Estudo de Caminhadas Quânticas em Computadores Quânticos

SCHEIFER, Gabriel[1]; TSUTSUI, Thiago Takaji[1,2]; ANDRADE, Fabiano M.[1,2,3];

Universidade Estadual de Ponta Grossa - QPQI Group[1]
Universidade Estadual de Ponta Grossa - Programa de Pós-Graduação em Ciências/Física[2]
Universidade Estadual de Ponta Grossa - Departamento de Matemática e Estatística[3]
GabrielScheifer2023@outlook.com[1]

Palavras-Chave: Caminhadas quânticas; Computação quântica; Qiskit;

Resumo

As caminhadas quânticas com moeda (CQM) representam primitivas computacionais universais, com aplicações em algoritmos quânticos e na simulação de sistemas físicos. Neste trabalho, investigamos a CQM em um grafo ciclo com 4 vértices, implementando e comparando dois circuitos quânticos descritos na literatura. Foi utilizado o processador *IBM Kingston* por meio do kit de desenvolvimento Qiskit. Os resultados confirmaram o comportamento teórico esperado em ambos os circuitos, evidenciando que portas controladas atuando simultaneamente sobre mais de um qubit aumentam o impacto do ruído na execução em hardware quântico real.

I. Introdução

As tecnologias quânticas têm sido amplamente reconhecidas como pilares da inovação científica do século XXI, com aplicações em computação, comunicação e sensoriamento (DOWLING; MILBURN, 2003; ACÍN, A. et al., 2018). Nesse contexto, as caminhadas quânticas (CQs) emergem como uma ferramenta relevante para o desenvolvimento de algoritmos quânticos eficientes.

As CQs correspondem aos equivalentes quânticos das cadeias de Markov clássicas (KEMPE, 2003), modelos matemáticos que descrevem processos estocásticos em passos discretos, nos quais o estado futuro depende apenas do estado atual. Elas têm sido amplamente utilizadas no desenvolvimento de algoritmos e na simulação de sistemas complexos (AHARONOV et al., 2001; AMBAINIS et al., 2001), podendo atuar como primitivas computacionais universais (LOVETT et al., 2010; CHILDS, 2009). Dentre os modelos existentes na literatura, destacam-se as caminhadas quânticas com moedas (CQM), com ampla aplicação em algoritmos e na modelagem de sistemas físicos (KEMPE,

2003). O objetivo deste trabalho é investigar as CQM por meio de simulações e da sua implementação em hardware quântico real, analisando o impacto do ruído nos resultados.

II. Fundamentação Teórica/Materiais e Métodos

Caminhada Quântica com Moeda

As CQM são definidas em um espaço de Hilbert composto, dado pelo produto tensorial entre o espaço de posições $\mathcal{H}_p$ e o espaço de moeda $\mathcal{H}_c$ (KEMPE, 2003), $\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$. O estado do sistema pode ser escrito como $|\psi\rangle = \sum_{j,\sigma} |j\rangle \otimes |\sigma\rangle$, onde $|j\rangle$ representa o estado de posição, com $j \in \mathbb{Z}$, e $|\sigma\rangle \in \{|+\rangle, |-\rangle\}$ corresponde ao estado da moeda. A evolução temporal da CQM é governada por um operador unitário U, definido pela aplicação sucessiva do operador de deslocamento S_p condicional e do operador moeda C_c:

$$U = S_p(I_p \otimes C_c), \tag{1}$$

onde I_p é o operador identidade no espaço de posições. O operador moeda utilizado é o Hadamard H, que cria uma superposição uniforme a partir dos estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$, $H|\pm\rangle = 1/\sqrt{2}(|+\rangle \pm |-\rangle)$. O operador de deslocamento condiciona a evolução espacial da partícula de acordo com o estado da moeda, deslocando-a para a direita quando a moeda está no estado $|+\rangle$ e para a esquerda quando está no estado $|-\rangle$. A aplicação sucessiva desses operadores resulta na evolução do sistema, permitindo a ocorrência de superposição e de interferência quânticas, características fundamentais do comportamento não clássico das CQMs.

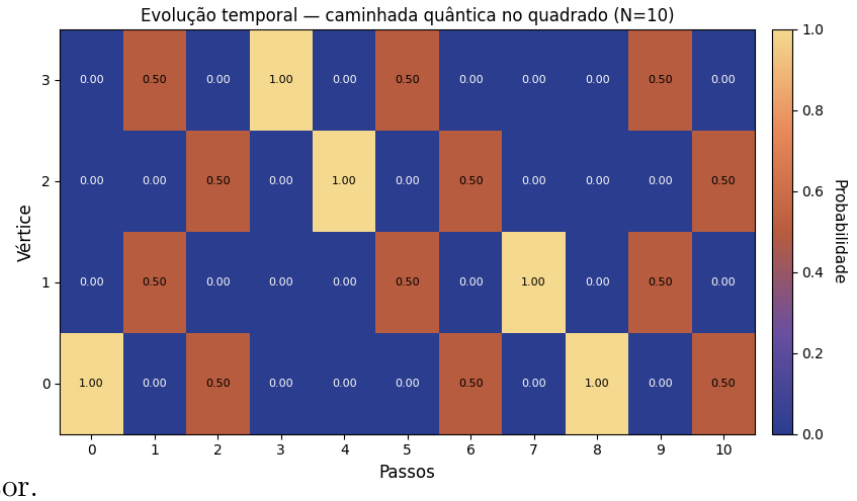
Implementação Computacional

A CQM foi implementada em um grafo ciclo com quatro vértices, onde cada vértice se conecta apenas aos seus dois vizinhos adjacentes. Foram utilizados três qubits: dois de posição, para representar os quatro vértices do grafo, e um de moeda. Os 2 qubits de posição codificam os 4 vértices na base computacional, seguindo a notação $|00\rangle \equiv v_0$, $|01\rangle \equiv v_1$, $|10\rangle \equiv v_2$ e $|11\rangle \equiv v_3$. O sistema foi preparado no estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |-\rangle$.

Simulações em Python forneceram o resultado teórico de referência, obtido pela evolução unitária exata do sistema, confirmando o comportamento esperado da caminhada com distribuição de probabilidade que se repete a cada 8 passos (RAZZOLI et al., 2024), como ilustrado na Fig. 1.

Em seguida, dois circuitos da literatura (RAZZOLI et al., 2024) foram implementados no processador quântico *IBM Kingston* utilizando o Qiskit. Nesses circuitos, cada

Fig. 1. Evolução temporal teórica da CQM no grafo ciclo com 4 vértices para $N = 10$ passos. As cores indicam a probabilidade em cada vértice a cada passo.

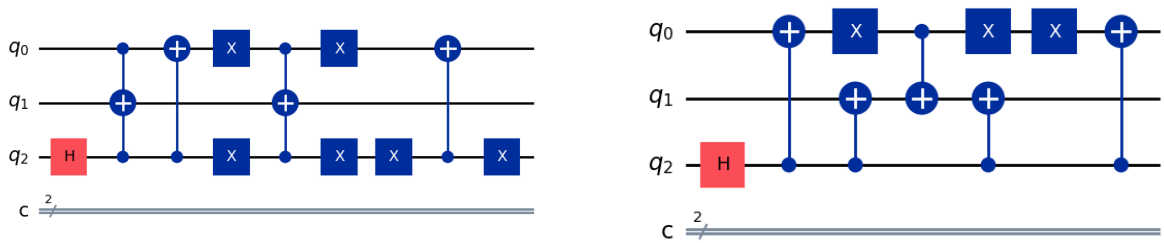


Fonte: O autor.

passo da CQM no grafo ciclo utiliza 3 qubits: q_0 e q_1 para a posição e q_2 para a moeda. O Circuito 1 (C1) emprega portas controladas que atuam simultaneamente em três qubits, tornando-o mais complexo e mais suscetível ao ruído do hardware, enquanto o Circuito 2 (C2) emprega portas que atuam em dois qubits, sendo mais simples e resistente ao ruído. Os dois circuitos são apresentados na Fig. 2.

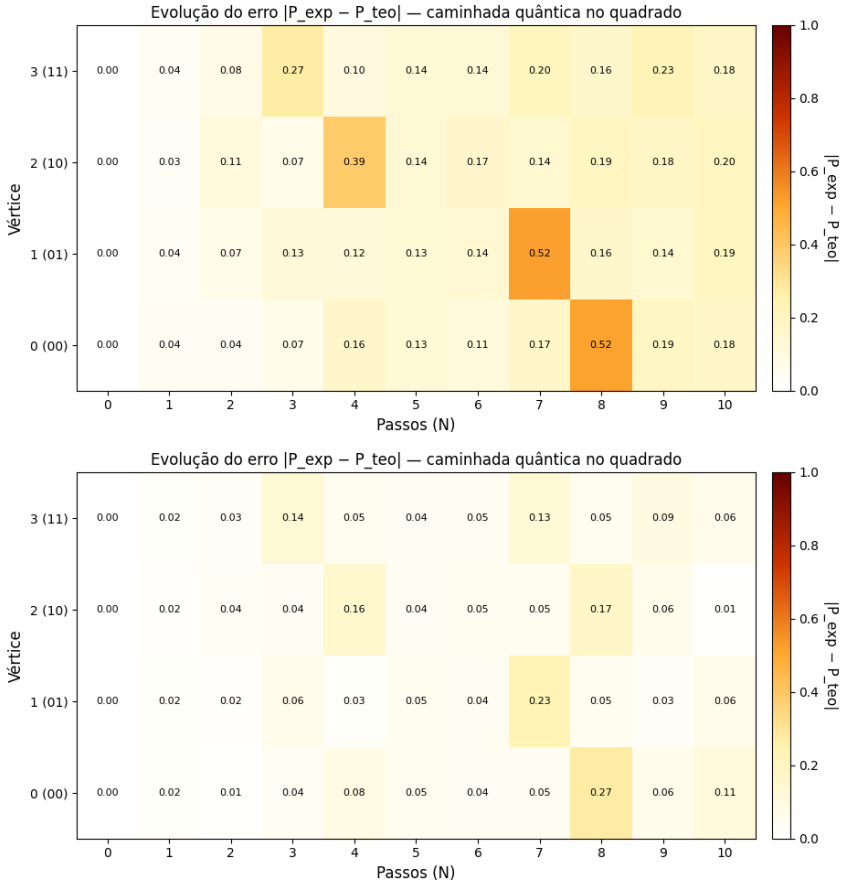
Cada passo da caminhada é realizado por meio da aplicação do circuito. Dessa forma, para realizar 10 passos, o circuito foi aplicado $N = 10$ vezes e foram realizadas medições nos qubits de posição q_0 e q_1 ao final, determinando em qual vértice o caminhante se encontrava. O qubit de moeda q_2 não foi medido. Cada execução utilizou 4096 shots e o erro foi quantificado pela diferença absoluta entre a probabilidade experimental e a teórica, $|P_{\text{exp}} - P_{\text{teo}}|$, para cada vértice em cada passo.

Fig. 2. Circuitos quânticos para a CQM no grafo ciclo com quatro vértices. À esquerda, temos o C1 com portas controladas atuando simultaneamente em três qubits e, à direita, o C2 com portas controladas atuando em dois qubits.



Fonte: O autor.

Fig. 3. Evolução do erro $|P_{\text{exp}} - P_{\text{teo}}|$ para os dois circuitos implementados. Acima, temos o C1 com portas controladas atuando sobre 3 qubits, e abaixo, o C2 com portas controladas atuando sobre 2 qubits.



Fonte: O autor.

III. Resultados

Os resultados obtidos mostraram que ambos os circuitos reproduziram o comportamento teórico esperado da CQM no grafo ciclo com 4 vértices, confirmando a viabilidade da implementação em hardware quântico real. Os mapas de calor do erro $|P_{\text{exp}} - P_{\text{teo}}|$ para cada circuito são apresentados na Fig. 3.

Os erros não se distribuem uniformemente ao longo dos passos, apresentando picos em momentos específicos. Esse comportamento possivelmente está relacionado à tendência do processo de decoerência (associado ao ruído presente no hardware quântico) de uniformizar as probabilidades entre os vértices, de modo que os erros tendem a ser maiores justamente nos passos em que a distribuição teórica apresenta picos mais acentuados. O C1 apresentou erros mais elevados e menos estáveis, atingindo um valor máximo de aproximadamente 0,52 nos passos sete e oito. Esse comportamento é esperado, dado que operações envolvendo múltiplos qubits são mais suscetíveis ao ruído do hardware (KIM et al., 2024). Por outro lado, o C2 apresentou erros significativamente menores e mais estáveis,

com um valor máximo de aproximadamente 0,27, evidenciando que portas controladas atuando em menos qubits simultaneamente reduzem o impacto do ruído em hardware real (KIM et al., 2024). Uma análise mais detalhada da relação entre a arquitetura dos circuitos e o erro será realizada em uma etapa posterior do trabalho.

IV. Conclusões

O presente trabalho investigou a implementação das CQMs em hardware quântico real. A CQM foi implementada com sucesso em um grafo ciclo com quatro vértices no processador quântico *IBM Kingston*, com ambos os circuitos reproduzindo o comportamento teórico esperado e demonstrando que a interferência quântica é preservada mesmo na presença de ruído. O C2, com menor complexidade de portas controladas do que o C1, apresentou desempenho superior, com erro máximo de 0,27, contra 0,52 do C1, indicando que a redução no número de qubits controlados simultaneamente é um fator determinante para implementações mais precisas em hardware quântico real.

Como perspectivas futuras, pretendemos aprofundar a análise da relação entre a arquitetura dos circuitos e o erro obtido, investigar o comportamento da caminhada em outros grafos e explorar as correlações quânticas geradas durante a evolução do sistema.

Agradecimentos

Este trabalho foi parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES, Finance Code 001). F.M.A. agradece o suporte financeiro da Fundação Araucária, Projeto No. 305 e do CNPq, Projeto No. 313124/2023-0.

Referências

ACÍN, A. et al. The quantum technologies roadmap: a european community view. **New Journal of Physics**, v. 20, p. 080201, 2018.

AHARONOV, D. et al. Quantum walks on graphs. In: **Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC'01)**. New York: [s.n.], 2001. p. 50.

AMBAINIS, A. et al. One-dimensional quantum walks. In: **Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC'01)**. New York: [s.n.], 2001. p. 37.

CHILDS, A. M. Universal computation by quantum walk. **Physical Review Letters**, v. 102, p. 180501, 2009.

DOWLING, J. P.; MILBURN, G. J. Quantum technology: the second quantum revolution. **Philosophical Transactions of the Royal Society A**, v. 361, p. 1655, 2003.

KEMPE, J. Quantum random walks: an introductory overview. **Contemporary Physics**, v. 44, p. 307, 2003.

KIM, D. et al. **Improving the fidelity of CNOT circuits on NISQ hardware**. 2024. ArXiv:2405.19891. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2405.19891>.

LOVETT, N. B. et al. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk. **Physical Review A**, v. 81, p. 042330, 2010.

RAZZOLI, L. et al. Efficient implementation of discrete-time quantum walks on quantum computers. **Entropy**, v. 26, n. 4, p. 1–24, 2024.