con  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ , sin pérdida de generalidad respecto del marco formal de SMEF.

Dentro de este encuadre, SMEF evalúa la mejora funcional inducida por distintas configuraciones parciales del circuito, preservando el orden físico de ejecución y manteniendo la validez semántica de la implementación analizada. A tal efecto, se consideran dos tipos de configuraciones parciales:

- **Prefijos**, formados por los primeros  $b$  bloques del circuito.
- **Coaliciones**, definidas como subconjuntos de bloques funcionales evaluados preservando el orden original y sustituyendo por la identidad los bloques ausentes.

Formalmente, una instancia del marco SMEF se define mediante la tupla:

$$\mathcal{M} = (\mathcal{B}, H, M_H, v, \phi), \quad (4)$$

donde  $\mathcal{B} = \{1, \dots, L\}$  denota el conjunto de índices que identifican los bloques funcionales del circuito, y  $b \in \mathcal{B}$  un bloque funcional genérico;  $H$  es un operador hermitiano funcional que induce un criterio operacional de evaluación;  $M_H$  es la métrica funcional asociada a  $H$ ;  $v$  es la función de valor inducida por dicha métrica; y  $\phi$  es el vector de valores de Shapley asociado a  $v$ .

**Convención de valor y análisis por prefijos** Se adopta una convención uniforme según la cual la métrica inducida por  $H$  se interpreta como un costo (menor es mejor). Para una configuración parcial  $X$  (prefijo o coalición), se define la función de valor como:

$$v(X) = M_H(\rho_{\text{ref}}) - M_H(\rho_X), \quad (5)$$

donde  $\rho_{\text{ref}}$  es el estado de referencia, tomado por defecto como el estado inicial  $\rho_0$ .

Sea  $S_b = (U_1, \dots, U_b)$  un prefijo del circuito. En el escenario ideal, el estado inducido por dicho prefijo es:

$$\rho_{S_b} = U_b \cdots U_1 \rho_0 U_1^\dagger \cdots U_b^\dagger. \quad (6)$$

La contribución marginal secuencial del bloque  $b$  se define como:

$$\Delta_b = M_H(\rho_{S_{b-1}}) - M_H(\rho_{S_b}), \quad b \geq 1, \quad (7)$$

y satisface  $\Delta_b = v(S_b) - v(S_{b-1})$  bajo la convención de valor adoptada.

**Mecanismo de atribución mediante valores de Shapley** Dada una coalición  $C \subseteq \mathcal{B}$ , el circuito efectivo se construye manteniendo la secuencia completa de bloques funcionales y sustituyendo por la identidad los bloques ausentes:

$$U_C = \tilde{U}_L \cdots \tilde{U}_1, \quad \tilde{U}_b = \begin{cases} U_b, & b \in C, \\ I, & b \notin C. \end{cases} \quad (8)$$

El estado inducido por la coalición se denota por  $\rho_C$ , y el valor funcional  $v(C)$  se evalúa mediante (5).

Sobre esta función de valor se define el valor de Shapley asociado a cada bloque  $b \in \mathcal{B}$  como el promedio de sus contribuciones marginales a lo largo de todas las permutaciones posibles del conjunto de bloques:

$$\phi_b = \frac{1}{|\mathcal{B}|!} \sum_{\pi \in \Pi(\mathcal{B})} [v(C_b^\pi \cup \{b\}) - v(C_b^\pi)], \quad (9)$$

donde  $\Pi(\mathcal{B})$  denota el conjunto de todas las permutaciones de  $\mathcal{B}$  y  $C_b^\pi$  el conjunto de bloques que preceden a  $b$  en la permutación  $\pi$  (Shapley, 1953).

### Justificación axiomática y preservación de la semántica operacional

Los valores de Shapley constituyen un esquema de atribución que satisface simultáneamente los axiomas de eficiencia, simetría, nulidad y aditividad (Young, 1985). En el contexto de SMEF, la propiedad de eficiencia garantiza que la suma de las contribuciones asignadas a todos los bloques coincide exactamente con la variación total de la función de valor entre el circuito vacío y el circuito completo. De este modo, el comportamiento global del circuito puede descomponerse de forma aditiva y numéricamente verificable en contribuciones atribuibles a cada bloque funcional.

Asimismo, la construcción de coaliciones preserva el orden físico de ejecución del circuito, asegurando que la atribución respete la semántica operacional real del algoritmo y no dependa de configuraciones arbitrarias.

En este encuadre, SMEF utiliza los valores de Shapley como un mecanismo de evaluación funcional orientado a actividades propias de la Ingeniería de Software Cuántico, tales como auditoría, comparación de implementaciones y detección de desviaciones respecto de un comportamiento de referencia.

### 3.2. Operadores hermitianos para evaluación funcional

Cuando el criterio de desempeño se expresa mediante un operador hermitiano, SMEF selecciona un operador funcional  $H$  que induce una métrica evaluable y reproducible sobre los estados relevantes del circuito. La selección se guía por criterios de aceptabilidad práctica: (i) coherencia con una referencia teórica o empírica equivalente, y (ii) capacidad de capturar el criterio estándar de desempeño de la instancia considerada. Estos criterios constituyen condiciones operativas orientadas a asegurar la utilidad del análisis en tareas de evaluación y verificación propias de Q-SE.

En las subsecciones siguientes se describen las instancias concretas de  $H$  adoptadas en cada caso de estudio.

#### Hipercubo acuñado con moneda de Grover y operador *flip-flop* (SKW):

$H_{\text{prob}}$  y  $H_{\text{ener}}$  En el algoritmo de búsqueda SKW sobre hipercubos  $Q_n$ , se consideran dos operadores hermitianos que inducen métricas funcionales alineadas

con criterios operacionales relevantes para la evaluación del desempeño del algoritmo.

El primero corresponde al criterio estándar de éxito, asociado a la probabilidad de encontrar el vértice marcado  $|t\rangle$ :

$$H_{\text{prob}} = -|t\rangle\langle t|. \quad (10)$$

Para un estado  $|\psi(t)\rangle$ , la métrica inducida por  $H_{\text{prob}}$  viene dada por:

$$M_{H_{\text{prob}}}(\psi(t)) = \langle\psi(t)|H_{\text{prob}}|\psi(t)\rangle = -|\langle t|\psi(t)\rangle|^2. \quad (11)$$

Como criterio funcional complementario, se introduce un operador que incorpora información estructural del grafo subyacente a través de su matriz de adyacencia:

$$H_{\text{ener}} = -\gamma A - |t\rangle\langle t|, \quad (12)$$

donde  $A$  denota la matriz de adyacencia del hipercubo y  $\gamma > 0$  regula la escala relativa del término de acoplamiento.

La métrica inducida por  $H_{\text{ener}}$  para un estado  $|\psi(t)\rangle$  adopta la forma:

$$M_{H_{\text{ener}}}(\psi(t)) = \langle\psi(t)|H_{\text{ener}}|\psi(t)\rangle = -\gamma\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle - |\langle t|\psi(t)\rangle|^2. \quad (13)$$

**Fase cuántica del algoritmo de Shor: operador de periodicidad  $H_{\text{per}}$**  En el algoritmo de Shor, restringido en este trabajo a la fase cuántica de estimación de período (QPE), se emplea un operador hermitiano de periodicidad para evaluar el alineamiento del estado con la estructura periódica relevante del problema.

Se define:

$$H_{\text{per}} = \sum_{m \in M_r} |m\rangle\langle m| \otimes I_{\text{work}}, \quad (14)$$

donde  $M_r$  es el conjunto de índices del registro de conteo compatibles con el período buscado  $r$ .

Por construcción,  $H_{\text{per}}$  es un proyector hermitiano sobre el subespacio del registro de conteo asociado a dichos índices. Dado un estado  $|\psi\rangle$ , se define el estado evaluado tras aplicar  $\text{QFT}^\dagger$  como:

$$|\tilde{\psi}\rangle := (\text{QFT}^\dagger \otimes I_{\text{work}})|\psi\rangle. \quad (15)$$

La probabilidad de obtener al medir el registro de conteo un índice  $m \in M_r$  es:

$$E_{\text{per}}(\psi) = \langle\tilde{\psi}|H_{\text{per}}|\tilde{\psi}\rangle. \quad (16)$$

Siguiendo la convención global adoptada en SMEF (costo a minimizar), la métrica funcional asociada se define como:

$$M_{H_{\text{per}}}(\psi) := -E_{\text{per}}(\psi) = -\langle\tilde{\psi}|H_{\text{per}}|\tilde{\psi}\rangle. \quad (17)$$

La aceptabilidad de  $H_{\text{per}}$  se evalúa verificando que  $E_{\text{per}}(\psi_{\text{out}})$  sea coherente con la predicción teórica para la instancia considerada, de acuerdo con el análisis formal del algoritmo de Shor.

Observables alternativos basados en magnitudes energéticas no resultan adecuados para capturar la estructura de fase que determina el éxito del algoritmo en este contexto, como se discute en la Sección 5.

### 3.3. Complejidad y escalabilidad del marco SMEF

El cálculo de los valores de Shapley presenta una **complejidad exponencial** ( $2^L$ ) respecto al número de bloques modulares  $L$  (Shapley, 1953). En el contexto de la Ingeniería de Software Cuántico (Q-SE), esta carga computacional es aceptable, dado que SMEF se concibe como una herramienta de evaluación **offline**, orientada a la precisión diagnóstica en tareas de auditoría, validación y detección de errores, más que a la ejecución masiva o en tiempo real.

La viabilidad del marco radica en que su escalabilidad depende exclusivamente del **nivel de abstracción modular** ( $L$ ) adoptado por el analista y no del número de qubits, la profundidad del circuito ni la dimensionalidad del espacio de Hilbert (Johnston et al., 2019). Esto permite aplicar SMEF a algoritmos cuánticos complejos siempre que se mantenga una partición funcional con semántica clara y un número controlado de bloques.

Para escenarios en los que  $L$  resulte elevado, el marco es compatible con el uso de técnicas de **muestreo o aproximación** de valores de Shapley, ampliamente estudiadas en la literatura, como mecanismos para reducir el costo computacional sin perder interpretabilidad funcional. En particular, métodos basados en *muestreo de permutaciones aleatorias* (por ejemplo, aproximaciones de tipo Monte Carlo) permiten estimar los valores de Shapley con garantías estadísticas, reduciendo significativamente el costo computacional para valores grandes de  $L$  (Castro et al., 2009; Fatima et al., 2008).

## 4. Caso de estudio I: Búsqueda en hipercubo (SKW)

En esta sección se instancia el marco SMEF sobre el algoritmo de búsqueda en hipercubo SKW (Shenvi–Kempe–Whaley) (Kempe, 2003; Portugal, 2013; Shenvi et al., 2003), con el objetivo de evaluar su capacidad para descomponer cuantitativamente la contribución funcional de los principales bloques del algoritmo desde una perspectiva de Ingeniería de Software Cuántico (Q-SE).

Se emplea el modelo canónico de caminata cuántica acuñada sobre el hipercubo  $Q_n$ , en el cual cada iteración combina un oráculo de fase  $R'$  que marca el vértice objetivo  $|t\rangle$ , una moneda de Grover  $G$  y un operador de desplazamiento tipo *flip-flop*  $S$ . El paso unitario marcado se expresa como:

$$U' = S(G \otimes I_{N_p})R', \quad (18)$$

fijando el orden físico de ejecución  $R' \rightarrow G \rightarrow S$ , el cual se preserva estrictamente en la construcción de prefijos y coaliciones dentro del marco SMEF.

#### 4.1. Instanciación de SMEF en SKW

Desde la perspectiva de SMEF, el circuito se particiona en tres bloques funcionales:

$$\mathcal{B} = \{O, G, S\}, \quad (19)$$

donde  $O \equiv R'$  denota el oráculo de fase. Esta partición refleja unidades funcionales con semántica operacional bien definida y constituye el nivel de abstracción sobre el cual se realiza el análisis.

Para la evaluación funcional se consideran dos observables representativos:

$$H_{\text{prob}} = -|t\rangle\langle t|, \quad H_{\text{ener}} = -\gamma A - |t\rangle\langle t|, \quad (20)$$

correspondientes, respectivamente, a la probabilidad de éxito y a un criterio energético que incorpora información estructural del grafo. En ambos casos, la métrica operacional se define como:

$$M_H(\psi) := \langle \psi | H | \psi \rangle, \quad (21)$$

siguiendo la convención de valor global de SMEF, donde valores menores indican mejor desempeño funcional.

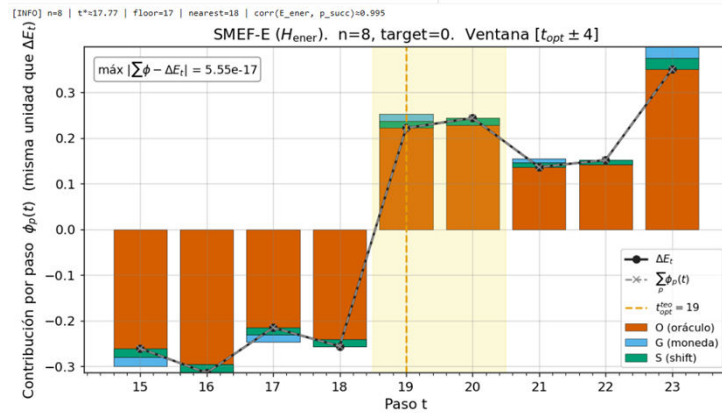
Los valores de Shapley por paso se obtienen aplicando el mecanismo de atribución definido en la Sección 3.1, evaluando la función de valor sobre todas las coaliciones posibles asociadas a la partición funcional definida en (19).

#### 4.2. Resultados de atribución funcional

Consideramos un hipercubo de dimensión  $n = 8$  y analizamos el paso  $t = 18$ , cercano al óptimo teórico. La Fig. 1 muestra las contribuciones funcionales por bloque obtenidas bajo el observable energético  $H_{\text{ener}}$ .

El oráculo ( $O$ ) aporta la contribución positiva dominante, mientras que la moneda de Grover ( $G$ ) presenta una contribución negativa transitoria y el operador de desplazamiento ( $S$ ) contribuye positivamente en menor magnitud. Este perfil es coherente con el rol esperado de cada bloque en la dinámica del algoritmo y valida la capacidad de SMEF para capturar dicha estructura funcional de manera cuantitativa.

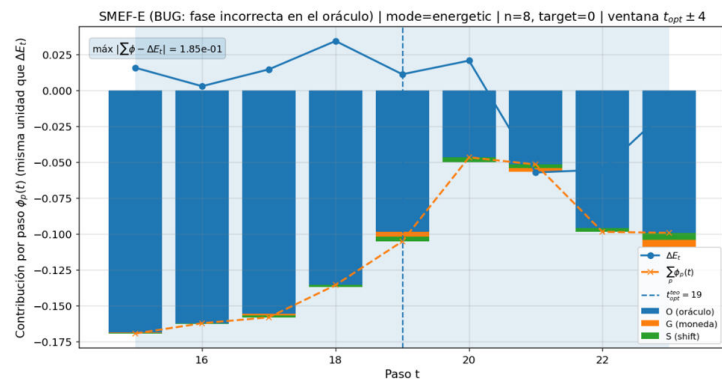
La contribución negativa observada para la moneda de Grover no debe interpretarse como un comportamiento defectuoso, sino como una consecuencia del criterio funcional adoptado. En el marco de SMEF, una contribución negativa indica que, en combinación con ciertas coaliciones, el bloque incrementa transitoriamente el valor de la métrica de costo, alejando momentáneamente al estado del objetivo definido por el observable energético. Este comportamiento refleja la naturaleza no monótona de la dinámica de la caminata cuántica y el rol exploratorio de la moneda dentro del algoritmo.



**Figura 1.** Descomposición funcional por paso bajo la métrica  $H_{\text{ener}}$  ( $n = 8$ , vértice objetivo  $|0\rangle$ ). La ventana muestra pasos alrededor del óptimo teórico  $t_{\text{opt}} = 19$ .

#### 4.3. Detección y localización de anomalías

Para evaluar el uso de SMEF como herramienta de verificación y depuración, se introduce deliberadamente un error funcional en el oráculo de fase, reemplazando la fase correcta  $\pi$  por un valor  $\theta \neq \pi$ . Esta modificación no altera la estructura del circuito ni la secuencia de bloques, sino únicamente el comportamiento funcional del oráculo.



**Figura 2.** Perfil funcional bajo una implementación defectuosa del oráculo ( $\theta \neq \pi$ ).

La Fig. 2 muestra el perfil de contribuciones resultante bajo esta implementación defectuosa, donde la contribución asociada al oráculo se desalineada sistemáticamente respecto del caso correcto.

Este efecto se cuantifica mediante el *residuo de eficiencia* por paso:

$$\varepsilon(t) = \left| \sum_{p \in \mathcal{B}} \phi_p(t) - \Delta E_t \right|, \quad (22)$$

donde  $\Delta E_t := M_H(\rho_{t+1}) - M_H(\rho_t)$  denota la variación de la métrica funcional inducida por el bloque completo en el paso  $t$ . En una implementación correcta se tiene  $\varepsilon(t) = 0$  (salvo error numérico), mientras que bajo el bug de fase el residuo se vuelve sistemáticamente distinto de cero.

Para los parámetros considerados, se observa un residuo máximo  $\varepsilon(t) \approx 1,85 \times 10^{-1}$  en la vecindad del óptimo, lo que permite localizar de manera inequívoca el error en el bloque del oráculo sin necesidad de inspeccionar el circuito a nivel de compuertas.

## 5. Caso de estudio II: Aplicación a la estimación de fase del algoritmo de Shor

La estimación de fase cuántica (QPE) constituye el núcleo funcional del algoritmo de Shor (Shor, 1997). En este caso de estudio se instancia SMEF sobre dicha etapa con un objetivo doble, en correspondencia directa con el esquema aplicado en el caso de estudio SKW: (i) analizar, mediante un análisis por prefijos, cómo se construye progresivamente la señal de periodicidad a lo largo del circuito, y (ii) cuantificar, a nivel global, la contribución funcional de los bloques principales mediante valores de Shapley, bajo un criterio operacional explícito.

### 5.1. Notación y parámetros de la instancia

Sea  $N$  el entero compuesto a factorizar y sea  $a$  un entero tal que  $\gcd(a, N) = 1$ . El período (u orden)  $r$  es el menor entero positivo que satisface  $a^r \equiv 1 \pmod{N}$ . La etapa cuántica implementa la estimación de fase del operador unitario  $U_{a,N}$  asociado a la multiplicación modular sobre el registro de trabajo, por ejemplo:

$$U_{a,N}|x\rangle = |ax \bmod N\rangle. \quad (23)$$

El circuito utiliza un registro de conteo de  $m$  qubits, cuyo espacio de medición es  $\{0, 1, \dots, 2^m - 1\}$ , y un registro de trabajo que codifica los estados computacionales relevantes del módulo  $N$ . Denotamos por  $y \in \{0, \dots, 2^m - 1\}$  el resultado de medir el registro de conteo.

El observable de periodicidad se define como:

$$H_{\text{per}} = \sum_{y \in M_r} |y\rangle\langle y| \otimes I_{\text{work}}, \quad (24)$$

donde  $M_r \subseteq \{0, \dots, 2^m - 1\}$  es el conjunto de índices exitosos compatibles con el período  $r$ . Por construcción, para un estado evaluado luego de la lectura,  $\langle \psi | H_{\text{per}} | \psi \rangle$  coincide con la probabilidad  $\Pr[y \in M_r]$ .

En un escenario de auditoría o testing, el conjunto  $M_r$  puede construirse de manera operativa a partir de hipótesis candidatas del período o ventanas de aceptación compatibles con fracciones racionales observadas en la distribución de salida, de forma coherente con el objetivo del análisis (Nielsen y Chuang, 2011; Shor, 1997).

## 5.2. Partición modular

El circuito de estimación de fase se descompone en los siguientes bloques funcionales:

- $B_0$ : inicialización del registro de trabajo;
- $B_1$ : aplicación de compuertas Hadamard sobre el registro de conteo;
- $B_{2,k}$ : exponenciación modular controlada  $U_{a,N}^{2^k}$ .

La etapa de lectura (aplicación de  $\text{QFT}^\dagger$  y medición) se considera un post-procesamiento fijo de evaluación y no un bloque funcional atribuible, en coherencia con el criterio de éxito basado en la detección de periodicidad.

Sobre esta partición realizamos dos análisis complementarios, en correspondencia directa con el esquema aplicado en el caso de estudio SKW:

1. **Análisis por prefijos**, que permite localizar *cuándo* se construye la señal de periodicidad a lo largo de la ejecución;
2. **Atribución global mediante valores de Shapley**, que permite cuantificar *cuánto* aporta cada bloque al desempeño funcional global.

**Análisis por prefijos con observable de periodicidad** Sea  $S_b = (B_0, \dots, B_b)$  una secuencia de prefijos anidados que preserva el orden físico de ejecución. Sea  $|\psi_{S_b}\rangle$  el estado inducido por el prefijo antes de la lectura y definimos el estado evaluado como:

$$|\tilde{\psi}_{S_b}\rangle := (\text{QFT}^\dagger \otimes I_{\text{work}})|\psi_{S_b}\rangle. \quad (25)$$

En consecuencia,

$$E_{\text{per}}(S_b) := \langle \tilde{\psi}_{S_b} | H_{\text{per}} | \tilde{\psi}_{S_b} \rangle = \Pr[y \in M_r \mid S_b]. \quad (26)$$

Siguiendo la convención global de SMEF, la métrica funcional se interpreta como costo:

$$M_{H_{\text{per}}}(S_b) := -E_{\text{per}}(S_b). \quad (27)$$

El valor del prefijo como mejora respecto de un prefijo de referencia  $S_{\text{ref}}$  (típicamente el prefijo vacío) queda:

$$v(S_b) = E_{\text{per}}(S_b) - E_{\text{per}}(S_{\text{ref}}), \quad (28)$$

con  $v(S_{\text{ref}}) = 0$ .

La contribución marginal secuencial del bloque incorporado en el paso  $b$  se define como:

$$\Delta_b = v(S_b) - v(S_{b-1}) = E_{\text{per}}(S_b) - E_{\text{per}}(S_{b-1}), \quad b \geq 1. \quad (29)$$

### 5.3. Valores de Shapley a nivel de circuito usando el observable de periodicidad

Complementando el análisis por prefijos, se calculan valores de Shapley a nivel de circuito completo, modelando cada bloque funcional como un jugador distinguible de un juego cooperativo.

Sea

$$B = \{B_0, B_1, B_{2,0}, \dots, B_{2,m-1}\} \quad (30)$$

el conjunto de bloques funcionales considerados. El orden físico de ejecución se mantiene fijo y la lectura se trata como un post-procesamiento común a todas las evaluaciones.

**Coaliciones** Para una coalición  $C \subseteq B$ , el circuito efectivo se construye preservando el orden físico de los bloques y sustituyendo por la identidad aquellos bloques ausentes. Sea  $|\psi_C\rangle$  el estado resultante previo a la lectura, y se define:

$$|\tilde{\psi}_C\rangle = (\text{QFT}^\dagger \otimes I_{\text{work}})|\psi_C\rangle. \quad (31)$$

**Métrica funcional y función de valor** La probabilidad de éxito asociada al observable de periodicidad es:

$$E_{\text{per}}(C) := \langle \tilde{\psi}_C | H_{\text{per}} | \tilde{\psi}_C \rangle. \quad (32)$$

Siguiendo la convención global de SMEF, la métrica funcional se interpreta como costo:

$$M_{H_{\text{per}}}(C) := -E_{\text{per}}(C), \quad (33)$$

y la función de valor queda:

$$v(C) = E_{\text{per}}(C) - E_{\text{per}}(\emptyset). \quad (34)$$

**Atribución mediante valores de Shapley** Sobre la función de valor  $v(C)$  se define el valor de Shapley asociado a cada bloque  $i \in B$  conforme a la definición estándar. En particular, se satisface la propiedad de eficiencia:

$$\sum_{i \in B} \phi_i = v(B), \quad (35)$$

garantizando que la suma de las contribuciones funcionales reproduce exactamente la mejora global inducida por el circuito completo.

La Figura 3 muestra los valores de Shapley obtenidos para cada bloque funcional en la etapa de estimación de fase del algoritmo de Shor, para la instancia  $(N = 21, a = 2)$ , donde  $N$  denota el entero compuesto a factorizar y  $a$  un entero coprimo con  $N$  que define el operador de multiplicación modular.

El gráfico evidencia una contribución dominante de los bloques de preparación y superposición, así como una distribución progresiva de las contribuciones asociadas a los bloques de fase, coherente con el rol funcional esperado de cada componente dentro de la QPE.



**Figura 3.** Valores de Shapley por bloque en la etapa de estimación de fase del algoritmo de Shor para la instancia ( $N = 21, a = 2$ ).

**Sobre el uso de un observable energético en Shor** Con fines comparativos, se evaluó adicionalmente un observable *ad hoc* de tipo energético, expresado como un operador hermitiano funcional con interpretación energética (i.e., un Hamiltoniano):

$$H_{\text{ener}}^{\text{Shor}} = -\gamma K_{\text{count}} \otimes I_{\text{work}} - H_{\text{per}}, \quad (36)$$

donde  $K_{\text{count}}$  es un operador diagonal definido sobre el registro de conteo y  $\gamma > 0$  es un peso escalar.

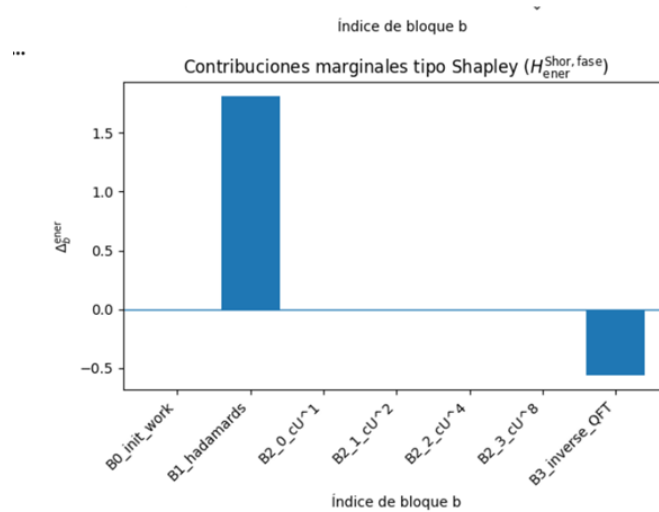
El parámetro  $\gamma$  regula el peso relativo del término  $K_{\text{count}}$  frente al observable de periodicidad  $H_{\text{per}}$ . En este trabajo se adopta un valor fijo de  $\gamma$  con fines comparativos, sin pretender optimizar dicho Hamiltoniano energético, dado que el objetivo es analizar la sensibilidad del marco SMEF a la elección del observable funcional y no ajustar un operador energético específico.

A diferencia del caso de estudio SKW, donde el objetivo del algoritmo puede interpretarse de manera geométrica como la localización progresiva de amplitud en un vértice objetivo del hipercubo, la etapa de estimación de fase del algoritmo de Shor se basa en una estructura esencialmente interferencial. En SKW, el uso de un Hamiltoniano energético resulta adecuado porque la dinámica del algoritmo puede asociarse de forma directa con una noción de distancia funcional al objetivo, permitiendo que variaciones en la expectativa energética reflejen de manera coherente el progreso del algoritmo.

En cambio, en la QPE de Shor el éxito no se define por la concentración espacial de amplitud, sino por la alineación global de fases que codifican el período buscado. En este contexto, los observables de tipo energético no capturan de manera directa la estructura de fase responsable del éxito del algoritmo y pueden introducir señales que no se corresponden con el criterio operacional principal.

La Figura 4 ilustra empíricamente esta limitación mediante las contribuciones marginales tipo Shapley calculadas con  $H_{\text{ener}}^{\text{Shor}}$ . En particular, se observa que los bloques de exponenciación modular controlada presentan contribuciones prácticamente nulas, mientras que las contribuciones se concentran en los bloques

de preparación y lectura. Este resultado confirma que el observable energético no es sensible a la dinámica interferencial que determina el éxito del algoritmo.



**Figura 4.** Contribuciones marginales tipo Shapley por bloque funcional en la etapa de estimación de fase del algoritmo de Shor, calculadas utilizando el observable energético  $H_{\text{ener}}^{\text{Shor}}$ .

## 6. Conclusión

En este trabajo se presentó un estudio sistemático de la atribución funcional en algoritmos cuánticos mediante la aplicación de SMEF a dos arquitecturas representativas: la búsqueda SKW sobre hipercubos y la etapa de estimación de fase (QPE) del algoritmo de Shor. En ambos casos, los resultados obtenidos muestran que el marco permite descomponer el comportamiento global del circuito en contribuciones funcionales coherentes con el rol esperado de sus bloques constitutivos.

Las instanciaciones consideradas evidencian que el mecanismo de atribución basado en valores de Shapley produce descomposiciones consistentes bajo distintas métricas funcionales y arquitecturas cuánticas estructuralmente diferentes. En particular, la combinación de análisis por prefijos y atribución funcional global permite identificar no solo la magnitud de la contribución de cada bloque, sino también su relevancia funcional a lo largo de la ejecución del algoritmo.

Desde el punto de vista metodológico, la validación experimental se centra en la propiedad de eficiencia, la cual se verifica explícitamente en ambos casos de estudio y se utiliza como criterio diagnóstico para la detección y localización de anomalías funcionales. Este enfoque resulta especialmente adecuado para

evaluar la consistencia numérica y semántica de las descomposiciones obtenidas sin recurrir a la inspección a nivel de compuertas.

Asimismo, la comparación entre SKW y Shor pone de manifiesto la importancia de seleccionar observables funcionales coherentes con la naturaleza operacional del algoritmo analizado. Mientras que en algoritmos con una interpretación geométrica o espacial, como SKW, los observables de tipo energético resultan adecuados para capturar el progreso funcional, en algoritmos de naturaleza esencialmente interferencial, como la QPE de Shor, el uso de operadores de periodicidad o proyectores de fase constituye una elección más apropiada. Esta observación permite formular heurísticas de aceptabilidad práctica que orientan la aplicación del marco en distintos contextos.

En términos de viabilidad práctica, los resultados indican que SMEF es aplicable al análisis de algoritmos cuánticos complejos siempre que se adopte una partición funcional interpretable, con un número acotado de bloques de semántica clara. Si bien el cálculo exacto de valores de Shapley presenta una complejidad exponencial en el número de bloques, esta limitación es coherente con el nivel de abstracción considerado y con los objetivos de evaluación funcional perseguidos. El estudio de estrategias de aproximación o muestreo se plantea como una línea de trabajo futura.

## Referencias

- Aharonov, D., Ambainis, A., Kempe, J., & Vazirani, U. (2001). Quantum walks on graphs. *Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, 50-59. <https://doi.org/10.1145/380752.380758>
- Burge, I., Barbeau, M., & García-Alfaro, J. (2023). A quantum algorithm for Shapley value estimation. *arXiv*.
- Castro, J., Gómez, D., & Tejada, J. (2009). Polynomial calculation of the Shapley value based on sampling. *Computers & Operations Research*, 36(5), 1726-1730. <https://doi.org/10.1016/j.cor.2008.04.004>
- Fatima, S. S., Wooldridge, M., & Jennings, N. R. (2008). A linear approximation method for the Shapley value. *Artificial Intelligence*, 172(14), 1673-1699. <https://doi.org/10.1016/j.artint.2008.04.003>
- Heese, R., Gerlach, T., Mücke, S., Müller, S., Jakobs, M., & Piatkowski, N. (2025). Explaining quantum circuits with Shapley values: Towards explainable quantum machine learning. *Quantum Machine Intelligence*, 7(1). <https://doi.org/10.1007/s42484-025-00254-8>
- Huang, Y., & Martonosi, M. (2019). Statistical assertions for validating patterns and finding bugs in quantum programs. *Proceedings of the 46th International Symposium on Computer Architecture (ISCA)*, 541-553. <https://doi.org/10.1145/3307650.3322213>
- Johnston, E., Harrigan, N., & Gimeno-Segovia, M. (2019). *Programming quantum computers: Essential algorithms and code samples*. O'Reilly Media.

- Kempe, J. (2003). Quantum random walks: An introductory overview. *Contemporary Physics*, 44(4), 307-327. <https://doi.org/10.1080/00107151031000110776>
- Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2011). *Quantum computation and quantum information* (10th Anniversary Edition). Cambridge University Press.
- Paltenghi, R., & Pradel, M. (2024). Analyzing quantum programs with LintQ: A static analysis framework. *Proceedings of the ACM on Software Engineering*, 1. <https://doi.org/10.1145/3660802>
- Portugal, R. (2013). *Quantum walks and search algorithms*. Springer.
- Shapley, L. S. (1953). A value for n-person games. *Contributions to the Theory of Games*, 2, 307-317.
- Shenvi, N., Kempe, J., & Whaley, K. B. (2003). Quantum random-walk search algorithm. *Physical Review A*, 67(5), 052307. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.67.052307>
- Shor, P. W. (1997). Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *Proceedings of the 37th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 56-65. <https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365700>
- Young, H. P. (1985). Monotonic solutions of cooperative games. *International Journal of Game Theory*, 14(2), 65-72. <https://doi.org/10.1007/BF01769883>