

Aplicação de um algoritmo quântico para obtenção de autoenergias de potenciais oscilatórios

José Irailson J. Santos, Clélio B. Gomes, Andre M. C. Souza

Departamento de Física, Universidade Federal de Sergipe, 49100-00, São Cristóvão-SE, Brasil

irailsonsantos@hotmail.com, amcsouza@ufs.br

(Recebido em 30 de julho de 2010; aceito em 28 de outubro de 2010)

O estudo dos algoritmos quânticos tem aumentado sua importância nos últimos anos devido à sua maior eficiência quando comparado com os algoritmos clássicos. Cálculo de sistemas quânticos de muitas partículas é quase impossível quando se utiliza de dispositivos clássicos, dessa forma, algoritmos quânticos têm sido utilizados para estimar autoenergias de sistemas físicos. Utilizando-se de um algoritmo quântico descreveremos neste trabalho um método iterativo de obtenção das auto-energias de um sistema descrito por potenciais harmônicos. O sistema inicia-se em um estado aleatório e após sucessivas iterações convergirá para um estado de energia E_n .

Palavras-chave: computação quântica, algoritmo quântico, qubit

The study of quantum algorithms has gained importance in recent years due to its higher efficiency when compared with algorithms classics. Calculation of quantum systems of many particles is almost impossible when using traditional devices, thus, quantum algorithms have been used to estimate the energies of physical systems. Using a quantum algorithm, we describe in this work an iterative method for obtaining the energies of a system described by harmonic potential. The system starts in a random state and after successive iterations converge to an eigenvalue of energy E_n .

Keywords: quantum computer, quantum algorithm, qbit

1. INTRODUÇÃO

A Computação Quântica surgiu no início da década de 80 envolvendo três grandes áreas do conhecimento: Matemática, Física e Computação. Na computação Quântica a unidade básica de informação é o qubit ou qbit. Um qbit pode assumir os valores de 0 ou 1, assim como um bit convencional. A grande vantagem é que um qbit pode assumir valores superpostos desses dois estados e é nesta propriedade que se encontra toda a diferença, tornando a computação quântica mais eficiente e uma alternativa para solução de problemas de sistemas de criptografia, inteligência artificial, dentre outros. Utilizando conceitos de Mecânica Quântica, alguns algoritmos quânticos já foram criados e apresentam um surpreendente desempenho quando comparados com seus análogos clássicos. Na computação clássica, na maioria dos algoritmos, o tempo de cálculo aumenta exponencialmente com o tamanho do sistema simulado enquanto que num computador quântico este tempo cresce apenas polinomialmente. Deutsch [1] propôs, em 1985, um algoritmo utilizando apenas operações quânticas, capaz de resolver um determinado problema matemático de forma mais eficiente que por métodos clássicos. Kitaev [2] desenvolveu um algoritmo baseado na estimação de fase para encontrar autovalores de um operador cujos autovetores são conhecidos. A essência deste algoritmo está no fato de que conhecido os autoestados do hamiltoniano e mantendo estes intactos durante as iterações, determina-se sucessivamente a fase destes auto-estados. Daniel S. Abrams e Seth Lloyd [3] desenvolveram um algoritmo quântico que utiliza uma transformada de Fourier quântica (QFT) para encontrar autovalores e autovetores de um Hamiltoniano local em tempo polinomial mesmo em casos que algoritmos clássicos exigem tempo exponencial. A energia do estado fundamental da água, do Hidreto de Lítio, e de moléculas de hidrogênio foram calculadas por Aspuru-Guzik et al [4] utilizando-se de algoritmos quânticos semelhantes aos citados acima. Com o objetivo de investigar a precisão na implementação física de computadores quânticos Dobsicek et al [5] introduziu uma correção de fase, uma mudança na energia de referencia no o algoritmo de Kitaev. Diferentemente de Abrams e Lloyd em que um estado inicial era assumido, Péter Varga e Barnabás Apagyí [6] desenvolveram um algoritmo quântico que se inicia em um estado completamente aleatório e usando um qbit auxiliar, determina-se uma mudança na energia de referência através de medidas sucessivas desse qbit auxiliar.

O objetivo deste trabalho é aplicar o algoritmo quântico de Varga e Apagyí [6] para obtenção de autoenergias de potenciais oscilatórios. Na sessão 2 descrevemos o algoritmo quântico de Varga e Apagyí [6], analisando as condições de convergência do algoritmo. Na sessão 3 aplicamos o algoritmo quântico de Varga e Apagyí [6] a um sistema físico quântico cujo potencial é do tipo $V=x^{\lambda}/\lambda$, onde λ é uma constante real e x a posição da partícula, a fim de obter por meio de um processo iterativo suas autoenergias. Também nessa sessão observamos que quando $\lambda=2$, o resultados obtidos nesse trabalho ratificam os encontrados na referência [6] e complementamos a aplicação do algoritmo para $\lambda=3$. Na sessão 4 apresentamos as conclusões desse trabalho.

2. DESCRIÇÃO DO ALGORITMO

O algoritmo se inicia num estado aleatório que chamaremos de $|\Phi_0\rangle$. Este estado é produto de um qbit auxiliar $|\alpha\rangle$ e um estado $|\Psi_0\rangle$ do sistema simulado. Deste modo,

$$|\Phi_0\rangle = |\alpha\rangle |\Psi_0\rangle \tag{1}$$

O qbit auxiliar desse estado inicial é suposto $|0\rangle$ na primeira iteração do algoritmo e escrevendo o estado $|\Psi_0\rangle$ na base dos auto-estados do hamiltoniano que descreve o sistema, a equação (1) torna-se:

$$|\Phi_0\rangle = |0\rangle \sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle \tag{2}$$

O sistema evolui do estado $|\Psi_0\rangle$ para o estado $|\Psi_1\rangle$ através da aplicação de portas lógicas quânticas e unitárias do tipo Hadamard $H_{ad} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, que cria uma superposição de estados quânticos quando aplicada a um qbit $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ou $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ [7] e do tipo operador evolução temporal $U_n(t_n) = e^{-iHt_n}$, que descreve como o sistema evolui no tempo, onde H é o hamiltoniano e t é o tempo [7]. Uma porta Hadamard (H_{ad}) é um operador sem significado clássico e sua aplicação resulta em uma sobreposição de dois outros estados:

$$H_{ad}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \text{ ou } H_{ad}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \tag{3}$$

Na figura 1, representamos a primeira iteração do algoritmo. Representamos separadamente a linha de tempo para o estado auxiliar (qbit) e para o estado do sistema.

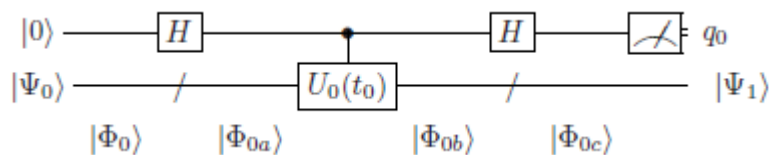


Figura 1. Primeira iteração do algoritmo (figura retirada de [6].)

O estado auxiliar inicialmente é descrito por $|0\rangle$ que sofre a ação da porta Hadarmard (H_{ad}). Após a aplicação da porta Hadamard no qbit auxiliar da equação (2) o estado é escrito como:

$$|\Phi_{0a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle \quad (4)$$

Em seguida o estado sofre a atuação do operador U controlada pelo qbit auxiliar – este operador atua apenas no estado do qbit auxiliar $|1\rangle$, resultando no estado $|\Phi_{0b}\rangle$:

$$|\Phi_{0b}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle \sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle + |1\rangle \sum_k c_0^k e^{-iE_k t_0} |\Psi^k\rangle \right) \quad (5)$$

A primeira iteração do algoritmo termina com a aplicação de uma porta Hadamard na equação (5), resultando no estado:

$$\begin{aligned} |\Phi_{0c}\rangle &= \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle + \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle) \sum_k c_0^k e^{-iE_k t_0} |\Psi^k\rangle \\ |\Phi_{0c}\rangle &= \frac{1}{2}|0\rangle \left(\sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle (1 + e^{-iE_k t_0}) \right) + \frac{1}{2}|1\rangle \left(\sum_k c_0^k |\Psi^k\rangle (1 - e^{-iE_k t_0}) \right) \end{aligned} \quad (6)$$

Terminada a primeira iteração do algoritmo é feita a medida do qbit auxiliar q_n , e desta forma, após alguns cálculos, é fácil mostrar que o sistema apresenta as seguintes probabilidades de se medir os qbits $q_0=0$ ou $q_0=1$, respectivamente:

$$|P_0^{|0\rangle}\rangle = \frac{1}{4} \sum_k |c_0^k (1 + e^{-iE_k t_0})|^2 \quad (7)$$

$$|P_0^{|1\rangle}\rangle = \frac{1}{4} \sum_k |c_0^k (1 - e^{-iE_k t_0})|^2 \quad (8)$$

Das equações (7) e (8), pode-se observar que durante o processo iterativo, se a fase $E_k t_0$ for próximo de 0 temos que o valor da exponencial fica próximo de 1, e assim

$$|P_0^{|0\rangle}\rangle \approx \sum_k |c_0^k|^2 = 1 \quad \text{e} \quad |P_0^{|1\rangle}\rangle \approx \sum_k 0 = 0 \quad (9a)$$

Que significa que é mais provável medir o qbit auxiliar como sendo $|0\rangle$. De maneira semelhante, se a fase $E_k t_0$ for próximo de π , o valor da exponencial fica próximo de -1, e assim

$$|P_0^{|1\rangle}\rangle \approx \sum_k |c_0^k|^2 = 1 \quad \text{e} \quad |P_0^{|0\rangle}\rangle \approx \sum_k 0 = 0 \quad (9b)$$

sendo mais provável medir o qbit auxiliar $|1\rangle$.

Após a medida do qbit auxiliar o estado de saída será $|\Psi_1\rangle$, que funcionará como entrada para a próxima iteração, e expandindo em termos dos autoestados do hamiltoniano este estado resulta em:

$$|\Psi_1\rangle = \sum_k c_1^k |\Psi^k\rangle \quad (10)$$

Por conveniência introduz-se uma correção de fase E_n na energia do sistema de tal forma que na (n+1)-ésima iteração a equação (3) torna-se:

$$U_n(t_n) = e^{-i(H-E_n)t_n} \quad (11)$$

onde

$$t_n = \pi \frac{2^n}{E_{\text{máx}} - E_{\text{mín}}} \quad (12)$$

e $E_{m\acute{a}x}$ e $E_{m\acute{m}n}$ s\~{a}o, respectivamente, as energias m\~{a}xima e m\~{i}nima supostas para o sistema simulado e elas variam da seguinte forma:

•quando medido $q_n=0$:
$$E_{m\acute{a}x} = E_{m\acute{a}x} - \frac{E_{m\acute{a}x} - E_{m\acute{m}n}}{2^{n+1}} \tag{13}$$

•quando medido $q_n=1$:
$$E_{m\acute{m}n} = E_{m\acute{m}n} + \frac{E_{m\acute{a}x} - E_{m\acute{m}n}}{2^{n+1}} \tag{14}$$

E em qualquer dos dois casos E_n -energia aproximada do sistema na n-\~{e}sima itera\~{c}\~{a}o, ser\~{a}:

$$E_{n+1} = E_n + \frac{E_{m\acute{a}x} - E_{m\acute{m}n}}{2^{n+1}} \tag{15}$$

3. RESULTADOS E DISCUSS\~{O}ES

No nosso estudo analisamos o hamiltoniano cuja parte potencial \~{e} a seguinte:

$$V = \frac{|x|^\lambda}{\lambda} \tag{16}$$

em que λ \~{e} uma constante real e x a posi\~{c}\~{a}o da part\~{i}cula.

Tabela 1: Evolu\~{c}\~{a}o temporal dos valores de energia E_{max} e E_{min} e E_n para $\lambda=2$

n	Qbit	E_{min}	E_{max}	E_n
0	0	0	100	0
1	0	0	50	0
2	0	0	25	0
3	0	0	12.5	0
4	0	0	6.25	0
5	0	0	3.125	0
6	1	1.5625	3.125	1.5625
7	0	1.5625	2.3438	1.5625
8	1	1.9531	2.3438	1.9531
9	0	1.9531	2.1484	1.9531
10	0	1.9531	2.0508	1.9531
11	1	2.002	2.0508	2.002
12	1	2.0264	2.0508	2.0264
13	1	2.0386	2.0508	2.0386
14	1	2.0447	2.0508	2.0447
15	0	2.0447	2.0477	2.0447
16	1	2.0462	2.0477	2.0462
17	1	2.047	2.0477	2.047
18	0	2.047	2.0473	2.047
19	1	2.0472	2.0473	2.0472
20	1	2.0473	2.0473	2.0473

No nosso programa numérico, temos que definir um intervalo de valores da posição x . Consideramos $x \in [-A, A]$ e o dividimos em $N-1$ intervalos iguais com espaçamento $\Delta x=2A/(N-1)$. A quantidade de pontos N depende do número de qbits d que formam o registrador do computador quântico, de forma que $N=2^d$. Cada ponto está associado com um estado de uma base ortonormal e pode ser representada como $x_j=-A+j\Delta x$, com $j=0,1,2,\dots,N-1$. Na tabela 1 apresentamos a evolução temporal dos valores de E_{max} , E_{min} e E_n . Pode-se observar sua convergência para o auto-estado de energia $E_k=2.0473$. Os dados foram obtidos para a seguinte situação: $A=4$, $E_{máx}=100$, $E_{mín}=0$, $E_0=0$, $N=256$, $\lambda=2$, com $c_0^k=1$ se $k=63$ e $c_0^k=0$ para outros valores de k , que corresponde à posição $x=-2.0235$ ao valor teórico de energia igual a 2.0473, demonstrando que o algoritmo converge para o valor exato de energia.

Na figura 2 apresentamos a evolução temporal dos valores de E_{max} e E_{min} e sua convergência para o autoestado de energia E_n para os dados do caso anterior, mas agora com $c_0^k=1$ se $k=31$ e $c_0^k=0$ para outros valores de k . Os valores teóricos são $x=-3.0275$ e auto-energia igual a 4.5827.

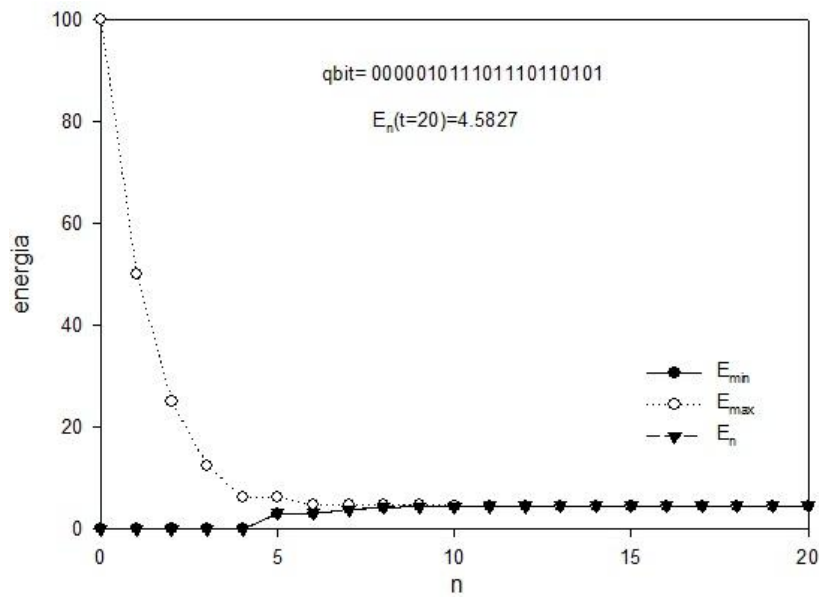


Figura 2: Evolução temporal dos valores de energia E_{max} e E_{min} e E_n para $\lambda=2$

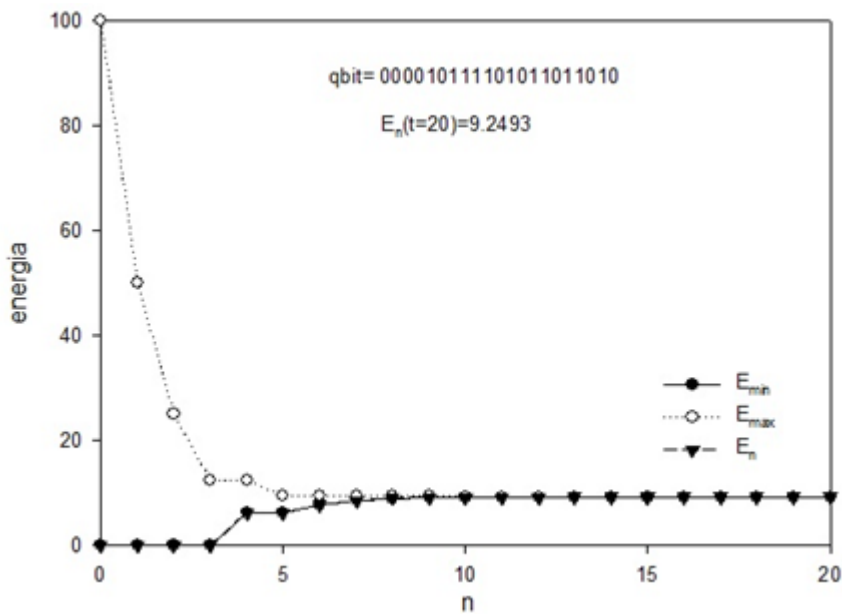


Figura 3: Evolução temporal dos valores de energia E_{max} e E_{min} e E_n para $\lambda=3$

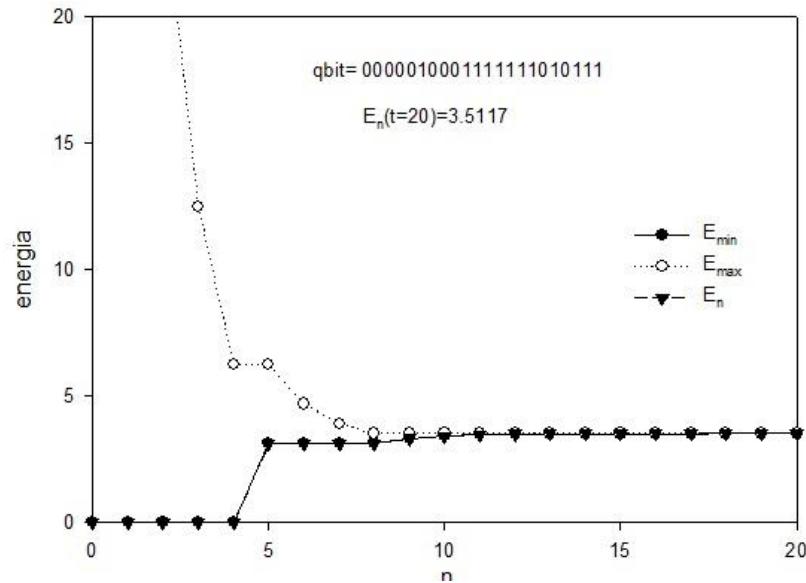


Figura 4: Evolução temporal dos valores de energia E_{max} e E_{min} e E_n para $\lambda=2/3$

A figura 3 foi obtida para $A=4$, $E_{max}=100$, $E_{min}=0$, $E_0=0$, $N=256$, $\lambda=3$, com $c_0^k=1$ se $k=31$ e $c_0^k=0$ para outros valores de k . Os valores teóricos são $x=-3.0275$ e autoenergia igual a 9.24933.

Finalmente, a figura 4 mostra o caso do potencial $\lambda=3/2$, com $A=4$, $E_{max}=100$, $E_{min}=0$, $E_0=0$, $N=256$, com $c_0^k=1$ se $k=31$ e $c_0^k=0$ para outros valores de k . Os valores teóricos são $x=-3.0275$ e autoenergia igual a 3.51176.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho usamos um algoritmo quântico para obter as autoenergias de uma partícula quântica submetida a potenciais oscilatórios. A convergência para o autoestado de energia E_n teórico ocorre à medida que o número de iterações aumenta, no nosso caso $n=20$ foi o suficiente para obtermos resultados satisfatórios. A grande importância deste trabalho é o entendimento de um algoritmo quântico que deverá servir de base da programação das futuras gerações de computadores.

5. AGRADECIMENTOS

J. I. J. Santos e A. M. C. Souza agradecem ao CNPq e C. B. Gomes agradece à FAPITEC/SE pelo apoio financeiro.

1. JÚNIOR, B. L.; LIMA A. F. Circuitos Quânticos. Disponível em: <ppginf.ucpel.tche.br/weciq/CD/.../mini-curso-bernardo-lula.pdf >. Acessado em: 10 de Jun de 2010.
2. KITAEV, A. Y. e-print arXiv:quant-ph/9511026.
3. ABRAMS, D. S.; LLOYD S. Phys. Rev. Lett., vol 83, pp 5162-5165, 1999.
4. ASPURU-GUZI, A. et al. Science, vol 309, pp 1074, 2005.
5. DOBSICEK, M.; JOHANSSON, G.; SHUMEIKO V. e WENDIN G., Phys. Rev. A vol 76, 030306, 2007.
6. VARGA, P.; APAGYI, B.. Phys. Rev. A vol 78, 022337, 2008.
7. NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L.; Computação Quântica e Informação Quântica: Bookman, 2005.