

OPERADORES DE MUTACIÓN CUÁNTICA PARA QISKIT

Trabajo de Fin de Grado, 2022

GRADO EN MATEMÁTICAS, FACULTAD DE CIENCIAS MATEMÁTICAS, UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE DE MADRID



Jaime De la Vega Fornié

Dirigido por:
Luis Fernando Llana Díaz

Agradecimientos

A Tuty, por todo.

Adrián Barcelo Polo, por tus consejos y ayuda fundamentales durante estos cuatro años.

Martín Avendaño, por su comprensión y disposición para ayudar.

Luis Llana, por aguantar mis ritmos de trabajo tan aleatorios y saber reconducir mis ganas de hacer un TFG de mil páginas y abarcar mucho más de lo que puedo.

Natalia López, por guiarme y ayudarme en momentos de oscuridad.

Irene Sánchez, sin ti y las Ayudas Concepción Arenal no presento este trabajo.

Francisco Javier Carrasco, por tus guías en cada decisión y por siempre iluminarme y ayudarme con tu sabiduría.

Resumen

La computación cuántica es una de las disciplinas que están a la orden del día y en la vanguardia del progreso. Con su inicio en el Siglo XX, la aparición de las primeras computadoras cuánticas, aporta un rayo de esperanza al desarrollo de la computación cuántica. Hoy en día, el software y los algoritmos cuánticos están muy por delante del desarrollo de hardware, sin embargo, eso nunca ha sido un problema para que los teóricos puedan desarrollar su trabajo. En programación cuántica, el desarrollo de programas es complejo ya que se realiza con circuitos y, además, muchas veces es muy poco intuitivo. Es por esto que se requieren cada vez más herramientas de testing que nos faciliten encontrar errores. Una de las herramientas de testing más útiles es el testing con mutantes, introduciendo un mutante en el código y sometiénolo a métodos para ver si somos capaces de detectar el mutante. En esta línea trabajan, por ejemplo, el metamorphic testing y el mutant testing. En este trabajo el objetivo será iniciar al lector en la computación cuántica, partiendo de ciertas nociones matemáticas y los postulados de la mecánica cuántica de una manera muy sencilla, para más tarde aplicarlos en sistemas cuánticos de qubits.

A continuación, se profundizará en la computación cuántica con los circuitos y algoritmos dando un entendimiento de cuál es su funcionamiento. Una vez se haya dado una introducción al testing y al testing con mutantes, se culminará con la creación de clases y funciones en Python usando el language de programación cuántico Qiskit para poder generar mutantes cuánticos para cualquier circuito. Este código creado dará lugar a una manera sistemática de crear mutantes para su uso en testing cuántico con Qiskit.

Palabras clave

Computación Cuántica, Qiskit, Testing Cuántico, Metamorphic Testing, Mutant Testing, Mutantes cuánticos, Algoritmos cuánticos

Abstract

Quantum computing is cutting edge technology and at the forefront of progress. With its inception in the 20th century, the appearance of the first quantum computers provides a glimmer of hope for the development of quantum computing. Today, quantum software and algorithms are far ahead of hardware development, yet this has never been a problem for theorists to develop their work. In quantum programming, the development of programs is complex because it is done with circuits and, in addition, it is often very unintuitive. This is the reason why more and more testing tools are required to make it easier to find errors. One of the most useful testing tools is testing with mutants, introducing a mutant in the code and subjecting it to methods to see if we are able to detect the mutant. In this line work, for example, metamorphic testing and mutant testing. In this work the objective will be to introduce the reader to quantum computation, starting from certain mathematical notions and the postulates of quantum mechanics in a very simple way, to later apply them in quantum qubit systems. Afterwards, quantum computation will be deepened with circuits and algorithms, giving an understanding of how they work. Once an introduction to testing and mutant testing is given, it will culminate with the creation of classes and functions in Python for the quantum programming language Qiskit to be able to generate quantum mutants for any circuit. This created code will lead to a systematic way to create mutants for use in quantum testing with Qiskit.

Keywords

Quantum Computing, Qiskit, Quantum Testing, Metamorphic Testing, Mutant testing, Quantum Mutants, Quantum Algorithms

Contents

1	Introducción	6
1.1	Contexto histórico	6
1.2	Motivación	8
1.3	Objetivos	8
2	Repaso de matemáticas y física	9
2.1	Álgebra lineal	9
2.1.1	Notación de Dirac	9
2.1.2	Definiciones y resultados básicas	10
2.1.3	Producto tensorial	10
2.2	Mecánica cuántica	12
2.2.1	Espacio de estados del sistema cuántico	12
2.2.2	Evolución de sistemas cuánticos	13
2.2.3	Medición de sistemas cuánticos	14
3	Computación cuántica	15
3.1	Del bit clásico al qubit cuántico	15
3.1.1	Varios qubits	16
3.2	Puertas cuánticas	18
3.2.1	De las puertas clásicas a las puertas cuánticas	18
3.2.2	Puertas de varios qubits	20
3.2.3	Puertas universales	22
3.2.4	Medición	22
3.3	Circuitos cuánticos	23
3.3.1	Computación clásica en un ordenador cuántico	23
3.3.2	Intercambiar qubits	23
3.3.3	Copiar qubits	24
3.3.4	Estados de bell	25
3.3.5	Teleportación cuántica	25
3.3.6	Simulación cuántica	27
4	Algoritmos cuánticos	28
4.1	Algoritmo de Deutsch's	28
4.2	Algoritmo de Deutsch-Jozsa	30
4.3	Quantum Fourier Transform	32
4.4	Algoritmo de factorización de Shor	34
4.4.1	Quantum Phase Estimation	34
4.4.2	Solución al problema de Shor	35
4.5	Algoritmo para sumar bits	36
5	Introducción a metamorphic testing y mutantes	38
5.1	Software testing	38

5.2	Mutation testing	39
5.2.1	Metamorphic testing	40
5.3	Quantum Testing	40
6	Operadores de mutación cuántica en Qiskit	41
6.1	Qiskit	41
6.2	Operadores de mutación cuánticos	41
6.2.1	Qué cambia en un programa cuántico	42
6.2.2	Desarrollo e implementación del código	42
6.2.3	Funciones para los operadores	43
6.3	Aplicación del módulo	45
6.3.1	Ejemplo de uso de las funciones	45
6.3.2	Generación aleatoria de mutantes para un circuito cualquiera	47
7	Conclusión	48
7.1	Trabajo futuro	48
8	Anexo	52
8.1	Capítulo 3	52
8.1.1	3.1 Puertas cuánticas	53
8.1.2	3.2 Puertas de varios qubits	54
8.1.3	Circuitos cuánticos	58
8.2	Capitulo 4	61
8.2.1	Algoritmo de Deutsch	61
8.2.2	Algoritmo QFT para 4 qubits	64
8.2.3	Algoritmo suma modular	65
8.2.4	Algoritmo Deutsch-Jozsa	67
8.3	Operadores de mutación	71
8.3.1	Mutantes a mano	71
8.4	Operadores de mutación en qiskit	73
8.5	Ejemplos de uso	83
8.6	Ejemplo de generación de mutantes	90
8.7	Ejemplo de metamorphic testing	91

Chapter 1

Introducción

1.1 Contexto histórico

En el inicio del Siglo XX la física clásica se revolucionó con la aparición de la física cuántica. Con las teorías de la física clásica dando lugar a resultados absurdos, como los electrones decayendo en espiral al núcleo, por lo que estaba claro que era necesario el desarrollo de una nueva teoría. La formulación de la mecánica cuántica surgió de la mano de Schrödinger y Heisenberg usando mecánica de ondas y de matrices, siendo probadas equivalentes más tarde. La física cuántica tenía una particularidad que sigue manteniendo hoy en día, es la física de lo pequeño, y sus mediciones y modelos basados en la probabilidad que siguen estando vigentes hoy en día para cualquier sistema microscópico [1].

Asimismo, en el Siglo XX también se inició el desarrollo de la computación, con la llegada de las revolucionarias ideas de Alan Turing sobre un ordenador programable, o máquina de Turing, el cual demostró que cualquier cálculo del mundo real puede traducirse en un cálculo equivalente que implique una máquina de Turing, lo que se conoce como la tesis de Church-Turing [2].

Muy pronto se fabricaron los primeros ordenadores y el hardware informático creció a un ritmo tan rápido que el crecimiento, a través de la experiencia en la producción, se codificó en una relación empírica llamada ley de Moore. Esta "ley" es una tendencia proyectiva que establece que el número de transistores en un circuito integrado se duplica cada dos años [3]. A medida que los transistores empezaron a ser cada vez más pequeños para poder empaquetar más potencia por superficie, los efectos cuánticos empezaron a aparecer en la electrónica dando lugar a interferencias involuntarias. Esto condujo a la llegada de la informática cuántica, que utilizaba la mecánica cuántica para diseñar algoritmos.

En ese momento, los ordenadores cuánticos prometían ser mucho más rápidos que los clásicos para ciertos problemas específicos. Uno de estos problemas fue desarrollado por David Deutsch y Richard Jozsa, conocido como el algoritmo Deutsch-Jozsa, el cuál veremos más adelante. Este algoritmo consigue una reducción exponencial del número de iteraciones usando superposición cuántica [4]. Sin embargo, este problema tenía poca o ninguna aplicación práctica. Este notable primer paso dado por Deutsch fue mejorado en la década siguiente culminando con la demostración de Peter Shor en 1994 de que dos problemas enormemente importantes: el problema de encontrar los factores primos de un número entero, y el problema del "logaritmo discreto" podían resolverse eficazmente en un ordenador cuántico. Los resultados de Shor son un poderoso indicio de que los ordenadores cuánticos son más potentes que las máquinas de Turing, incluso máquinas de Turing probabilísticas [5].

Otra prueba de la potencia de los ordenadores cuánticos, en 1995, cuando Lov Grover demostró que otro problema importante, el de realizar una búsqueda en un espacio no estructurado, también podía acelerarse en un ordenador cuántico [6]. Aunque el algoritmo de Grover no proporcionó una aceleración tan espectacular como los algoritmos de Shor, la amplia aplicabilidad de las metodologías basadas en la búsqueda ha despertado un gran interés en el algoritmo de Grover.

Más o menos al mismo tiempo que se descubrieron los algoritmos de Shor y Grover, mucha gente estaba desarrollando una idea que Richard Feynman había sugerido en 1982. Feynman había señalado que parecía haber dificultades esenciales para simular sistemas de mecánica cuántica en ordenadores clásicos, y sugirió que la construcción de ordenadores basados en los principios de la mecánica cuántica nos permitiría evitar esas dificultades [7]. En los década de 1990, varios equipos de investigadores empezaron a desarrollar esta idea, demostrando que, efectivamente, es que es posible utilizar los ordenadores cuánticos para simular eficientemente sistemas que no tienen simulación eficiente en un ordenador clásico. Es probable que una de las principales aplicaciones de los ordenadores cuánticos en el futuro será realizar simulaciones de sistemas mecánicos cuánticos demasiado difíciles de simular en un ordenador clásico, un problema con profundas implicaciones científicas y tecnológicas. ¿Qué otros problemas pueden resolver los ordenadores cuánticos más rápidamente que los clásicos? La respuesta corta es que no lo sabemos. Parece que es difícil encontrar buenos algoritmos cuánticos. Un pesimista podría pensar que eso se debe a que no hay nada más en los ordenadores cuánticos que no sean las aplicaciones ya descubiertas. Nuestra opinión es diferente.

El diseño de algoritmos para ordenadores cuánticos es difícil porque los diseñadores se enfrentan a dos problemas grandes a los que no se enfrentan en la construcción de algoritmos para ordenadores clásicos. En primer lugar, nuestra intuición humana está arraigada en el mundo clásico. Si utilizamos esa intuición como ayuda para la construcción de algoritmos, las ideas algorítmicas que se nos ocurran serán ideas clásicas. Para diseñar buenos algoritmos cuánticos hay que "apagar" la intuición clásica durante al menos una parte del proceso de diseño, utilizando efectos verdaderamente cuánticos para lograr el fin algorítmico deseado. En segundo lugar, para ser realmente interesante no basta con diseñar un algoritmo que sea meramente mecánico cuántico. El algoritmo debe ser mejor que cualquier algoritmo clásico existente. Así, es posible que se encuentre un algoritmo que haga uso de los aspectos verdaderamente cuánticos de la mecánica cuántica, que sin embargo no sea de interés generalizado porque existen algoritmos clásicos con características de rendimiento comparables. La combinación de estos dos problemas hace que la construcción de nuevos algoritmos cuánticos sea un problema desafiante para el futuro. De forma aún más amplia, podemos preguntarnos si hay alguna generalización que podamos hacer sobre la potencia de los ordenadores cuánticos frente a los clásicos. ¿Qué es lo que hace que los ordenadores cuánticos suponiendo que esto sea así? Una de las cosas más interesantes de la computación y la información cuánticas es lo poco que se sabe sobre las respuestas a estas preguntas. Es un gran reto para el futuro comprender mejor estas cuestiones.

Los ordenadores cuánticos hoy en día son una realidad, de hecho, en 2019 Google anunció haber alcanzado la supremacía cuántica con un ordenador cuántica [8], aunque rápidamente borraron el artículo publicado. Sin embargo, esta realidad es aún lejana de lo que a uno le gustaría que fueran. Consisten la equivalencia al ordenador clásico ENIAC en 1945, una de las primeras máquinas de propósito general de la historia, de dimensiones exorbitadas y utilidad limitada. Por supuesto, a mediados del siglo XX todavía quedaba mucho por hacer para desarrollar los ordenadores que tenemos hoy, pero se trataba más de refinar una tecnología con la que ya nos sentíamos cómodos coqueteando que de resolver grandes desafíos.

La computación cuántica, sin embargo, aún plantea retos enormes. Titánicos, en realidad. De hecho, son tan desafiantes que algunos científicos, como el matemático israelí, y profesor en la Universidad de Yale, Gil Kalai, defienden que nunca tendremos ordenadores cuánticos completamente funcionales y con capacidad de enmendar sus propios errores [9]. Y es que este es, precisamente, uno de los mayores desafíos en los que están trabajando los investigadores en computación cuántica: la corrección de errores [10].

Aunque el estado del desarrollo del hardware de los ordenadores cuánticos sea muy limitado, el desarrollo de software siempre está por delante del hardware. Con ello viene una de los principales desafíos de todo desarrollo de software, estudiar la corrección de un programa, es decir, si el programa está correctamente implementado, profundizaremos más adelante en por qué esto es más difícil en computación cuántica que en computación clásica. Para estas pruebas de corrección cada vez son más los avances que se están llevando a cabo para utilizar técnicas de testing clásico en el mundo cuántico [11], como por ejemplo el metamorphic testing, que desarrollaremos más adelante. Igual que hay grandes desafíos en el hardware cuántico, es necesario coseguir metas fundamentales en lo que respecta al software, de hecho, es fundamental el progreso en el área de verificación y validación de programas para el correcto desarrollo

de software cuántico [12]. En este trabajo, se desarrollan las ideas de los dos últimos papers citados, haciendo una aproximación al software testing cuántico a través del metamorphic testing y el desarrollo de mutantes.

1.2 Motivación

Como ya se ha mencionado en la introducción, aunque el estado de los ordenadores cuánticos hoy en día no es avanzado, una de las principales habilidades del matemático es resolver problemas, y más interesante aún si ni siquiera existen. El uso de ciertos programas nos permite simular la ejecución de programas cuánticos sin preocuparnos de los errores que nos provocaría un ordenador real. Por esto mismo, hoy en día podemos desarrollar software cuántico que está por delante del hardware, pero el desarrollo de software lleva ciertos problemas asociados. De aquí surgen herramientas como el testing, verificación de programas, etc. En la intersección entre los métodos formales y la computación cuántica aparece la necesidad de un marco de testing para comprobar si los programas cuánticos son correctos a través de un testing correcto, y esta será la motivación principal del trabajo a desarrollar.

1.3 Objetivos

El primero y más importante será la introducción a la computación cuántica, la familiarización con los conceptos básicos, estando apoyado el lector por una base matemática robusta no es difícil pero si extenso. Esto se iría compaginando con el aprendizaje de Qiskit, el cual es un módulo de Python que permite escribir circuitos, que es como se llaman los programas cuánticos. También permite su ejecución en computadoras cuánticas reales, lo cual está aún muy limitada como ya se ha mencionado en la introducción. Uno de los objetivos del trabajo es desarrollar el aprendizaje de Qiskit en paralelo al aprendizaje de la computación cuántica, de una manera casi simbiótica. Por esto mismo, una de las herramientas fundamentales de este trabajo es el cuaderno de Jupyter Notebook con el que se han realizado todas las figuras incluidas en el trabajo, así como los circuitos. El lector lo puede encontrar en <https://github.com/JaimeDelaVegaFornie/TFG-2022.git> y también en el anexo del trabajo, de hecho se recomienda ir comprobando en paralelo y probando los distintos programas y circuitos del trabajo para tener una introducción.

Una vez aprendido eso, se llega al objetivo específico del trabajo. Para poder ejecutar los programas, que se representan en una notación interna de Qiskit, hay que investigar esa notación interna para luego poder hacer modificaciones en ella y poder crear mutantes con el objetivo de testear los programas.

Chapter 2

Repaso de matemáticas y física

Es exageradamente pretencioso tratar de hacer una introducción completa a la mecánica cuántica en una sección de un trabajo de fin de grado, por lo tanto, lo que se pretende aquí es tratar conceptos básicos que puedan aportar cierta comprensión de las bases utilizadas en la mecánica cuántica para ganar intuición y entendimiento. El lector puede saltar esta sección y avanzar directamente al capítulo 3 y volver cuando necesite saber algo del fundamento matemático o físico de las secciones posteriores. A continuación haremos un repaso rápido de álgebra lineal y espacios de Hilbert y, un vez que tenemos esto, se intentará realizar una breve introducción a la mecánica cuántica.

2.1 Álgebra lineal

Se asume que el lector está familiarizado con álgebra lineal básica propia de la enseñanza matemática, a partir de ahí, se intentará desarrollar aquello que sea clave en el entendimiento de la mecánica cuántica.

2.1.1 Notación de Dirac

La notación usual utilizada en la mecánica cuántica es la notación Bra-ket, que se utiliza para denotar estados cuánticos, utiliza "angle brackets" y una barra vertical para construir "bras" y "kets"

Un ket es de la forma $|v\rangle$. Matemáticamente denota un vector v en un espacio vectorial abstracto V , que en nuestro caso será sobre el cuerpo de los complejos, es decir $V = \mathbb{C}$. Físicamente representa el estado de un sistema cuántico.

Un bra es de la forma $\langle f|$. Matemáticamente denota una forma lineal $f : V \rightarrow \mathbb{C}$. Básicamente una aplicación lineal que manda cada vector de V a un número en el plano complejo \mathbb{C} . Más notación de física que se utilizará:

Notación	Descripción
z^*	Conjugación compleja de z , $(1 + i)^* = 1 - i$
$\langle \psi \phi \rangle$	Producto escalar de ψ y ϕ
$ \psi\rangle \langle \phi $	Producto tensorial de ψ y ϕ ($ \psi\rangle \otimes \langle \phi $)
$\langle \psi A \phi \rangle$	Producto interior de ψ y $A\phi$

Como se ha mencionado anteriormente, se asumen conceptos básicos y propios de un curso introductorio de álgebra lineal tales como bases, autovectores o matrices adjuntas y se procede a extender aquellos que pudieran resultar ligeramente más avanzados.

2.1.2 Definiciones y resultados básicas

Como recordatorio, introducimos las siguientes definiciones matemáticas que nos ayudarán a asegurarnos de contar con la base matemática suficiente como para abordar las siguientes secciones.

Definition 2.1.1 (Aplicación lineal) Sean \mathbb{V} y \mathbb{V}' espacios vectoriales complejos. Una aplicación lineal es una función $f : \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V}'$ que verifica que $\forall \Phi, \Psi \in \mathbb{V}$ y $c \in \mathbb{C}$:

- (i) $f(\Phi + \Psi) = f(\Phi) + f(\Psi)$
- (ii) $f(c\Phi) = cf(\Phi)$

Practicamente todas las funciones que vamos a considerar serán aplicaciones lineales. Las matrices, cuando actúan en un espacio vectorial complejo son aplicaciones lineales.

Definition 2.1.2 (Operador) Un operador es una aplicación lineal $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ de un espacio complejo en si mismo, es decir, un endomorfismo.

Definition 2.1.3 (Espacio de Hilbert) Un espacio de Hilbert H es un espacio vectorial real o complejo equipado con un producto interior que también es un espacio métrico completo con la función de distancia definida a partir del producto interior.

En todo momento vamos a trabajar en espacios vectoriales complejos de dimensión finita donde un espacio de Hilbert es exactamente lo mismo que un espacio vectorial equipado con producto interior. Por lo que a partir de ahora utilizaremos el término espacio de Hilbert para referirnos a ello. En dimensiones infinitas no es equivalente, pero no vamos a trabajar en espacios de dimensión infinita.

Definition 2.1.4 (Conjugado Hermitico) Sea A un operador lineal en un espacio de Hilbert V . existe un único operador lineal $A^\dagger \in V$ tal que, para cualesquiera vectores $|v\rangle, |w\rangle \in V$ tenemos que

$$\langle v | A | w \rangle = \langle w | A^\dagger | v \rangle \quad (2.1)$$

Este operador lineal A^\dagger se conoce como el conjugado hermitico de A u operador adjunto.

Definition 2.1.5 (Operador normal, unitario y Hermítico) Un operador $A : H \rightarrow H$ en un espacio de Hilbert se dice normal o hermitico si $AA^\dagger = A^\dagger A$

Un operador $U : H \rightarrow H$ en un espacio de Hilbert se dice unitario si $UU^\dagger = U^\dagger U = I$

Theorem 2.1.1 (Descomposición espectral) Todo operador normal M en un espacio vectorial V es diagonal con respecto a cierta base ortonormal para V . De igual manera, todo operador diagonalizable es normal.

2.1.3 Producto tensorial

Un elemento clave para el desarrollo de sistemas cuánticos de varias partículas es el producto tensorial, consiste en una herramienta básica en física. Para ello, primero introducimos el producto de Kronecker o producto directo de matrices [13].

Definition 2.1.6 (Producto de Kronecker) Dadas dos matrices $A = (a_{ij})_{ij}$ y $B = (b_{ij})_{ij}$ de tamaño $m \times n$ y $p \times q$ respectivamente, se define el producto de Kronecker como

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1m}B \\ a_{21}B & \dots & \dots & a_{2m}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}B & \dots & \dots & a_{nm}B \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Por lo tanto, como sólo trabajaremos en espacios de dimensión finita conviene exponer la definición del producto tensorial en términos del producto de Kronecker.

Definition 2.1.7 (Producto tensorial) Dados V y W espacios de Hilbert de dimensión n y m respectivamente, $V \otimes W$ es el producto tensorial de V y W que es un espacio vectorial de dimensión $n \cdot m$ cuyos elementos son combinaciones lineales de productos de $v \otimes w$ donde $v \in V$ y $w \in W$. Como conjunto lo podemos ver como

$$V \otimes W = \{|v\rangle \otimes |w\rangle \mid |v\rangle \in V, |w\rangle \in W\} \quad (2.3)$$

De hecho, si $|i\rangle \in V$ y $|j\rangle \in W$ son elementos de las bases ortogonales de V y W , se tiene que $|i\rangle \otimes |j\rangle$ es un elemento de la base ortogonal de $V \otimes W$

De la propia definición se extraen las siguientes propiedades [14].

Propiedad 1 : Para todo escalar z y $\forall |v\rangle \in V, |w\rangle \in W$,

$$z(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (z|v\rangle) \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (z|w\rangle) \quad (2.4)$$

Propiedad 2 : $\forall |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V, |w\rangle \in W$

$$(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = |v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle \quad (2.5)$$

Propiedad 3 : $\forall |v_1\rangle, |v_2\rangle \in V, |w\rangle \in W$

$$|v\rangle \otimes (|w_1\rangle \otimes |w_2\rangle) = |v\rangle \otimes |w_1\rangle + |v\rangle \otimes |w_2\rangle \quad (2.6)$$

Además, como notación, usaremos que $|v\rangle \otimes |w\rangle = |vw\rangle = |v\rangle |w\rangle$.

Veamos ahora el producto tensorial de aplicaciones lineales. Dada una aplicación lineal $A : V \rightarrow W$ y un espacio vectorial W , el producto tensorial

$$A \otimes W : U \otimes W \rightarrow V \otimes W \quad (2.7)$$

Es la aplicación lineal única que satisface

$$(A \otimes W)(u \otimes w) = (Au) \otimes w \quad (2.8)$$

Ahora, si consideramos dos operadores, lo que será recurrente a lo largo del trabajo, podemos definir el operador lineal $A \otimes B$ a través de la ecuación

$$(A \otimes B)(|v\rangle \otimes |w\rangle) = A|v\rangle \otimes B|w\rangle \quad (2.9)$$

Extendiendo la definición de manera natural tenemos que

$$(A \otimes B) \sum_i (a_i |v_i\rangle \otimes |w_i\rangle) = \sum_i a_i A|v_i\rangle \otimes B|w_i\rangle \quad (2.10)$$

Mencionamos también una notación que nos será muy útil que es $|\psi\rangle^{\otimes n}$ o $A^{\otimes n}$ donde A es un operador. Esta notación se refiere al producto tensorial de $|\psi\rangle$ con si mismo o, respectivamente, al producto de A consigo mismo. Vamos a ver ejemplos completos que nos ayuden a entender mejor el productor tensorial ya que puede convertirse en algo relativamente complicado para aquel que lo encuentre por primera vez.

Ejemplo 1 : Sean dos matrices de Pauli

$$Z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Entonces,

$$X \otimes Y = \begin{pmatrix} 0 \cdot Y & 1 \cdot Y \\ 1 \cdot Y & 0 \cdot Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

En general, para dos matrices 2x2 $A = (a_{ij})_{ij}$ y $B = (b_{ij})_{ij}$ tenemos:

$$B \otimes A = \begin{pmatrix} b_{00} \cdot \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} & b_{01} \cdot \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} \\ b_{10} \cdot \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} & b_{11} \cdot \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Ejemplo 2 : Calculamos, usando las propiedades, $|\psi\rangle^{\otimes 2}$ con $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

$$|\psi\rangle^{\otimes 2} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)\right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)\right) = \frac{1}{2}(|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) + |1\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)) \quad (2.14)$$

Entonces, usando que $|a\rangle \otimes |b\rangle = |ab\rangle$ por notación, llegamos a que

$$|\psi\rangle^{\otimes 2} = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

2.2 Mecánica cuántica

A continuación describiremos los postulados básicos que dieron lugar a la mecánica cuántica atendiendo a los desarrollados por [15] y [16] pero simplificándolos para ajustarnos a un entendimiento básico y no alejarnos del objetivo principal. Estos postulados dan lugar a la conexión entre el formalismo matemático de la mecánica cuántica y el mundo físico.

Los postulados y su motivación pueden parecer verdaderamente sorprendentes, tanto para el lector no familiarizado como para el experto en la materia, por lo que no hay que alarmarse en el caso de encontrar intrincadas las siguientes páginas. Lo fundamental será llegar a construir un concepto de lo que constituyen estos postulados y cómo aplicarlos.

Podría llegar a ser de utilidad saltar esta sección en una primera lectura y volver para entender mejor los sistemas cuánticos una vez que uno esté motivado por su aplicación en la computación cuántica.

2.2.1 Espacio de estados del sistema cuántico

Postulado 1 (Espacio de estados) *A cualquier sistema físico aislado se le asocia un espacio vectorial complejo con producto interior (es decir, un espacio de Hilbert) conocido como el espacio de estado del sistema. El sistema está completamente descrito por su vector de estado, que es un vector unitario en el espacio de estado del sistema.*

El sistema cuántico más simple que existe es un qubit, para el cuál ocuparemos nuestro tiempo en los siguientes capítulos y es la pieza básica de la computación cuántica. Un qubit es un espacio bidimensional, supongamos que $|0\rangle$ y $|1\rangle$ es una base ortogonal de dicho espacio, entonces un vector de estado arbitrario en este espacio se escribe como

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (2.16)$$

Siendo $|\psi\rangle$ un vector unitario. Es importante notar que es posible ver los sistemas físicos reales como conjuntos de qubits.

Además, decimos que cualquier combinación lineal $\sum_i \alpha_i |\psi_i\rangle$ es una superposición de los estados $|\psi_i\rangle$ con amplitudes α_i

Postulado 2 (Sistemas compuestos) *El espacio de estados de la composición de sistemas físicos es el producto tensorial de los espacios de estados que lo componen. Es decir, si tenemos una colección de estados $\{\psi_i\}_{i=1}^n$, el estado conjunto del sistema es $|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_n\rangle$*

¿Por qué el producto tensorial es la estructura matemática utilizada para describir el espacio de estados de un sistema físico compuesto? En un nivel, podemos simplemente aceptarlo como un postulado básico, no reducible a algo más elemental, y seguir adelante. Después de todo, ciertamente esperamos que haya alguna forma canónica de describir los sistemas compuestos en la mecánica cuántica. ¿Hay alguna otra forma de llegar a este postulado? He aquí una heurística que se utiliza a veces. A los físicos a veces les gusta hablar del principio de superposición de la mecánica cuántica, que dice que si $|x\rangle$ y $|y\rangle$ son dos estados de un sistema cuántico, entonces cualquier superposición $\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle$ y debe ser también un estado permitido de un sistema cuántico, donde $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Para los sistemas compuestos, parece natural que si $|A\rangle$ es un estado del sistema A, y $|B\rangle$ es un estado del sistema B, entonces debería haber algún estado correspondiente que podríamos denominar $|A\rangle|B\rangle$, del sistema conjunto AB. Aplicando el principio de superposición a los estados del producto de esta forma, llegamos al postulado del producto tensorial dado arriba [17]. Esto no es una derivación, ya que no estamos tomando el principio de superposición como una parte fundamental de nuestra descripción de la mecánica cuántica, pero da una idea de la posible aparición de este postulado.

2.2.2 Evolución de sistemas cuánticos

Postulado 3 (Evolución) *La evolución de un sistema cuántico cerrado viene descrita por una transformación unitaria. Es decir, el estado $|\psi\rangle$ de un sistema en tiempo t_1 está relacionado con el estado $|\psi'\rangle$ del sistema en tiempo t_2 mediante un operador unitario U que depende exclusivamente de t_1 y t_2 ,*

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \quad (2.17)$$

Estos operadores serán los que más adelante llamaremos puertas cuánticas, que provocarán la evolución de los estados de nuestros sistemas cuánticos.

Notese que el postulado sólo nos habla de como evoluciona respecto de dos tiempos unicamente, en la versión continua de este postulado aparece la famosa ecuación de Schrödinger, lo que da lugar a una reformulación del postulado para considerar el tiempo continuo:

Postulado 3' (Evolución continua) *La evolución en el tiempo de un estado en un sistema cuántico cerrado viene dada por la ecuación de Schrödinger,*

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \quad (2.18)$$

Donde \hbar es la constante de Plank, cuyo valor se determina experimentalmente.

Y H es un operador hermitico fijo conocido como el Hamiltoniano del sistema cerrado. A raíz de estos postulados, podemos afirmar que si conocemos el Hamiltoniano de un sistema, entonces, conociendo también la constante \hbar entendemos su dinámica completamente. En general, averiguar el Hamiltoniano de un sistema es una tarea verdaderamente dura, de hecho una gran parte de los esfuerzos de la física en el Siglo XX ha consistido en trabajar este problema. Como el Hamiltoniano es un operador hermítico (2.1.5), tiene una descomposición espectral

$$H = \sum_E E |E\rangle \langle E| \quad (2.19)$$

Con autovalores E y correspondientes autovectores $|E\rangle$. Los estados $|E\rangle$ se suelen llamar autoestados de energía o estados estacionarios y E es la energía del estado $|E\rangle$.

Vamos a ver ahora un ejemplo de evolución en el tiempo de un sistema. Supongamos que un sistema de un único qubit tiene como Hamiltoniano

$$H = \hbar\omega X \quad (2.20)$$

Con X siendo la matriz X de Pauli. Por lo tanto, los autovectores de H son los mismos que los autovectores de X , es fácil ver que estos autovalores son $\sigma_1 = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ y $\sigma_2 = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Para conocer la evolución temporal de este sistema, tenemos que resolver la ecuación de Schrödinger de este sistema

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hbar\omega X |\psi\rangle \quad (2.21)$$

La resolución de esta ecuación diferencial es muy sencilla, tiene como resultado

$$|\psi(t_2)\rangle = \exp\left(\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right) |\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2) |\psi(t_1)\rangle \quad (2.22)$$

Con

$$U(t_1, t_2) = \exp\left(\frac{-iH(t_2 - t_1)}{\hbar}\right) = \exp(-i\omega X(t_2 - t_1)) \quad (2.23)$$

2.2.3 Medición de sistemas cuánticos

Postulado 4 (Medición cuántica) *Las mediciones cuánticas vienen descritas por una colección $\{M_m\}$ de operadores de medición. Estos son operadores que actúan en el espacio de estados del sistema a medir, donde el índice m se refiere a los distintos resultados que puedan surgir de las mediciones en el experimento. Si el estado de un sistema es $|\psi\rangle$ inmediatamente antes de la medición entonces la probabilidad de que ocurra el resultado m viene dada por:*

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle \quad (2.24)$$

y el estado del sistema después de la medición es

$$\frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle}} \quad (2.25)$$

Y los operadores de medición verifican la ecuación de completitud

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I \quad (2.26)$$

La ecuación de completitud expresa el hecho de que las probabilidades suman 1:

$$1 = \sum_m p(m) = \sum_m \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle \quad (2.27)$$

Algo que veremos mucho a lo largo de este texto es la medición de un qubit en la base computacional, esta es una medición de un único qubit con dos posibles resultados definidos por los operadores de medición $M_0 = |0\rangle\langle 0|$ y $M_1 = |1\rangle\langle 1|$. De esta manera, si el estado que se mide es $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ tenemos que

$$p(0) = \langle \psi | M_0^\dagger M_0 | \psi \rangle = \langle \psi | M_0 | \psi \rangle = |a|^2 \quad (2.28)$$

$$p(1) = \langle \psi | M_1^\dagger M_1 | \psi \rangle = \langle \psi | M_1 | \psi \rangle = |b|^2 \quad (2.29)$$

Obteniendo el resultado que esperábamos.

De esta manera, hemos dado una breve introducción a los postulados de la mecánica cuántica ligeramente adaptados a lo que buscamos para la computación cuántica, algunos no están en el formato en el que se suelen ver, ya que la formulación puede estar suscrita a los intereses con los que se escriben los postulados, aunque por supuesto son siempre equivalentes. Los dos primeros postulados nos dan lugar al espacio en el que vamos a trabajar, con el tercer postulado podemos estudiar la evolución de los sistemas en el espacio que hemos definido y el último postulado nos dice cómo extraer información de nuestros sistemas cuánticos. Los más relevantes a lo largo de los postulados es que no podemos observar directamente el estado cuántico, si bien podemos medirlo con respecto a cierta base ortogonal, no sabemos cual es *exactamente* el estado. De estos postulados se derivan la mayoría de los conceptos que vamos a ver a continuación y, aunque no hemos querido profundizar, proveen de cierta base para entender cómo funciona la mecánica cuántica y que, de esta manera, la computación cuántica nos resulte, al menos, un poco menos mágica.

Chapter 3

Computación cuántica

3.1 Del bit clásico al qubit cuántico

La base de la computación actual son los bits, es la unidad básica de información. El nombre es un acrónimo de binary digit y representa un estado lógico, normalmente "0" o "1". La computación se basa en cadenas de bits que codifican todo el almacenamiento, la corriente y también de manera fundamental, los circuitos del hardware de los ordenadores que se usan a diario.

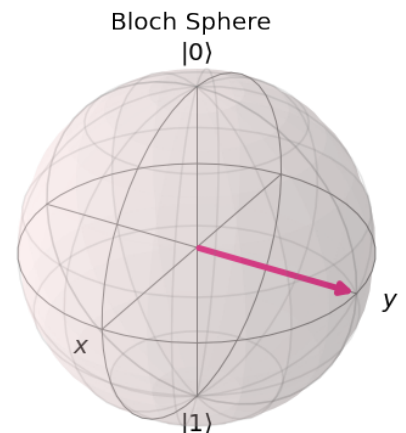
La computación cuántica y la información cuántica se basa en un concepto análogo, una generalización del bit que es la base de la potencia de este paradigma de computación.

Matemáticamente podemos considerar un bit como un estado representado por dígito binario, de esta manera, se puede trabajar matemáticamente con él. Un bit procesado se implementa mediante uno de los dos niveles de baja tensión continua, y mientras se pasa de uno de estos dos niveles al otro, debe superarse lo más rápidamente posible la llamada "zona prohibida" entre dos niveles lógicos, ya que la tensión eléctrica no puede cambiar de un nivel a otro instantáneamente. Por lo tanto, consideramos que un bit tiene sólo dos estados posibles, que ahora representaremos como $|0\rangle$ y $|1\rangle$

Un qubit es un sistema cuántico que tiene un espacio bidimensional de estados. Si suponemos que $|0\rangle$ y $|1\rangle$ forman una base ortonormal para ese espacio de estados, la medición de un qubit siempre nos devolverá uno de los dos estados, sin embargo, el qubit puede estar en un estado distinto a $|0\rangle$ y $|1\rangle$, puede ser una combinación lineal de estados, lo que se suele llamar *superposición*:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (3.1)$$

Donde α y β son números complejos, aunque para muchos propósitos no se pierde mucho en ellos como números reales. Dicho de otro modo, el estado de un qubit es un vector en un espacio vectorial complejo de dos dimensiones. Los estados especiales $|0\rangle$ y $|1\rangle$ se conocen como estados computacionales básicos y forman una base ortonormal para este espacio vectorial. Podemos examinar un bit para determinar si está en el estado 0 o 1, los ordenadores hacen esto todo el tiempo, por ejemplo, cuando recuperan el contenido de su memoria. No obstante, no podemos examinar un qubit para determinar su estado cuántico, es decir, los valores de α y β . En su lugar, la mecánica cuántica nos dice que sólo podemos adquirir información mucho más restringida sobre el estado cuántico. Cuando medimos un qubit obtenemos o bien el resultado $|0\rangle$, con probabilidad $|\alpha|^2$ o el resultado $|1\rangle$, con probabilidad $|\beta|^2$. Naturalmente, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, ya que las probabilidades deben sumar uno. La capacidad de un qubit de estar en un estado de superposición va en contra de nuestro "sentido



común del mundo físico que nos rodea. Un bit clásico es como una moneda: o cara o cruz. En el caso de las monedas imperfectas, puede haber estados intermedios, como tenerla equilibrada en un borde, pero estos pueden ser ignorados en el caso ideal. En cambio, un qubit puede existir en un continuo de estados entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$ hasta que es observado. Insistamos en que cuando se mide un qubit, el resultado de la medición es siempre "0" o "1". Por ejemplo, un qubit puede estar en el estado

$$|+\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \quad (3.2)$$

El cuál, cuando se mide, devuelve $|0\rangle$ el 50% del tiempo y $|1\rangle$ el otro 50% [18]. A primera vista, podría parecer que debería haber cuatro grados de libertad en $|\psi\rangle$ ya que α y β son números complejos con dos grados de libertad cada uno. Sin embargo, un grado de libertad se elimina por la restricción de normalización $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Esto significa que, con un cambio adecuado de coordenadas, se puede eliminar uno de los grados de libertad. Por lo tanto, uno puede visualizar un qubit como un vector en una esfera de radio 1. En la imagen 3.1 podemos observar esta visualización propuesta, donde el vector constituye un estado $|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2} |1\rangle$ donde θ y ϕ son las coordenadas que definen un punto en la superficie de la esfera de Bloch. Al medir un bit, obligamos al vector a colapsar al estado $|0\rangle$ con probabilidad $|\cos\frac{\theta}{2}|^2$ y al estado $|1\rangle$ con probabilidad $|e^{i\phi} \sin\frac{\theta}{2}|^2$. En esta imagen en particular, como el vector está justo a mitad de camino entre ambos, la probabilidad es 50/50.

3.1.1 Varios qubits

Los ordenadores con un sólo bit no resultan nada interesantes. De igual manera, se busca tener ordenadores con más de un qubit.

En primer lugar, veamos como se extendería nuestro sistema para tener dos qubits. Cuando tenemos 2 bits para representar la información se obtienen cuatro posibles combinaciones 00, 10, 01 y 11.

Consideremos, por ejemplo, la cadena 01, para combinar sistemas cuánticos se debe usar el producto tensorial. Podemos describir el bit 01 como:

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \quad (3.3)$$

Un par de qubits puede escribirse como $|0\rangle \otimes |1\rangle$ o $|0 \otimes 1\rangle$, como notación, también lo escribiremos como $|0\rangle |1\rangle$, $|0, 1\rangle$ o $|01\rangle$.

En un sistema de dos qubits habrá cuatro estados computacionales básicos denotados por $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$, por lo que un vector de estado que describa estos dos qubits será de la forma:

$$|\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle \quad (3.4)$$

De manera análoga al caso de un único qbit, el resultado de medir un estado $|x\rangle$ ocurre con probabilidad $|\alpha_x|^2$. Ahora la noción de entrelazamiento también se extiende y es aquí dónde aparecen conclusiones sorprendentes.

Veamos como representar formalmente un estado de varios qubits, si tenemos dos qubits separados, podemos describir su estado conjunto usando el producto tensorial como ya vimos en la sección 2.1.3. Si tenemos dos qubits,

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}, |b\rangle = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Su estado combinado es:

$$|ba\rangle = |b\rangle \otimes |a\rangle = \begin{pmatrix} b_0 \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \\ b_1 \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Veamos un ejemplo de esto, sea un sistema que está en el estado

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|00\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.7)$$

Este estado es conocido como Bell state o par EPR y es responsable de muchas sorpresas en computación cuántica. En este estado, los dos qubits están entrelazados, esto quiere decir que, si medimos el primer qubit y lo encontramos en el estado $|1\rangle$, entonces automáticamente sabemos que el estado del segundo qubit es $|1\rangle$. Como resultado, una medición del segundo qubit siempre da el mismo resultado que la medición del primer qubit. Es decir, los resultados de las mediciones están correlacionados. De hecho, resulta que se pueden realizar otros tipos de mediciones en el estado de Bell aplicando primero algunas operaciones al primer o segundo qubit, y aún siguen existiendo interesantes correlaciones interesantes entre el resultado de una medición en el primer y segundo qubit.

Un aspecto curioso del entrelazamiento es su monogamia: para que 2 qubits A y B estén (máximamente) entrelazados es necesario que ninguno de ellos esté (máximamente) entrelazado con un tercer qubit C [19]. Esta propiedad es importante para el diseño de algoritmos cuánticos.

Estas correlaciones han sido objeto de un intenso interés desde el famoso artículo de Einstein, Podolsky y Rosen, en el que señalaron por primera vez las extrañas propiedades de estados como el de Bell. Las ideas de EPR fueron retomadas y mejoradas por John Bell, que demostró un resultado sorprendente: las correlaciones de medición en el estado de Bell son más fuertes que las que podrían existir entre los sistemas clásicos.

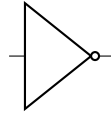
De forma más general, podemos considerar un sistema de n qubits. Los estados base computacionales de este sistema son de la forma $|x_1 x_2 \dots x_n\rangle$, por lo que un estado cuántico de dicho sistema está especificado por 2^n amplitudes. Para $n = 500$ este número es mayor que el número estimado de número de átomos en el Universo. Tratar de almacenar todos estos números complejos no sería posible en ningún ordenador clásico concebible. El espacio de Hilbert es, en efecto, un lugar muy grande. En principio, sin embargo, la Naturaleza manipula esas enormes cantidades de datos, incluso para sistemas que contienen sólo unos cientos de átomos. Es como si la Naturaleza guardara 2.500 trozos de papel papel de borrador escondido, en el que realiza sus cálculos a medida que el sistema evoluciona. Este enorme potencial de cálculo es algo que nos gustaría mucho aprovechar. Pero, ¿cómo podemos pensar en la mecánica cuántica como computación?

3.2 Puertas cuánticas

Los cambios que se producen en un estado cuántico pueden describirse utilizando el lenguaje de la computación cuántica. De forma análoga a como se construye un ordenador clásico a partir de un circuito eléctrico que contiene cables y puertas lógicas, un ordenador cuántico se construye a partir de un circuito cuántico que contiene cables y puertas cuánticas elementales para transportar y manipular la información cuántica. En esta sección, partiendo de los circuitos clásicos, describimos algunas puertas cuánticas sencillas y presentamos varios circuitos de ejemplo que ilustran su aplicación, incluido un circuito que teletransporta qubits!

3.2.1 De las puertas clásicas a las puertas cuánticas

Las puertas lógicas clásicas son la manera que se utiliza para manipular bits, y la concatenación de puertas da lugar a un circuito. Uno podría preguntarse cómo podemos cambiar el estado de un sólo bit, consideremos por ejemplo la puerta lógica not:



Esta puerta toma como input un bit y devuelve un bit, podemos representar la puerta con una matriz cuadrada:

$$NOT = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

De esta manera, $NOT |0\rangle = |1\rangle$ y viceversa. Como hemos utilizado la representación de los bits a través de un vector, esto nos podría inducir de igual manera la puerta cuántica que representa a NOT, que llamaremos X. Nótese que estamos asumiendo que la puerta cuántica NOT actúa linealmente, es decir:

$$X(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle \quad (3.9)$$

O, si representamos en notación vectorial el estado $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$:

$$X \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Por qué la puerta cuántica actúa linealmente y no de forma no lineal es una pregunta muy interesante, y la respuesta no es en absoluto obvia. Resulta que este comportamiento lineal es una propiedad general de la mecánica cuántica, y muy bien motivada empíricamente. Además, el comportamiento no lineal puede dar lugar a aparentes paradojas como los viajes en el tiempo, la comunicación más rápida que la luz y las violaciones de las segundas leyes de la termodinámica. En el caso de una puerta lógica clásica unitaria, la única puerta no trivial es la puerta NOT, sin embargo, cuando nos vamos a mundo cuántico, las posibilidades son mucho mayores. Primero, vamos a plantearnos que tiene que satisfacer una puerta cuántica. La condición de normalización nos obliga a que la matriz sea unitaria, es decir, que $UU^\dagger = I$ donde U^\dagger es la adjunta de U resultado de trasponer y después conjugar en los complejos. Sorprendentemente, la única condición que deben satisfacer las puertas cuánticas es esta, por lo tanto, cualquier matriz unitaria puede ser una puerta cuántica. Vamos a mencionar dos de ellas con nombre propio y que serán de utilidad posteriormente.

En primer lugar vamos a considerar la puerta Z, esta puerta deja $|0\rangle$ igual y cambia el signo de $|1\rangle$:

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Por otro lado, tenemos la puerta de Hadarmard, una de las más importantes y útiles.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Esta puerta es el equivalente a la "raíz cuadrada de AND" ya que convierte $|0\rangle$ en $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ y $|1\rangle$ en $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$. Si lo visualizamos en la esfera de Bloch, lo que hace es rotar la esfera sobre el eje y 90° y después aplica una rotación sobre el eje x de 180° .

Igual que las puertas lógicas clásicas tienen su representación, la tienen las puertas cuánticas, algunas fundamentales son:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Pauli-X} & q : \text{---}\boxed{\text{H}}\text{---} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 \text{Pauli-Y} & q : \text{---}\boxed{\text{Y}}\text{---} \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
 \text{Pauli-Z} & q : \text{---}\boxed{\text{Z}}\text{---} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
 \text{Hadamard} & q : \text{---}\boxed{\text{H}}\text{---} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}
 \end{array}$$

También tenemos las puertas de rotación, que son también interesantes para un único qubit: si tomamos la exponencial de las matrices de Pauli X,Y,Z llegamos a los operadores de rotación sobre los distintos ejes de la esfera de Bloch:

$$R_x(\theta) \equiv e^{-i\theta X/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)X = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -i \sin(\frac{\theta}{2}) \\ -i \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$$R_y(\theta) \equiv e^{-i\theta Y/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Y = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -\sin(\frac{\theta}{2}) \\ \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

$$R_z(\theta) \equiv e^{-i\theta Z/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Veamos ahora que ocurre cuando aplicamos puertas unitarias en un sistema de varios qubits. Para empezar, supongamos que tenemos un sistema de 2 qubits, $|q_0\rangle$ y $|q_1\rangle$, el estado del sistema total es $|q_1q_0\rangle$. Si queremos ver, por ejemplo, como actúa una puerta h sobre $|q_0\rangle$ y una puerta x sobre $|q_1\rangle$, que viene representado por el siguiente circuito:

$$\begin{array}{l}
 q_0 : \text{---}\boxed{\text{H}}\text{---} \\
 q_1 : \text{---}\boxed{\text{X}}\text{---}
 \end{array}$$

Para representar el sistema final utilizamos el producto tensorial y, por sus propiedades:

$$X |q_1\rangle \otimes H |q_0\rangle = (X \otimes H) |q_1q_0\rangle \quad (3.16)$$

Para representar el productor tensorial de manera más clara, podemos utilizar la siguiente notación:

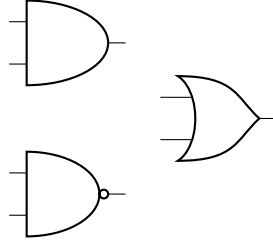
$$X \otimes H = \begin{pmatrix} 0 & H \\ H & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Por último, también merece la pena mencionar la puerta "phase shift", en la que giramos la esfera de Bloch θ grados en una dirección en particular. Se define como

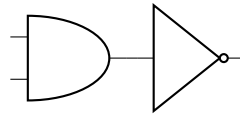
$$R(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

3.2.2 Puertas de varios qubits

En computación clásica, tenemos una serie de puertas lógicas que nos permiten hacer operaciones con varios bits, por ejemplo AND, OR y NAND:



Un resultado teórico fundamental es que cualquier operación sobre bits puede ser computada componiendo la puerta NAND, por lo que esta se conoce como la puerta universal. NAND es básicamente una puerta AND seguida de una puerta NOT:



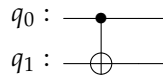
En términos de matrices:

$$NAND = NOT \times AND = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Sin embargo, todas las puertas que hemos presentado para múltiples qubits tienen algo en común y es que no son reversibles. Esto nos dice que no funcionarán en el mundo cuántico ya que todas las puertas cuánticas tienen que ser reversibles y representadas por matrices unitarias. Por ejemplo, la operación AND no es reversible, ya que si recibieramos el bit $|0\rangle$ no podríamos determinar en qué estado estaban exactamente los dos bits iniciales.

Las puertas reversibles tienen una historia anterior a la computación cuántica. Nuestros ordenadores cotidianos pierden energía y generan una enorme cantidad de calor. En la década de 1960, Rolf Landauer analizó los procesos computacionales y demostró que la pérdida de energía y el calor se producen al borrar información, en lugar de escribirla. Esta noción se conoce como el principio de Landauer [20].

Veamos ahora un ejemplo de puerta de más de un qubit. Podemos considerar la puerta controlled-NOT:



Esta puerta tiene dos inputs y dos outputs, el input de arriba, denotado por $|x\rangle$ es el qubit de control. Si $|x\rangle = |0\rangle$ entonces $|y\rangle$ será igual en la salida que en la entrada, de lo contrario, actúa como un not sobre $|y\rangle$. Es decir la puerta CNOT lleva el estado $|x, y\rangle$ a $|x, x \oplus y\rangle$ donde \oplus .

La matriz que corresponde a esta puerta es:

$$CX |q_1, q_0\rangle = |0\rangle \langle 0| \otimes I + |1\rangle \langle 1| \otimes X = CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

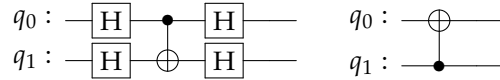
Con un poco de álgebra elemental es trivial comprobar que esta matriz es unitaria y que su inversa es ella misma.

Es importante destacar el hecho de que en Qiskit la convención es realizar la operación de manera distinta, de esta manera, para Qiskit tenemos que

$$CX |q_0, q_1\rangle = I \otimes |0\rangle \langle 0| + X \otimes |1\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Tendremos en cuenta esta manera de operar sólo para el funcionamiento de qiskit, para todo lo demás, utilizaremos la otra notación y forma de operar.

Si seguimos jugando con estas puertas llegamos a la siguiente igualdad, llamada "CNOT circuit identity"



Este es un ejemplo de kickback (o phase kickback) que es muy importante y se utiliza en casi todos los algoritmos cuánticos. El kickback consiste en que el valor propio añadido por una puerta a un qubit se "devuelve" a un qubit diferente mediante una operación controlada.

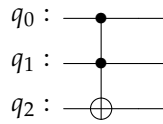
Además, las operaciones controladas son una de las operaciones más útiles en computación, tanto clásica como cuántica. Por lo tanto, podemos generalizar esta operación variando tanto la cantidad de bits de control como la puerta que se aplica en caso de que se cumplan las condiciones. Por ejemplo, para aplicar un operador unitario cualquiera U , tenemos la operación "U-controlada" (controlled-U), que también denotaremos como cU . En este caso, representa la siguiente operación:

$$|c\rangle|t\rangle \rightarrow |c\rangle {}^cU|t\rangle$$

La matriz que describe esta puerta es

$${}^cU = \left[\begin{array}{c|c} I_2 & 0 \\ \hline 0 & U \end{array} \right]$$

De este modo, podemos generalizar el concepto y obtener la matriz para cualquier puerta con un número arbitrario de qubits de control y con la aplicación de una puerta arbitraria, por ejemplo, la puerta de Toffoli, que viene dada por dos qubits de control y la aplicación de la puerta X, es



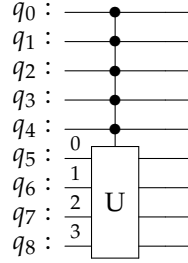
Fundamentalmente, la operación que realiza es:

$$|x, y, z\rangle \rightarrow |x, y, z \oplus (x \wedge y)\rangle \quad (3.22)$$

La matriz que corresponde a esta puerta es

$$T = \left[\begin{array}{c|c|c} I_2 & 0 & 0 \\ \hline 0 & I_2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & X \end{array} \right]$$

Es facil comprobar que, en realidad, $T = {}^C({}^C X)$, notacionalmente diremos que $C^2(X) = {}^C({}^C X)$. En general, podemos calcular $C^n(U)$ para cualquier puerta U que afecte a k bits y para cualquier cantidad n de bits de control, por ejemplo, para $k=4$, $n=5$



Volviendo a la puerta de Toffoli, una de las razones por las que es interesante es que es universal en computación clásica. En otras palabras, con copias de la puerta de Toffoli, se puede hacer cualquier puerta lógica clásica "reversible" o adaptaciones de las puertas clásicas para que sean reversibles. En particular, se puede hacer un ordenador reversible utilizando sólo puertas de Toffoli. Tal ordenador en teoría, no utilizaría ninguna energía ni emitiría ningún calor. Veamos ahora cómo se puede extender este concepto de universalidad a las puertas cuánticas.

3.2.3 Puertas universales

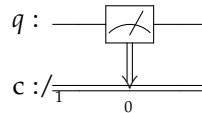
Como acabamos de ver, la puerta de Toffoli constituye, en computación clásica, una puerta universal. En lo que respecta a computación cuántica, un conjunto de puertas se dice universal para computación cuántica si cualquier operación unitaria se puede aproximar con precisión arbitraria por un circuito cuántico. Un conjunto universal es

$$\{H, {}^C NOT, R(\cos^{-1}(\frac{3}{5}))\} \quad (3.23)$$

Sin embargo, la demostración de este resultado se escapa de los objetivos del trabajo. Para profundizar en las puertas universales y la demostración, se puede usar [17][18]. Es importante recalcar que este conjunto no es único, igual que en computación clásica, existen muchos conjuntos universales. Por otro lado, también hay un hecho importante y es que al ser el conjunto de operaciones unitarias un conjunto continuo, no podemos utilizar un conjunto finito para replicar *cualquier* puerta arbitraria. Sin embargo, con este conjunto si que se puede *aproximar* cualquier puerta con precisión arbitraria.

3.2.4 Medición

El elemento que nos falta para construir circuitos cuánticos es la medición, en un circuito, denotaremos una medida proyectiva en la base computacional utilizando el siguiente símbolo:



Donde la línea que sale de q representa un qubit y la línea doble que sale de c representa 1 bit clásico.

Respecto a las mediciones, hay dos principios fundamentales a tener en cuenta [17].

Principio de medición diferida: Las mediciones siempre se pueden trasladar desde una etapa intermedia de un circuito cuántico al final del circuito; si los resultados de las mediciones se utilizan en cualquier etapa del circuito, entonces las operaciones controladas clásicamente pueden ser sustituidas por operaciones

cuánticas condicionales.

Este principio puede resultar un poco chocante, por ejemplo, en el ejemplo de teleportación cuántica de la sección 3.3.5, el circuito puede medirse al final y los resultados no cambian, se pierde el experimento de la teleportación con el envío de información clásica pero el cómputo final del circuito es el mismo.

Principio de medición implícita: Sin pérdida de generalidad, cualquier cable cuántico no terminado (qubits que no se miden) al final de un circuito cuántico puede suponerse medido.

3.3 Circuitos cuánticos

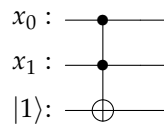
Una vez vistos los elementos básicos que componen un circuito, es interesante desarrollar como combinarlos para sacarles partido, por lo que en esta sección vamos a ver algunos ejemplos que nos den una idea de cómo funciona un circuito cuántico. Para esta sección, nos basamos fundamentalmente en el trabajo realizado en materia de circuitos en [21].

3.3.1 Computación clásica en un ordenador cuántico

Si el objetivo de la computación cuántica es superar a la computación clásica, una pregunta que uno se podría hacer es si es posible simular un circuito lógico clásico usando un circuito cuántico. La respuesta resulta ser que sí, pero con matices, lo cual es congruente con la creencia que ostentan los físicos sobre la universalidad de la mecánica cuántica. Estos matices son que se simula una adaptación de las puertas no reversibles, es decir, en lugar de simular directamente AND, simulamos una puerta reversible en la que uno de los bits de salida sea AND.

Por lo tanto, los circuitos lógicos clásicos pueden ser simulados en un ordenador cuántico. Sin embargo, ya hemos visto que esto al revés no es posible ya que las puertas como NAND, AND o XOR no son reversibles, luego no podemos usarlas directamente y, de igual manera, tampoco se pueden simular exactamente con circuitos cuánticos al ser todos los operadores unitarios y reversibles.

Como ya mencionamos en la sección 3.2.2, la puerta de Toffoli es universal en computación clásica y como ya hemos visto, también podemos aplicar la puerta de Toffoli en computación cuántica. Vamos ver esto, sabemos que la puerta NAND es universal, es decir, cualquier función booleana se puede generar con la combinación de puertas NAND [22]. Veamos que con la puerta de Toffoli podemos generar puertas lógicas clásicas equivalentes a NAND.



En este circuito, si medimos el tercer qubit, nos devolverá $NAND(x_0, x_1)$ por lo tanto, concatenando estas puertas ya somos capaces de generar cualquier circuito lógico clásico.

3.3.2 Intercambiar qubits

Una vez que hemos visto ejemplos de puertas de uno y varios qubits, sólo queda ver cómo se pueden concatenar estas puertas para formar circuitos, que es la base de la computación. Vamos a plantearnos la posibilidad de intercambiar qubits de sitio. Lo que buscamos es una operación lineal unitaria T que, dado un sistema cuántico \mathbb{V} verifique

$$T : \mathbb{V} \otimes \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V} \otimes \mathbb{V} \quad (3.24)$$

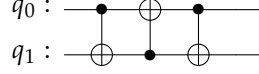
Y el objetivo es que lleve

$$T(|x\rangle \otimes 0) = (0 \otimes |x\rangle) \quad (3.25)$$

Si transportamos una superposición de estados:

$$T\left(\frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \otimes 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(T(|x\rangle \otimes 0) + T(|y\rangle \otimes 0)) = \frac{0 \otimes (|x\rangle + |y\rangle)}{\sqrt{2}} = 0 \otimes \frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.26)$$

Podemos generar un circuito que intercambia qubits con las siguientes puertas:

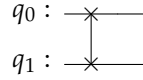


Vamos a entender este circuito a fondo:

El circuito se lee de izquierda a derecha y cada línea representa un estado. En este circuito se concatenan tres operaciones CNOT de la siguiente manera:

$$|a, b\rangle \rightarrow |a, a \oplus b\rangle \rightarrow |a \oplus (a \oplus b), a \oplus b\rangle = |b, a \oplus b\rangle \rightarrow |b, (a \oplus b) \oplus b\rangle = |b, a\rangle \quad (3.27)$$

Por lo tanto, el efecto de este circuito es intercambiar el estado de dos qubits, que a partir de ahora representaremos como



3.3.3 Copiar qubits

Supongamos que nos interesa un circuito cuántico que nos permita copiar qubits. En el caso de transportar qubits, sin embargo, vamos a tratar de encontrar ahora una función que pueda copiar qubits, buscamos

$$V : \mathbb{V} \otimes \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{V} \otimes \mathbb{V} \quad (3.28)$$

Que realice la operación

$$C(|x\rangle \otimes 0) = |x\rangle \otimes |x\rangle \quad (3.29)$$

Parece una operación igual de factible que la que hemos programado en 3.3.2. Vamos a comprobarlo, si C es un candidato para operador de clonación, entonces en los estados de la base se comporta como

$$C(|0\rangle \otimes |0\rangle) = |0\rangle \otimes |0\rangle \quad (3.30)$$

y

$$C(|1\rangle \otimes |0\rangle) = |1\rangle \otimes |1\rangle$$

Si queremos copiar un estado en superposición, tenemos que, necesariamente

$$C\left(\frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \otimes 0\right) = \frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.31)$$

Ahora, como C tiene que ser una operación lineal, por lo tanto:

$$\begin{aligned} C\left(\frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \otimes 0\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}}C((|x\rangle + |y\rangle) \otimes 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(C(|x\rangle \otimes 0) + C(|y\rangle \otimes 0)) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}((|x\rangle \otimes |x\rangle) + (|y\rangle \otimes |y\rangle)) = \frac{(|x\rangle \otimes |x\rangle) + (|y\rangle \otimes |y\rangle)}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Pero,

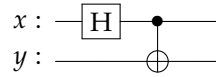
$$\frac{(|x\rangle \otimes |x\rangle) + (|y\rangle \otimes |y\rangle)}{\sqrt{2}} \neq \frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|x\rangle + |y\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.33)$$

Por lo tanto, hemos demostrado que, aunque C es una aplicación de conjuntos, no es una aplicación lineal, por lo tanto no está permitida.

Esta afirmación y esta demostración rápida tiene raíces verdaderamente profundas en el campo de la computación cuántica ya que es consecuencia del No-Cloning Theorem, que de hecho tiene una prueba muy sencilla a la que se recomienda echar un vistazo en [23]. Hay otra forma de ver el fallo del circuito para copiar bits, basada en la intuición de que un qubit contiene de algún modo información "oculta" no accesible directamente por la medición. Una vez que se mide un qubit, el estado del otro está completamente determinado, y no se puede obtener información adicional sobre a y b. En este sentido, la información extra oculta que llevaba el qubit original se perdió en la primera medición, y no puede recuperarse. Sin embargo, si el qubit ha sido copiado, entonces su estado debería seguir conteniendo parte de esa información oculta. Por lo tanto, una copia no puede haber sido creada.

3.3.4 Estados de bell

Vamos a considerar ahora los estados de Bell, que son estados muy útiles, particularmente de cara a la creación de algoritmos como veremos más adelante y, además, contienen propiedades muy particulares de la computación cuántica que dan lugar a resultados sorprendentes [24]. El circuito que usamos para crear los estados de Bell es



Este circuito, da lugar a los estados β_{xy} que vienen dados por

$$|00\rangle \rightarrow \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\beta_{00}\rangle \quad (3.34)$$

$$|01\rangle \rightarrow \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} = |\beta_{01}\rangle \quad (3.35)$$

$$|10\rangle \rightarrow \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\beta_{10}\rangle \quad (3.36)$$

$$|11\rangle \rightarrow \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} = |\beta_{11}\rangle \quad (3.37)$$

Y la ecuación general es

$$|\beta_{xy}\rangle = \frac{|0, y\rangle + (-1)^x |1, \bar{y}\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.38)$$

Como hemos mencionado, estos estados serán recurrentes en la generación de algoritmos, también son conocidos como pares EPR.

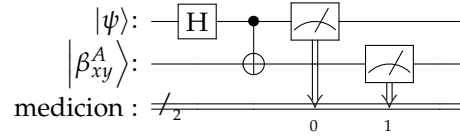
3.3.5 Teleportación cuántica

Ahora, vamos a apicar las técnicas que acabamos de aprender para entender un resultado bastante profundo de la mecánica cuántica muy sorprendente. Como ya conocemos los estados de Bell, veamos una aplicación de ellos. Conozcamos a dos amigos de cualquier persona que haya estudiado comunicaciones, criptografía o información, Alice y Bob. Alice y Bob viven muy lejos pero un día hace tiempo que estuvieron juntos generaron un par EPR y cada uno se llevó un qubit distinto.

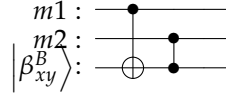
Pasados unos años, Bob está escondido y Alice quiere enviarle un nuevo qubit $|\psi\rangle$ a Bob, ella no sabe cuál

es el estado del qubit y, además, solo puede enviar información *clásica* a Bob. Por suerte para Alice, la teleportación cuántica es una manera de usar un par EPR para enviar $|\psi\rangle$ a Bob, combinado con el envío de un poco de información clásica. Veamos cómo se puede llevar esto a cabo.

Alice hace interactuar el qubit $|\psi\rangle$ con su mitad del par EPR usando el circuito que hemos visto en la sección 3.3.4 y realiza una medición de los dos qubits en su posesión, obteniendo uno de los cuatro posibles estados de la base. Le envía a Bob cuál de los cuatro estados es el que ha medido y con esa información Bob realiza cierta operación sobre su qubit del par EPR dependiendo de la medición de Alice. De esa manera, Bob puede recuperar el qubit $|\psi\rangle$. Vamos a denotar como $|\beta_{xy}^A\rangle$ al qubit del par EPR que pertenece a Alice y como $|\beta_{xy}^B\rangle$ al que pertenece a Bob. Como ya hemos comentado, $|\psi\rangle$ es el qubit que queremos teleportar. Alice por su cuenta tiene que realizar el siguiente circuito



La medición de este circuito devuelve $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ o $|11\rangle$, resultado el cuál Alice tiene que enviar a Bob. Una vez que Bob esté en posesión de esta información, tiene que realizar la siguiente operación, que depende de la medición de Alice. Si la medición de Alice es $|00\rangle$, entonces Bob no tiene que hacer nada, su qubit será directamente el estado $|\psi\rangle$, si Alice mide el estado $|01\rangle$, a Bob le basta aplicar la puerta X a su qubit para obtener $|\psi\rangle$. Si la medición fuera $|10\rangle$, tiene que aplicar la puerta Z y, si la medición es $|11\rangle$, aplicará primero la puerta X y después la Z. De esta manera, una vez Alice ha aplicado el circuito anterior, Bob debe aplicar el circuito



Donde m1 es la medición del primer qubit y m2 la del segundo, luego serán seguro $|0\rangle$ o $|1\rangle$, por lo tanto, se aplican en orden las puertas Controlled-X y Controlled-Z, cumpliendo de esta manera que ahora el qubit que inicialmente era $|\beta_{xy}^B\rangle$, ahora es $|\psi\rangle$.

Por último, vamos a ver esto matemáticamente. Vamos a considerar el circuito conjunto en el que tenemos tres qubits, $|\psi\rangle$, $|\beta_{xy}^A\rangle$ y $|\beta_{xy}^B\rangle$. Por simplicidad en el ejemplo, vamos a suponer que

$$|\beta_{xy}\rangle = |\beta_{xy}^A\rangle |\beta_{xy}^B\rangle = |\beta_{00}\rangle \quad (3.39)$$

Por lo tanto, el estado inicial es

$$|\psi_0\rangle = |\psi\rangle |\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(|0\rangle(|00\rangle + |11\rangle) + \beta(|1\rangle(|10\rangle + |01\rangle))) \quad (3.40)$$

Ahora, Alice aplica el circuito que hemos visto a la parte que posee ella, aplicando la puerta CNOT y luego Hadamard, de esta manera, nos queda el siguiente estado:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}(\alpha(|0\rangle + |1\rangle)(|00\rangle + |11\rangle) + \beta(|0\rangle - |1\rangle)(|10\rangle + |01\rangle)) \quad (3.41)$$

De esta ecuación, obtenemos el estado en el que estará el qubit de Bob después de ser medido, aunque depende de la medición que haya realizado Alice. Es por esto, que ahora para poder obtener Bob el qubit original $|\psi\rangle$ tiene que realizar una transformación que depende de la medición que haya hecho Alice. Es necesario incidir en el hecho de que sin la medición de Alice, Bob nunca puede estar seguro de que tenga

Medición de Alice	Estado del qubit de Bob
00	$(\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle)$
01	$(\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle)$
10	$(\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle)$
11	$(\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle)$

el estado $|\psi\rangle$, esto es lo que impide que se utilice la teleportación para transmitir información más rápido que la velocidad de la luz. Como sabemos, la teoría de la relatividad nos dice que si consiguiéramos esto, podríamos enviar información al pasado. Es clave la observación de que, sin el pedacito de información cuántica, la teleportación no aporta ninguna información. Al explotar el recurso físico del entrelazamiento, el teletransporte cuántico sirve como primitivo clave en una variedad de tareas de información cuántica y representa un importante bloque de construcción para las tecnologías cuánticas, con un papel fundamental en el progreso continuo de la comunicación cuántica, la computación cuántica y las redes cuánticas [25].

3.3.6 Simulación cuántica

Una de las aplicaciones prácticas más importantes de la computación es la simulación de sistemas físicos. Por ejemplo, en el diseño de ingeniería, el análisis de elementos finitos y el modelado se utilizan para garantizar la seguridad y minimizar el coste. Los coches se hacen ligeros, estructuralmente sólidos, atractivos y baratos, utilizando diseño asistido por ordenador. La ingeniería aeronáutica moderna depende en gran medida de las simulaciones de dinámica de fluidos computacional para el diseño de aviones. Las armas nucleares ya no se prueban en la vida real (en su mayor parte), sino que se prueban mediante una exhaustiva modelización computacional. Sin embargo, simular un sistema cuántico totalmente general en un ordenador clásico sólo es posible para sistemas muy pequeños, debido a la escala exponencial del espacio de Hilbert con el tamaño del sistema cuántico. Para apreciar lo rápido que esto nos lleva más allá de los recursos computacionales razonables, consideremos la memoria clásica necesaria para almacenar un estado completamente general $|\psi_n\rangle$ de n qubits (sistemas cuánticos de dos estados). El espacio de Hilbert para n qubits se extiende por 2^n estados ortogonales, etiquetados $|j\rangle$ con $0 \leq j \leq 2^n$. Los n qubits pueden estar en una superposición de todos ellos en diferentes proporciones.

Para almacenar esta descripción del estado en un ordenador clásico, necesitamos almacenar todos los números complejos c_j . Cada uno de ellos requiere dos números de coma flotante (partes real e imaginaria). Utilizando 32 bits (4 bytes) para cada número en coma flotante, un estado cuántico de $n=27$ qubits requerirá 1 Gbyte de memoria -un ordenador de sobremesa nuevo en 2010 probablemente tenga entre 2 y 4 Gbytes de memoria en total-. Cada qubit adicional duplica la memoria, por lo que 37 qubits necesitarían un Terabyte de memoria -un ordenador de sobremesa nuevo en 2010 probablemente tenga un disco duro de este tamaño-. El tiempo que se necesitaría para realizar cualquier cálculo útil sobre este tamaño de datos es, en realidad, lo que se convierte en el factor limitante. Como mencionábamos en 1.1. Richard Feynman ya comentaba que lo mejor para simular sistemas cuánticos sería ordenadores cuánticos. De hecho, tanto él como Yuri Manin propusieron el simulador cuántico en [7][26].

La tarea fundamental de la simulación cuántica será normalmente evaluar la evolución en el tiempo de un sistema cuántico para un determinado Hamiltoniano. A raíz de los postulados de la mecánica cuántica y resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad (3.42)$$

Que nos lleva a simular la siguiente ecuación

$$|\Psi(t)\rangle = \exp(i\hat{H}t) |\Psi(0)\rangle \quad (3.43)$$

Para cierto estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ y el Hamiltoniano \hat{H} , que puede ser independiente del método. En muchos casos, lo que se busca son las propiedades de un sistema gobernado por el Hamiltoniano particular, y la evolución cuántica pura es suficiente. Para los sistemas cuánticos abiertos en los que el acoplamiento a otro sistema o entorno desempeña un papel, se utilizará en su lugar la ecuación maestra apropiada. Existen muchos métodos y técnicas de simulación que se pueden profundizar, una referencia muy buena para ello es [27].

Chapter 4

Algoritmos cuánticos

Ya hemos construido la arquitectura matemática que da lugar a la computación cuántica, ahora llega qué hacer con ella. Las ideas y objetivos del trabajo se solidifican en los algoritmos como veremos en el siguiente capítulo.

Los algoritmos suelen estar por delante del desarrollo del hardware y la computación cuántica no es una excepción en ello. Existieron muchos algoritmos cuánticos antes de que cualquier ordenador cuántico existiera. Los algoritmos manipulan qubits para resolver problemas y, en general, resuelven estos problemas de manera más eficiente que los ordenadores clásicos. No se pretende dar una explicación detallada de cada algoritmo pues esto es algo verdaderamente extenso, sin embargo, una de las mejores maneras de aprender es haciendo, por lo que la mejor manera de prepararse para entender un poco más a fondo lo que es un programa cuántico es con estos ejemplos. Por ello, cada algoritmo lo podemos encontrar en el Jupyter Notebook que hemos programado lo que puede resultar muy didáctico para entender cómo se usan.

4.1 Algoritmo de Deutsch's

El algoritmo más simple que podemos encontrar, y que nos sirve para tomar cierta perspectiva para desarrollar cierta intuición es el algoritmo de Deutsch. Este algoritmo surge como respuesta a un problema artificial. Esta parte es muy interesante para entender el algoritmo de Deutsch-Jozsa que veremos más adelante y que tiene mayor interés matemático.

Consideremos una función

$$f : \{0,1\} \rightarrow \{0,1\} \quad (4.1)$$

Existen cuatro funciones posibles, llamaremos balanceadas a las que $f(0) \neq f(1)$ y constantes a las que $f(0) = f(1)$. De las cuatro, dos son balanceadas y dos son constantes.

Supongamos ahora que nos dan a función como una caja negra, es decir, nos sabemos como está definida la función, sólo podemos dar inputs y ver cuáles son los outputs. Queremos diseñar un programa que dada una función como una caja negra, evalúe si es balanceada o constante.

Veamos un ejemplo con Python de cómo se podría resolver este problema en computación clásica.

```
1 if f(0) == 0:
2     if f(1) == 0:
3         print("Constant")
4     else:
5         print("Balanced")
6 else:
7     if f(1) == 0:
8         print("Balanced")
9     else:
10        print("Constant")
```

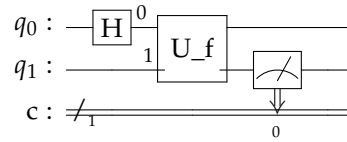
Un vez visto esto, pensemos en la implementación en computación cuántica. El manejo e implementación de la función f en computación clásica no nos supone ningún problema, sin embargo, en computación clásica, tenemos que exigir que cualquier puerta sea reversible y unitaria. Para evaluar una función f , la caja negra U_f será la puerta cuántica que usaremos para evaluar un input cualquiera.

$$U_f : |x\rangle |y\rangle \rightarrow |x\rangle |y \oplus f(x)\rangle \quad (4.2)$$

La clave de este algoritmo cuántico es que en vez de evaluar la función dos veces, ponemos en superposición los estados y una sólo evaluación de f , con algo de manipulación cuántica, nos da la solución.

Vamos a desarrollar el algoritmo poco a poco.

Comenzamos poniendo el estado de arriba en superposición de estados, como ya hemos visto en la sección 3.2.4, todos los qubits comienzan en el estado $|0\rangle$ por defecto, luego basta con aplicar una puerta H a este estado, de esta manera nos queda el siguiente circuito:



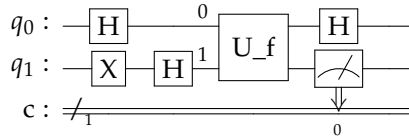
Veamos los distintos estados que atraviesa el circuito:

En álgebra, el circuito se corresponde con:

$$U_f(H \otimes I)(|0\rangle \otimes |0\rangle) \quad (4.3)$$

Comienza con $|\psi_0\rangle = |0\rangle |0\rangle$, al aplicar la puerta H obtenemos el estado $|\psi_1\rangle = \frac{|0,0\rangle + |1,0\rangle}{\sqrt{2}}$.

Después, multiplicamos por U_f y nos queda: $|\psi_2\rangle = \frac{|0,f(0)\rangle + |1,f(1)\rangle}{\sqrt{2}}$. Sin embargo, esto nos devolverá un estado en superposición que al medirlo nos dará un resultado no determinista, por lo que aún tenemos que refinar el algoritmo. Tras cierta prueba y error se encuentra un algoritmo que sea capaz de darnos una respuesta determinista a nuestro problema. Véase el siguiente circuito que da lugar al algoritmo:



(4.4)

En términos matriciales:

$$(H \otimes I)U_f(H \otimes H) |0,1\rangle \quad (4.5)$$

Nótese que hemos omitido la puerta X y hemos tomado como estado inicial el estado $|0,1\rangle$.

De nuevo, vamos a recorrer este circuito:

$$|\psi_1\rangle = \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{|0,0\rangle - |0,1\rangle + |1,0\rangle - |1,1\rangle}{2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

Una vez que multiplicamos por f , nos queda un resultado muy interesante [18]:

$$|\psi_2\rangle = \left(\frac{(-1)^{f(0)} |0\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \quad (4.7)$$

Por lo tanto el resultado depende de si f es balanceada o constante:

$$|\psi_2\rangle = \begin{cases} (\pm 1) \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) & f \text{ constante} \\ (\pm 1) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) & f \text{ balanceada} \end{cases} \quad (4.8)$$

Como la puerta H lleva $\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ a $|0\rangle$ y lleva $\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$ a $|1\rangle$ por lo tanto, al medir el qubit de arriba nos quedará $|0\rangle$ si la función es constante y $|1\rangle$ si es balanceada. Nótese que la medición de $-|1\rangle$ es la misma que de $|1\rangle$. Con esto, completáramos el algoritmo de Deutsch, igual que lo hemos escrito en Python para computación clásica, veámoslo para computación cuántica con qiskit. Este nos devuelve el circuito con el oráculo, pero no dice aún si la función es balanceada o constante. Esto se debe a que, si lo simuláramos, tendríamos una respuesta unívoca y de hecho, en el ejemplo de uso con el simulador se ve claramente que tendríamos la respuesta. Sin embargo, en caso de ejecutarlo en un ordenador cuántico real, el resultado puede dar errores y habría que definir cuantos intentos realizar así como nuestra tolerancia a los errores. Se puede ver dicho ejemplo de uso en el anexo de Jupyter Notebook. No lo simularemos en ordenadores cuánticos reales ya que nuestro objetivo está en el software y para estos programas la simulación es suficiente.

```

1 def Deutsch_Algorithm(oracle):
2     """
3
4     Parameters
5     -----
6     oracle : Circuito cuántico U_f, dos qubits de entrada y dos qubits de salida
7
8     Returns
9     -----
10    f balanceada o constante
11
12    """
13    qc = QuantumCircuit(2,1)
14    qc.h(0)
15    qc.x(1)
16    qc.h(1)
17    qc.append(oracle, [0,1])
18    qc.h(0)
19    qc.measure(0,0)
20    return qc

```

Lo que hace el circuito es básicamente un cambio de base, comenzamos en la base canónica. La primera matriz de Hadamard se utiliza como matriz de cambio de base para pasar a una superposición equilibrada de estados básicos. Mientras que en esta base no canónica, evaluamos f con el qubit inferior en superposición. La última matriz de Hadamard se utiliza como una matriz de cambio de base para volver a la base canónica.

4.2 Algoritmo de Deutsch-Jozsa

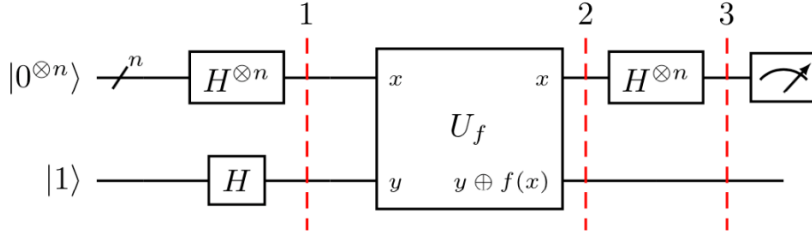
El algoritmo de Deutsch-Jozsa generaliza el algoritmo de Deutsch que ya hemos visto, el de Deutsch-Jozsa es un ejemplo claro de problema que resulta sencillo de resolver para un ordenador cuántico pero muy complejo para un ordenador clásico [4] que en el peor de los casos necesita $2^{n-1} + 1$ iteraciones para determinar si la función es constante o balanceada. En el año 1992 Deutsch y Jozsa encontraron la solución al problema para un número arbitrario de bits de entrada. Sea una función

$$f : \{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\} \quad (4.9)$$

Diremos que f es balanceada si exactamente la mitad de los inputs tienen como imagen el 0 y que es constante si *todos* los inputs tienen imagen o bien 0 o bien 1.

Clásicamente, en el mejor de los casos, dos consultas al oráculo pueden determinar si la función booleana oculta $f(x)$ está equilibrada. En el peor de los casos, si seguimos viendo la misma salida para cada entrada que probamos, tendremos que comprobar exactamente la mitad de todas las entradas posibles más una para estar seguros de que $f(x)$ es constante. Como el número total de entradas posibles es 2^n esto implica que necesitamos $2^{n-1} + 1$ entradas de prueba para tener la certeza de que $f(x)$ es constante en el peor de los casos. [28]

Veamos ahora el caso cuántico, la clave del algoritmo de Deutsch consistía en la superposición, para este algoritmo generalizaremos esas mismas ideas [29]. El circuito correspondiente al algoritmo es



Vamos a recorrer ahora los distintos pasos del algoritmo.

Paso 1 : Preparamos el estado inicial para que sea

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle^{\otimes n} |1\rangle \quad (4.10)$$

Paso 2 : Aplicamos la puerta de Hadamard a cada qubit:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle (|0\rangle - |1\rangle) \quad (4.11)$$

Paso 3 : Aplicar el oráculo U_f a los $n+1$ qubits. Recordamos que $U_f |x\rangle |y\rangle = |x\rangle |x(x)\rangle$ y tenemos:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle (|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle (|0\rangle - |1\rangle) \quad (4.12)$$

Ya que para cada x , $f(x)$ es o bien 0 o bien 1. **Paso 4 :** Ahora, aplicamos de nuevo las puertas de Hadamard pero sólo a los n primeros qubits, el último ya no nos interesa y podemos ignorarlo.

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} \left(\sum_{y=0}^{2^n-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle \right) = \frac{1}{2^n} \sum_{y=0}^{2^n-1} \left(\sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} (-1)^{x \cdot y} \right) |y\rangle \quad (4.13)$$

Paso 4 : Por último, medimos los n primeros qubits, la probabilidad de medir $|0\rangle^{\otimes n}$ es $|\frac{1}{2^n} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)}|^2$

lo cual vale 1 si $f(x)$ es constante y 0 si es balanceada.

La razón por la que esto funciona es muy similar al anterior algoritmo, cuando el oráculo es constante, aplicarlo a los qubits de entrada no tiene efecto, por lo que como H es su propia inversa, en el paso 4

invertimos el paso 2 y obtenemos el mismo estado.

$$H^{\otimes n} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Al aplicar U_f al resultado de 4.14, obtenemos el mismo vector, luego

$$H^{\otimes n} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

Sin embargo, si el oráculo es balanceado, a causa del phase kickback, se añade un fase negativa a la mitad de los estados.

$$U_f \frac{1}{\sqrt{2^n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Para entender el algoritmo mejor, se recomienda trabajar en un ejemplo sencillo como podría ser la función $f(x_0, x_1) = x_0 \oplus x_1$ donde el oráculo correspondiente a esta función es $U_f |x_1, x_0\rangle = (-1)^{f(x_0, x_1)} |x\rangle$. Se puede encontrar el algoritmo programado en qiskit así como ejemplos de uso en el anexo de Jupyter Notebook.

4.3 Quantum Fourier Transform

La transformada rápida de Fourier (FFT) es uno de los algoritmos más importantes del Siglo XXI, que ha encontrado numerosas aplicaciones en muchas ramas de la ciencia y la ingeniería. Este algoritmo nos permite calcular la transformada de Fourier discreta (DFT) de un vector de tamaño N en $\mathcal{O}(N \log N)$ operaciones [30] lo cuál es mucho más eficiente que las \mathcal{N}^ϵ operaciones requeridas en un cálculo por fuerza bruta en la que la matriz de representación de DFT es directamente multiplicada por el vector a transformar. Esta mejora de la eficiencia es notable y ha dado lugar a un amplio abanico de aplicaciones tales como procesamiento de señal o métodos espectrales para resolver ecuaciones en derivadas parciales. Aún así, la complejidad de la transformada de Fourier puede reducirse aún más a $\mathcal{O}((\log N)^2)$ usando la transformada cuántica de Fourier (QFT) [30] en un ordenador cuántico. Este es un caso conocido en la comunidad de computación ya que es un ejemplo claro del tipo de aceleración exponencial que puede proporcionar un ordenador cuántico sobre un algoritmo. No solo eso, QFT también dio lugar a algoritmos clave en la computación como el algoritmo de Shor o el de Grover.

En primer lugar, veamos qué es la transformada de Fourier discreta (DFT).

DFT actúa en sobre un vector $(x_0 \dots x_{N-1})$ llevándolo a otro vector $(y_0 \dots y_{N-1})$ de acuerdo con la fórmula

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \omega_N^{jk} \quad (4.17)$$

donde

$$\omega_N^{jk} = e^{2\pi i \frac{jk}{N}} \quad (4.18)$$

De manera análoga, definimos QFT como la aplicación que mapea un estado cuántico $|X\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle$ a un otro estado $|Y\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} x_k |k\rangle$, que se puede expresar como la aplicación

$$|j\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \quad (4.19)$$

O la matriz

$$U_{QFT} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \langle j| \quad (4.20)$$

QFT es un operador unitario que se usa para forzar interferencia entre qubits y puede ser representada por operadores unitarios básicos, es decir, puertas cuánticas. Para construir QFT sólo son necesarias dos puertas cuánticas [31]. En realidad, lo que hace la transformada de Fourier es un cambio de base. Para un único qubit, la QFT es la puerta H, que cambia de base de $|0\rangle$ y $|1\rangle$ a $|+\rangle$ y $|-\rangle$. Del mismo modo, la segunda puerta que necesitamos para representar QFT es la puerta de rotación controlada $^C R_k$, donde

$$R_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i / 2^k} \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

O lo que es lo mismo

$$CP(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

con $\theta = 2\pi / 2^k$.

En el libro [17] se puede ver que, para N qubits,

$$QFT_N |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2} x} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^2} x} |1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^n} x} |1\rangle) \quad (4.23)$$

Recorremos a continuación los pasos del algoritmo, comenzamos con un input $|\psi_0\rangle = |x_1 x_2 \dots x_n\rangle$ **Paso 1 :**

Aplicar la puerta de Hadamard al estado 1 obtenemos

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2} x_1} |1\rangle) \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (4.24)$$

Paso 2 : Aplicamos $UROT_2$ en el qubit 1 controlado por el qubit 2 y queda

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^2} x_2 + \frac{2\pi i}{2} x_1} |1\rangle) \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (4.25)$$

Paso 3 : Aplicamos $UROT_k$ con k desde 1 hasta n en el qubit q controlado por el qubit n. De esta manera el estado es

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^n} x_n + \dots + \frac{2\pi i}{2^2} x_2 + \frac{2\pi i}{2} x_1} |1\rangle) \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (4.26)$$

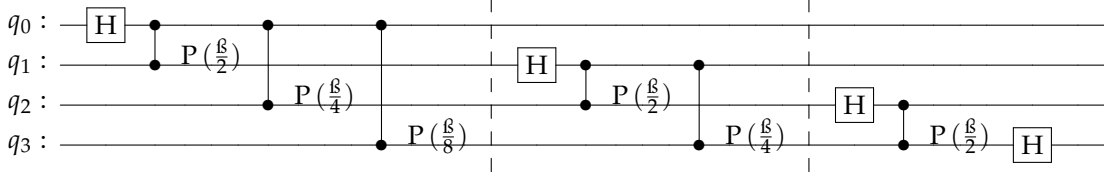
Que, como $x = 2^{n-1} x_1 + \dots + 2^0 x_n$, podemos reescribir como

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2} x} |1\rangle) \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (4.27)$$

Paso 4 Por último, aplicamos la secuencia anterior con qubit objetivo desde 2 hasta n, por lo que el estado final es

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^m}x}|1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^{m-1}}x}|1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2}x}|1\rangle) \quad (4.28)$$

Que es la misma ecuación que en 4.23, pero con el output al revés, por lo que habría que aplicar puertas *SWAP* para recuperar el orden original. Veamos el caso de QFT para un sistema de cuatro qubits, es decir encontrar el circuito $|y_4y_3y_2y_1\rangle = QFT_{16} |x_4x_3x_2x_1\rangle$



Este sería un ejemplo del circuito para cuatro qubits, en qiskit, para poder aplicarlo correctamente en qiskit habría que definirlo con los qubits exactamente al revés. Se puede encontrar una versión completa en el anexo.

4.4 Algoritmo de factorización de Shor

El algoritmo de Shor es famoso por factorizar enteros en tiempo polinómico. Dado que el algoritmo clásico más conocido requiere un tiempo superpolinomial para factorizar el producto de dos números primos, el criptosistema más utilizado, RSA, se basa en que la factorización es imposible para números enteros suficientemente grandes. Es por esto que, el algoritmo de Shor, que tiene complejidad $\mathcal{O}((\log n)^2 \log \log n)$ en un ordenador cuántico y luego debe realizar $\mathcal{O} \log n$ pasos de post procesamiento en un ordenador cuántico [32], de media este tiempo es polinómico, por lo que el descubrimiento de este algoritmo propulsó la mecánica cuántica enormemente, ya que llevaba mucho tiempo buscándose un algoritmo como este. En esta sección daremos un ligero vistazo de la parte cuántica del algoritmo de Shor, que realmente resuelve el problema de la búsqueda del periodo. Dado que un problema de factorización puede convertirse en un problema de búsqueda de periodo en tiempo polinómico, un algoritmo eficiente de búsqueda de periodo puede utilizarse también para factorizar enteros de forma eficiente. Por ahora basta con demostrar que si podemos calcular el periodo de $a^x \bmod N$ eficientemente, entonces también podemos factorizar eficientemente. Dado que la búsqueda de periodos es un problema importante por sí mismo, primero lo resolveremos y luego discutiremos cómo se puede utilizar para factorizar.

Sea una función

$$f(x) = a^x \bmod N \quad (4.29)$$

El periodo es el menor entero no nulo que verifica que

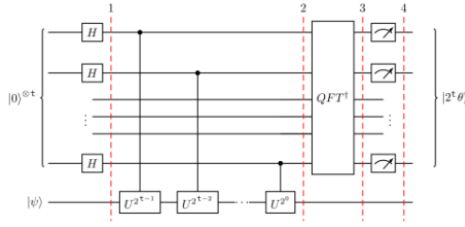
$$a^r \bmod N = 1 \quad (4.30)$$

La solución a este problema pasó por utilizar quantum phase estimation en el operador $U|y\rangle = |ay \bmod N\rangle$. Vamos a echar un vistazo rápido para entender en que consiste el quantum phase estimation [5].

4.4.1 Quantum Phase Estimation

Quantum Phase Estimation es uno de los subprogramas más importantes en computación cuántica, realiza una tarea central, que es la de buscar autovalores, y sirve como bloque central para la construcción de algoritmos muy importantes tales como el de Shor [33].

Dado un operador unitario U , el algoritmo estima θ en la ecuación $U|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta}|\psi\rangle$. Aquí $|\psi\rangle$ es un autovector y $e^{2\pi i\theta}$ es su autovalor correspondiente. No vamos a entrar en detalle sobre el algoritmo, pero para visualizar el esquema del circuito, a modo de curiosidad, utilizamos la representación a partir de [34] para quantum phase estimation



4.4.2 Solución al problema de Shor

Como comentábamos, buscamos encontrar la solución de $U|y\rangle = |ay \bmod N\rangle$. Un autovector del operador U sería la superposición de los estados que compongan el periodo r , es decir, si

$$|u_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} |a^k \bmod N\rangle \quad (4.31)$$

Entonces $U|u_0\rangle = |u_0\rangle$ luego $|u_0\rangle$ es un autovector de autovalor 1. Para generalizar este concepto, tenemos los siguientes autovectores, que dan lugar a un autovalor distinto de 1.

$$|u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} e^{-\frac{2\pi i s k}{r}} |a^k \bmod N\rangle \quad (4.32)$$

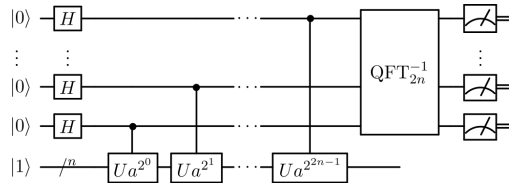
Por lo tanto, usando álgebra básica

$$U|u_s\rangle = e^{\frac{2\pi i s}{r}} |u_s\rangle \quad (4.33)$$

De esta manera tenemos un autovalor para cada $0 \leq s \leq r-1$, de manera muy conveniente, al sumar todos los autovectores tenemos

$$\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u_s\rangle = 1 \quad (4.34)$$

Por lo tanto, al ser $|1\rangle$ una superposición de estos estados, al aplicar Quantum Phase Estimation obtendremos cierta fase $\phi = \frac{s}{r}$ donde s es un entero arbitrario entre 0 y $r-1$. A partir de aquí, usamos el algoritmo de fracciones continuas [35] en ϕ para encontrar r . El diagrama del circuito, extraído de [?] queda de la siguiente manera

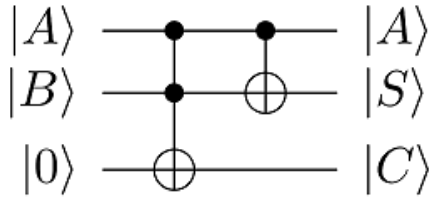


Aún hay muchos más algoritmos importantes a parte de los mencionados, algunos como el algoritmo de Grover que resultaron ser aportaciones fundamentales, sin embargo, no es el objetivo de este trabajo la introducción a los algoritmos cuánticos sino el aprendizaje del manejo de la computación cuántica y en particular de Qiskit, por lo que no se profundizará en más algoritmos cuánticos más allá del siguiente sobre la suma modular.

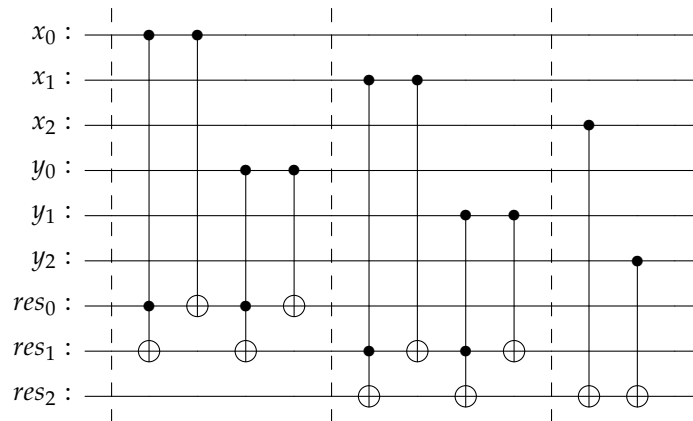
4.5 Algoritmo para sumar bits

El artículo que dió lugar a este TFG [12], está basado en metamorphic testing para un algoritmo cuántico que implementa la suma modular, por lo que es necesario, al menos, mencionar dicho algoritmo y entenderlo, ya que luego será también mencionado en la sección 6.3.2.

Veamos, en primer lugar, como podemos construir un circuito que realice la suma modular de dos números de un sólo bit. Esto también es conocido como *Half-adder*. Toma las entradas A y B y devuelve la suma $S = A \oplus B$ y el resto $C = A \cdot B$ el circuito que corresponde a este algoritmo es



En este circuito, implementamos en primer lugar una puerta de Toffoli seguida de una puerta CNOT, y en la salida obtenemos $|A\rangle$, la suma de los bits y el resto. Basándonos en esta idea para un bit y siguiendo el trabajo realizado en el artículo [12], exponemos el circuito que calcula la suma modular de números de 3 bits.



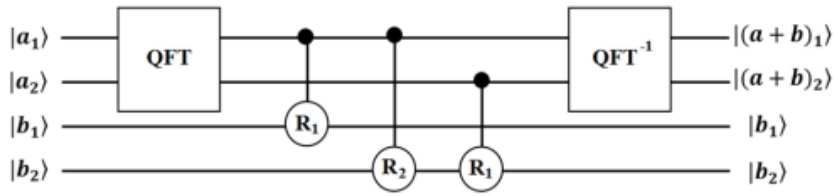
En este circuito, el resultado de la suma modular se encuentra almacenado en res_0 , res_1 y res_2 .

Es decir, sumamos $A = x_2x_1x_0$ y $B = y_2y_1y_0$ y el resultado lo obtenemos en $S = res_2res_1res_0$, no tenemos resto pues al ser suma modular no es relevante.

Como hemos mencionado, no se hará una explicación profunda de este circuito ya que se basa en el obtenido en [12] y la generalización proviene de prueba y error

Uno de los detalles es que la generalización para n bits es muy sencilla ya que basta replicar las puertas que encontramos entre las dos primeras barreras n-1 veces, aplicándolo a los bits correspondientes, y para la última aplicar tan sólo dos puertas cnot. Se puede encontrar esta generalización en el código anexo, justo debajo del caso de 3 bits. Ahí podemos encontrar la generalización para la suma modular de n bits, su simulación y código para sumar dos números arbitrarios.

Otro algoritmo muy interesante es el propuesto en [36], que no vamos a desarrollar en detalle, pero exponemos el circuito utilizado para ver que hay alternativas que utilizan de manera directa los algoritmos que hemos visto anteriormente, asimismo, se recomienda ojear el artículo citado ya que ahonda enormemente en la suma modular de bits desde una perspectiva mucho más formal:



Chapter 5

Introducción a metamorphic testing y mutantes

Software testing es un método para comprobar si el software real se ajusta a los requisitos esperados y para garantizar que el producto de software está libre de defectos. Implica la ejecución de componentes de software/sistema mediante herramientas manuales o automatizadas para evaluar una o varias propiedades de interés. El objetivo del software testing es identificar errores, lagunas o falta de requisitos en contraste con los requisitos reales. Consiste un enfoque generalizado para el aseguramiento y la verificación de la calidad del software. Un elemento clave del testing es que permite encontrar errores pero no demostrar la ausencia de ellos.

5.1 Software testing

Las pruebas de software son un enfoque principal para el aseguramiento y la verificación de la calidad del software. Sin embargo, se enfrenta a dos problemas fundamentales: el problema del oráculo y el del conjunto de pruebas fiable [11].

Aunque el software testing puede determinar la corrección del software bajo la suposición de algunas hipótesis específicas (véase la jerarquía de la dificultad de las pruebas más adelante), las pruebas no pueden identificar todos los fallos del software [37], sino que proporcionan una crítica o comparación que compara el estado y el comportamiento del producto con los oráculos de las pruebas, es decir, los principios o mecanismos por los que alguien podría reconocer un problema. Estos oráculos pueden incluir (pero no se limitan a) especificaciones, contratos, productos comparables, versiones anteriores del mismo producto, inferencias sobre el propósito previsto o esperado, expectativas de los usuarios o clientes, normas pertinentes, leyes aplicables u otros criterios.

Uno de los principales objetivos de las pruebas es detectar los fallos del software para poder descubrir y corregir los defectos. Las pruebas no pueden establecer que un producto funciona correctamente en todas las condiciones, sólo si no funciona correctamente en condiciones específicas [4]. El alcance de las pruebas de software puede incluir el examen del código, así como la ejecución de ese código en varios entornos y condiciones, así como el examen de los aspectos del código: si hace lo que se supone que debe hacer y si hace lo que necesita hacer. En la cultura actual de desarrollo de software, una organización de pruebas puede estar separada del equipo de desarrollo. Los miembros del equipo de pruebas desempeñan diversas funciones.

La información derivada de las pruebas de software puede utilizarse para corregir el proceso de desarrollo de software [38]. Los fallos del software se producen a través del siguiente proceso: Un programador comete un error (mistake), que da lugar a un fallo (defect, bug) en el código fuente del software. Si este fallo se ejecuta, en determinadas situaciones el sistema producirá resultados erróneos, provocando un fallo

(failure).

5.2 Mutation testing

La prueba de mutación es un tipo de prueba de software en la que se cambian/mutan ciertas declaraciones del código fuente para comprobar si los casos de prueba son capaces de encontrar errores en el código fuente. El objetivo de las pruebas de mutación es garantizar la calidad de los casos de prueba en términos de robustez que debe fallar el código fuente mutado.

Los cambios realizados en el programa mutante deben ser extremadamente pequeños para que no afecten al objetivo general del programa. Mutation testing también se denomina estrategia de prueba basada en fallos, ya que implica la creación de un fallo en el programa y es un tipo de white-box testing [39] que se utiliza principalmente para las Unit Testing [40].

Cada versión mutada se llama mutante y las pruebas detectan y rechazan los mutantes haciendo que el comportamiento de la versión original difiera del mutante. Esto se llama matar al mutante. Los conjuntos de pruebas se miden por el porcentaje de mutantes que matan. Se pueden diseñar nuevas pruebas para eliminar otros mutantes. Los mutantes se basan en operadores de mutación bien definidos que imitan errores típicos de programación (como el uso de un operador o un nombre de variable incorrecto) o fuerzan la creación de pruebas relevantes (como la división de cada expresión por cero).

La mutación se propuso originalmente en 1971, pero perdió fervor debido a los altos costes que implicaba. Ahora, de nuevo, ha cobrado fuerza y se utiliza ampliamente en lenguajes como Java y lenguajes no procedurales como XML. Se puede aplicar códigos fuente en general para, por ejemplo, detectar fallos en la definición de esquemas.

A continuación describimos el proceso para llevar a cabo mutation testing [41]:

Paso 1: Los fallos se introducen en el código fuente del programa creando muchas versiones llamadas mutantes. Cada mutante debe contener un único fallo, y el objetivo es hacer que la versión mutante falle, lo que demuestra la eficacia de los casos de prueba.

Paso 2: Los casos de prueba se aplican al programa original y también al programa mutante. Los casos de prueba deben ser adecuados y se ajustan para detectar fallos en el programa.

Paso 3: Se comparan los resultados del programa original y del mutante.

Paso 4: Si el programa original y el mutante generan una salida diferente, entonces el mutante es eliminado por el caso de prueba. Por lo tanto, el caso de prueba es lo suficientemente bueno para detectar el cambio entre el programa original y el mutante.

Paso 5: Si el programa original y el programa mutante generan la misma salida, el mutante se mantiene vivo. En estos casos, es necesario crear casos de prueba más eficaces que maten a todos los mutantes.

Para ver un ejemplo de mutation testing muy simple, consideremos el siguiente código en python.

```
1 def program(x):
2     if x<1:
3         print('true')
4     else:
5         print('false')
```


Si a este programa le aplicamos un *operador de mutación*, que es lo que pretendemos estudiar en este trabajo, nos devolverá el mutante, que es el programa modificado. Si por ejemplo aplicamos un operador de mutación que cambie "<" por ">", tendríamos el siguiente mutante:

```
1 def program(x):
2     if x>1:
3         print('true')
4     else:
5         print('false')
```

5.2.1 Metamorphic testing

Como ya se ha comentado anteriormente, este trabajo surge a raíz del artículo [12], en el que el objetivo fundamental son las pruebas usando metamorphic testing para computación cuántica. Metamorphic testing es un método de testing basado en propiedades que consiste en un enfoque tanto para la generación de casos de prueba como para la verificación de los resultados de las pruebas. Un elemento central es un conjunto de relaciones metamórficas, que son propiedades necesarias de la función o el algoritmo objetivo en relación con múltiples entradas y sus salidas esperadas. Desde su primera publicación, hemos asistido a un rápido aumento de trabajos y estudios que examinan las pruebas metamórficas desde varias perspectivas, como la de relación metamórfica, la generación de casos de prueba, la integración con otras técnicas de ingeniería del software y la validación y evaluación de los sistemas de software [42]. Veamos dos ejemplos de esto. El primero es el ejemplo clásico, supongamos que tenemos un programa con una implementación que calcula el seno de x hasta 100 cifras significativas, una relación metamórfica del seno es $\sin(\pi - x) = \sin(x)$. De esta manera, aunque no sepamos si el programa calcula bien un caso de prueba como $x_1 = 1$, sí podemos contrastarlo con el resultado de $x_2 = \pi - 1$. Cualquier inconsistencia, teniendo en consideración los distintos errores de redondeo del propio ordenador, indica un fallo (failure) del programa, causado por una falta (fault) de la implementación. [43].

Otro ejemplo que es verdaderamente interesante extraído de [44] y muestra lo que es el metamorphic testing de una manera muy cotidiana es el siguiente:

Supongamos que queremos ayudar a nuestro hijo con los deberes. Le preguntamos cuántos ejercicios tiene que hacer en total y nos dice que 2. Como no estamos seguros de si la respuesta es cierta, pasado un rato le preguntamos cuántos ejercicios de matemáticas tiene que hacer y nos dice que son cuatro. Nuestra regla metamórfica es que los ejercicios de matemáticas tienen que ser menos que el total de ejercicios de todas las asignaturas. Por lo tanto, nuestro test metamórfico nos ha servido para detectar que nuestro hijo es un poco *olvidadizo*. Notese que no hemos tenido que comprobar que ninguna de las respuestas era correcta y, aún más importante, el chico se ha expuesto sólo.

5.3 Quantum Testing

La computación cuántica es una disciplina que está aún por desarrollar y es muy joven aún, por lo que más aún lo es el Quantum Testing. Sin embargo, se han realizado algunos intentos para comenzar a definir procesos de ingeniería de software aplicados a las computación cuántica [12][45]. La motivación para su desarrollo es bastante alta. Esto es debido a que durante la computación no podemos saber el estado de un circuito y sólo podemos saberlo realizando una medición, lo cual colapsa el estado como ya hemos visto. Por ello, el debugging interactivo no es algo posible, es decir, cuándo programamos un programa clásico usualmente el programador realiza el proceso de debugging interactuando directamente con los algoritmos y con las distintas etapas comprobando que funcionan como se espera. Sin embargo, en computación cuántica esto no funciona así, en secciones anteriores hemos visto ejemplos de simulación cuántica donde podíamos simular un circuito y con qiskit calculábamos el vector de estado, pero cuando el tamaño de los circuitos comienza a ser mayor, el coste computacional es desproporcionado. Es por eso que las técnicas de testing que hemos descrito anteriormente pueden resultar particularmente efectivas para quantum testing, de hecho, utilizando algoritmos como el algoritmo de búsqueda de Grover para buscar en conjuntos no estructurados, requiriendo menor potencia computacional que el algoritmo clásica como ya hemos visto [12].

Chapter 6

Operadores de mutación cuántica en Qiskit

Llegados a este punto, a lo largo del trabajo nos hemos familiarizado con la computación cuántica, hemos hecho un viaje desde la base matemática y los postulados hasta conocer el concepto de bit, tener varios bits en circuitos y hacer algoritmos cuánticos y entenderlos. En paralelo, hemos conocido una introducción de lo que es el software testing fijándonos particularmente en metamorphic y mutant testing. Ya sabemos entender el título del trabajo. Sabemos lo que son los operadores de mutación, ahora queremos aplicarlo en computación cuántica y en particular en el lenguaje Qiskit.

6.1 Qiskit

Qiskit es un software development toolkit (SDK) de código abierto para trabajar con ordenadores cuánticos a nivel de pulsos, circuitos y módulos de aplicación. Qiskit fue fundado por IBM Research para permitir el desarrollo de software para su servicio de computación cuántica en la nube, IBM Quantum Experience[46]. Se compone de elementos que trabajan juntos para hacer posible la computación cuántica. El objetivo central de Qiskit permite a los usuarios diseñar experimentos y aplicaciones y ejecutarlos en ordenadores cuánticos reales y/o simuladores clásicos. Ofrece la posibilidad de desarrollar software cuántico tanto a nivel de código máquina de OpenQASM, como a niveles abstractos adecuados para usuarios sin experiencia en computación cuántica. Esta funcionalidad es proporcionada por distintos componentes que se pueden ver en [47]. Se puede observar sus principales diferencias y el contraste con otros lenguajes desarrollados en el artículo [48].

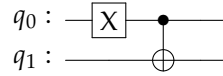
A lo largo de este trabajo se ha tratado de dar una introducción a qiskit con la creación de los circuitos y el desarrollo de algoritmos en Qiskit por lo que se recomienda enormemente seguir el Jupyter Notebook de este trabajo y probar con los diferentes comandos expuestos para aprender. Si se quiere profundizar más, no hay mejor sitio que [49]

6.2 Operadores de mutación cuánticos

Ahora que sabemos lo que son los operadores de mutación y hemos visto ejemplos en computación clásica, vamos a extender el concepto a la computación cuántica. Vamos a hacer un ejemplo que sea más o menos análogo al de la sección 5.2 pero para un circuito cuántico. Consideremos un ejemplo sencillo de circuito cuántico:

```
1 qc = QuantumCircuit(2)
2 qc.x(0)
3 qc.cx(0,1)
```

Que genera el circuito:



Como los bits siempre se inician en $|0\rangle$, el circuito nos devolverá siempre el estado $|11\rangle$. Ahora, podríamos desarrollar a mano mutantes del circuito, por ejemplo, dos mutantes serían:



En ambos circuitos, se ha sustituido una puerta por otra, en el primer mutante, se ha aplicado un operador de mutación que sustituye la puerta h por una puerta x , y en el segundo, el operador de mutación cambia una puerta CNOT por una puerta swap.

El objetivo de este trabajo se sitúa en encontrar una manera sistemática de crear mutantes, es decir, crear funciones que hagan la función de un operador de mutación, las cuales nos permitan generar un mutante a partir de un circuito.

6.2.1 Qué cambia en un programa cuántico

Ahora, el lector se puede preguntar qué es lo susceptible de ser mutado en un programa cuántico. Los operadores de mutación que vamos a crear se basarán en el intercambio de puertas, habrá varios tipos de operadores dependiendo de si queremos permitir que la puerta que cambiamos afecte a un distinto número de qubits, que sea paramétrica, por ejemplo.

Para ello, en primer lugar, tenemos que saber cuáles son todas las puertas que hay en Qiskit y como se representan internamente por Qiskit. Las puertas son infinitas ya que dado cualquier circuito, podemos convertirlo en una puerta en Qiskit a través de la función `circuit_to_gatecircuit(parameter_map=None, equivalence_library=None, label=None)` [50]. De primeras, una vez que tenemos un circuito creado, sustituir una puerta por otra es una tarea complicada en qiskit. Tras prueba y error así como investigación en la documentación de qiskit, se encuentra que la manera de modificar la información esencial de un circuito es a través del atributo `QuantumCircuit.data` [51]. Esta lista contiene tuplas con la información de cada una de las puertas, clásicas o cuánticas. Trabajaremos con las puertas como instrucciones.

6.2.2 Desarrollo e implementación del código

Uno de los enfoques del mutant testing en computación clásica es modificar el código fuente como tal, sin embargo, parece más lógico que cuando lo que queremos es realizar testing cuántico nuestro objetivo sea el de modificar los circuitos directamente. También se podría pensar en modificar el código fuente de los programas para tratar de generar circuitos distintos, sin embargo, parece más sencillo y elegante que los operadores de mutación sean funciones que tomen un circuito como entrada y devuelvan un mutante de dicho circuito.

Para ponernos en situación, todos nuestros circuitos en Qiskit son elementos de la clase `QuantumCircuit` [52]. Toda la información del circuito está contenida en una lista en la que se almacenan las instrucciones. Esta clase tiene un atributo que es `QuantumCircuit.data` como ya hemos mencionado. Dado que nuestro objetivo consiste en modificar las puertas del circuito, este atributo resulta muy conveniente ya que almacena la información de todas las puertas que tiene el circuito en una lista, ya sean clásicas o no. La lista está compuesta por tuplas de la forma `(instruction, qargs, cargs)`. En cada tupla, `instruction` se refiere a un elemento de la clase `Instruction`, es decir, todos los diversos operadores que podemos aplicar al circuito y por tanto lo que queremos modificar en los circuitos para generar mutantes. Por otro lado, `qargs` es una lista con los qubits, como objetos de la clase `Qubit`, a los que afecta el operador en un orden

determinado. Y, por último, `cargs` es una lista que contiene objetos de la clase `Clbit`, es decir, los bits clásicos a los que afecta el operador.

Es claro entonces que esta lista es absolutamente clave para el desarrollo de los operadores de mutación para circuitos cuánticos, ya que a través de la modificación de esta lista podemos generar mutantes de manera muy sencilla. De hecho, el código, y por tanto los operadores, están basados en tres funciones básicas que consisten en la modificación de los distintos elementos de la tupla para modificar cada puerta.

replace: `qn` primer lugar, consideramos la función `replace(circ, origin: Instruction, instruction: Instruction, pos=0)`, esta función recibe como entrada una instrucción y un circuito, busca la instrucción `origin` en el primer elemento de la tupla para cada elemento de la lista. Cuando encuentra la instrucción, si es la posición correcta, la sustituye por `instruction` y termina devolviendo `True`. Si no es esa la posición avanza una posición y sigue buscando, en caso de no encontrar la instrucción en la posición deseada devuelve `false`.

replace_target_qubit: en este caso, para una instrucción particular se busca modificar los qubits a los que afecta, por ello, se escoge uno de ellos y se sustituye por otro cualquiera en el circuito. Esto, por ejemplo, sirve para cambiar el qubit de control de una puerta CNOT. De nuevo, si especificamos la posición 1, por ejemplo, al encontrar la primera puerta CNOT no modificará sus qubits, ya que aún no hemos llegado a la posición 1. Cuando este parámetro es cero, se sustituye en la primera puerta que cumpla nuestros criterios. Si no, se sustituye en la $(n-1)$ -ésima que cumpla los criterios.

replace_target_clbit: esta funciona igual que la anterior pero modificando la lista de bits clásicos a los que afecta la puerta.

Como se puede observar, estas son las funciones que modifican de manera interna las instrucciones que tiene un circuito y son claves en el desarrollo de los operadores de mutación. En el código del módulo se puede encontrar también una versión para cada función expuesta en la que se modifican todas las puertas que sean iguales que la que buscamos modificar. Es decir, en las anteriores funciones, en el momento en el que encuentra la puerta objetivo, termina y devuelve `True`, sin embargo, en las funciones `replace_all` modifica todas las puertas que tengan como instrucción la instrucción objetivo.

Para los operadores, se ha determinado por defecto utilizar las funciones que sólo modifican una puerta en particular, ya que los mutantes suelen contener un solo fallo. En computación clásica, si en un programa cambiamos "`<`" por "`>`", lo hacemos solo en un "`<`" en particular, no en todos los que contenga el código, por lo tanto, se ha querido imitar con estos operadores introduciendo una sola modificación.

Una vez que se tienen estas funciones para modificar las instrucciones de los circuitos, el objetivo es desarrollar los operadores, para ello, se busca crear operadores que sean lo más cercanos a la simulación de errores a cometer por el programador, y se crean cuatro que están ampliamente descritos en la siguiente sección. Todos ellos cuentan con opciones para generar mutantes aleatorios, pero también se puede especificar qué mutante en particular se quiere utilizar.

6.2.3 Funciones para los operadores

El objetivo es crear un generador de mutantes, es decir, un operador de mutación que le demos un circuito y devuelva el mutante. Por ello, se ha creado el módulo `MutantOperators`. En este módulo, subido para descarga en <https://github.com/JaimeDelaVegaFornie/TFG-2022.git>. Para decidir qué funciones son convenientes, hay que tener en cuenta cuáles podrían ser los errores habituales y de esta manera generar los diversos mutantes.

Una de las principales tareas conseguidas a través del desarrollo de este trabajo es la de ganar un entendimiento suficiente como para considerar cuáles podrían ser los operadores de mutación principales, a través de las funciones descritas en la sección anterior, ya sabemos como modificar cualquier instrucción en un circuito. De esta manera, podemos completar nuestro módulo lo máximo posible sin dejarnos ninguno importante. Hay que recalcar que estos operadores son propuestas iniciales que tendrán que ser ampliadas según el uso que se quiera dar. Se han creado cuatro operadores fundamentales para la creación de distintos tipos de mutantes:

Operador 1:

```
1 gate_mutant(circ1, input_gate=None, output_gate=None)
```

Este operador tiene como función principal intercambiar puertas cuánticas. Por defecto y sin parámetros, escoge una puerta aleatoria y la cambia por otra que afecte a los mismos qubits que la anterior. También podemos dar como argumento la puerta que queremos que sea sustituida y la nueva puerta a poner en el mutante. Devuelve un mutante del circuito y no modifica el original. Un error frecuente puede ser aplicar una puerta que no es exactamente la que queremos, por ejemplo aplicar a un qubit la puerta X en lugar de la puerta H, este operador pretende simular este tipo de errores.

Operador 2:

```
1 targetqubit_mutant(circ1, gate=None, target_qubit=None, final_qubit=None)
```

Este operador tiene como función principal modificar los qubits a los que afecta una puerta multiqubit. Por defecto y sin parámetros, escoge una puerta aleatoria y modifica uno de los qubits a los que afecta cambiándolo por otro cualquiera del circuito. Si se le provee una puerta en específico, lo hará sobre esta puerta. También se puede pasar como parámetro el qubit a cambiar y el qubit donde deseamos que afecte el mutante. Es fácil equivocarse cuando tenemos una puerta que afecta a varios qubits, por ejemplo, en el algoritmo de la suma, si una de las puertas de Toffoli afecta a un qubit equivocado, esto modificaría el resultado por completo. Este tipo de errores del programador son los que pretende crear este operador

Operador 3:

```
1 targetclbit(circ1, gate=None, target_clbit=None, final_clbit=None)
```

El objetivo de este operador es muy similar al anterior, sin embargo, ahora afecta a qubits clásicos. Es fácil, por ejemplo al medir, llevar la medición al bit clásico equivocado y que el resultado no tenga sentido, este tipo de errores se generan con mutantes a través de este operador.

Operador 4:

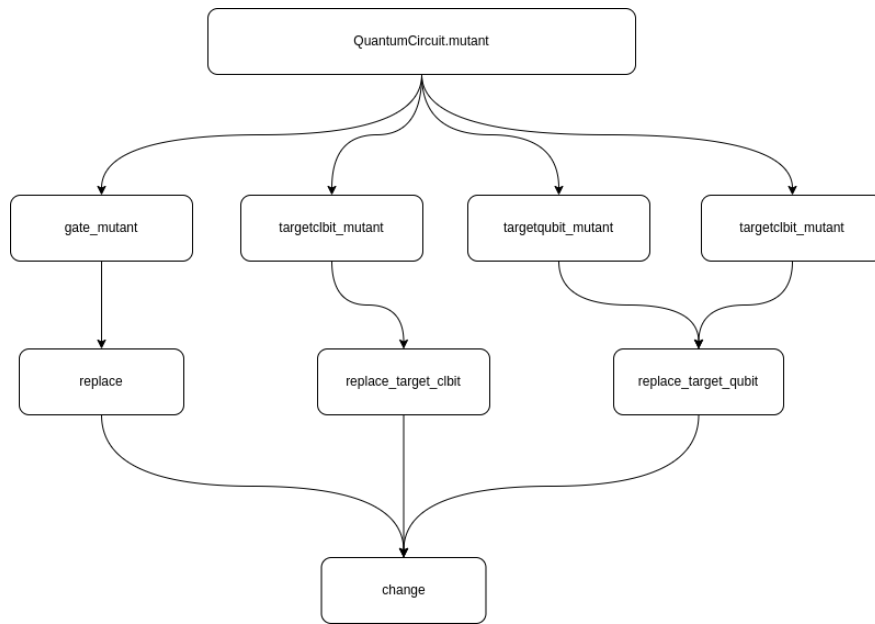
```
1 measure_mutant(circ1, target_qubit=None, final_qubit=None)
```

También es un error común medir el qubit equivocado, sobretodo en circuitos de muchos qubits, por ello, este operador genera un mutante del circuito original en el que una de las puertas de medición mide un qubit distinto que la puerta original. De igual forma, se puede especificar el target_qubit, lo que hará que se busque una puerta que mida este qubit, y también un final_qubit, que será el qubit que medirá la puerta nueva en el circuito mutante.

Con la creación de estos operadores se cumplen dos objetivos. A partir de cualquier circuito se pueden generar cuatro tipos de mutante de él. Este mutante puede ser aleatorio o, si tenemos alguna preferencia podemos mutar el circuito exactamente como necesitamos.

El código para este módulo se puede encontrar tanto en el anexo de Jupyter Notebook como en GitHub como módulo que se puede descargar e importar en Python.

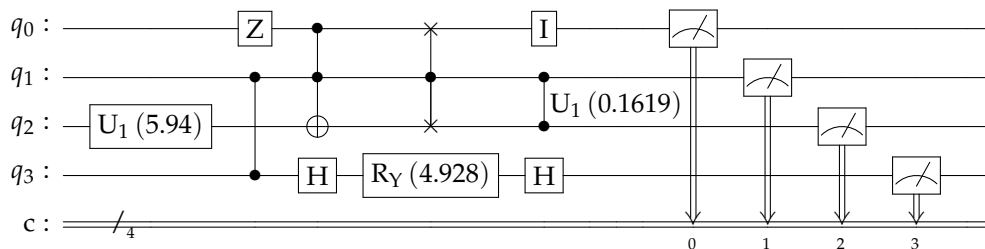
Las funciones del módulo están relacionadas de la siguiente manera según [6.1](#).



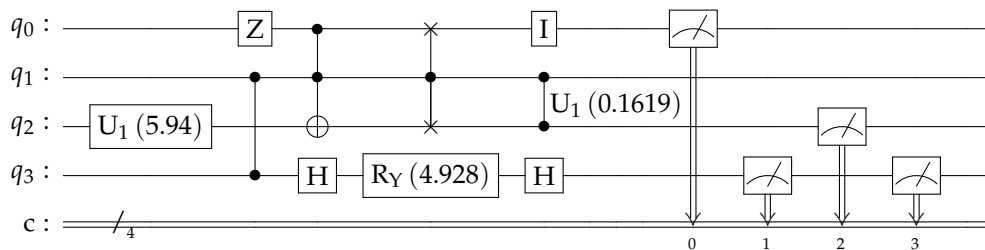
6.3 Aplicación del módulo

6.3.1 Ejemplo de uso de las funciones

Vamos a dar ejemplos de uso para crear un circuito aleatorio y vamos a generar diversos mutantes, usando `random_circuit` obtenemos



Hay muchos ejemplos de uso en el Jupyter Notebook, vamos a explicar dos casos sencillos un poco más ampliados. Imaginemos que queremos generar un mutante cualquier para nuestro circuito pero no sabemos cuál, nos vale cualquiera, en dicho caso, podemos llamar al método `mutant`, y obtenemos, por ejemplo, el siguiente circuito, en el que, como la función nos indica, se cambia el qubit al que afecta la medición.



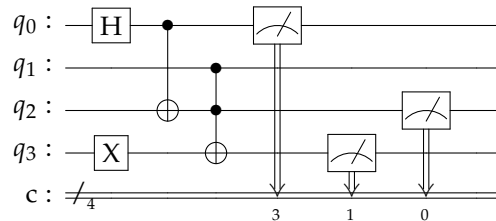
Esto se realiza con el siguiente código

```

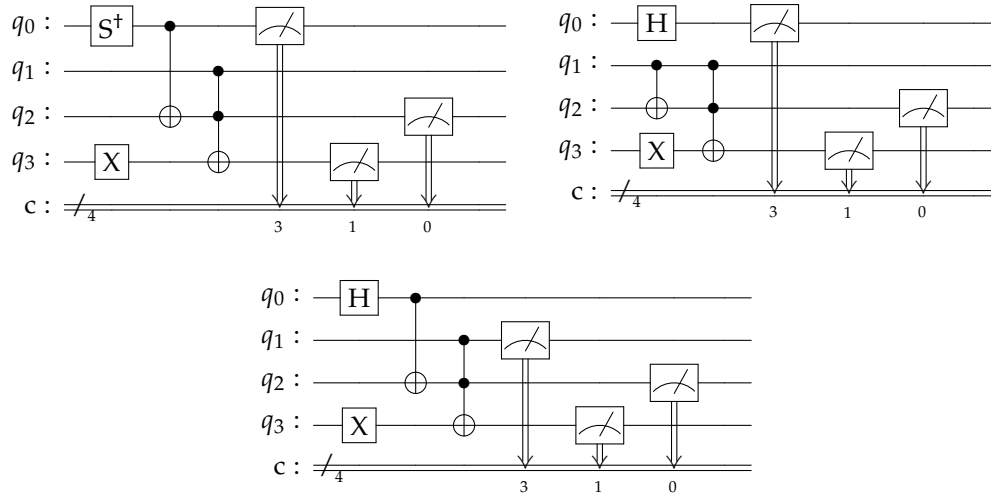
1 from qiskit.circuit.random import random_circuit
2
3 circ = random_circuit(4, 4, measure=True)
4 c1 = circ.mutant()
5 c1.draw(output='mpl')

```

Se puede observar que la creación de mutantes aleatorios es tremendamente sencilla. Imaginemos ahora que, dado otro circuito, por ejemplo



Para este circuito vamos a generar tres mutantes diferentes



El primer mutante se ha creado cambiando la puerta H por la puerta $Sdg = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$. En el segundo, se modifica el bit de control de la puerta CNOT y en el último se cambia la medición, en lugar de medir q_0 se mide q_1 . Todos estos mutantes se obtienen con las siguientes líneas de código.

```

1 #Creamos el circuito para mutarlo
2 qc = QuantumCircuit(4,4)
3 qc.h(0)
4 qc.x(3)
5 qc.cx(0,2)
6 qc.ccx(1,2,3)
7 qc.measure([0,3,2],[3,1,0])
8 #Ahora creamos tres mutantes del circuito
9 m1 = qc.gate_mutant(HGate(),SdgGate())
10 m2 = qc.targetqubit_mutant(CXGate(),qc.qubits[0],qc.qubits[1])
11 m3 = qc.measure_mutant(qc.qubits[0],qc.qubits[1])

```

Por lo tanto, es notable que se simplifica enormemente la creación de mutantes. Algo que remarcar es el hecho de que para seleccionar los qubits sobre los que pretendemos trabajar, lo mejor es tomarlos directamente de la lista que genera `qc.qubits`.

6.3.2 Generación aleatoria de mutantes para un circuito cualquiera

Vamos a ver un ejemplo práctico de uso, basándonos en los mutantes generados en [12]. Supongamos que queremos hacer uso de técnicas de testing, ya sea mutation testing o metamorphic testing sobre el circuito de la suma de 5 bits. Para ello, generamos una colección de 20 mutantes. El objetivo no es hacer un caso realista de mutation testing ni metamorphic testing si no dar una pequeña demostración del uso del software. Vamos a crear una lista con mutantes del circuito de la suma, el caso de test va a ser sólo uno que es calcular la suma modular de los números de 5 bits '10101' y '11100', aunque se puede encontrar la ejecución en el código anexo, se incluye aquí el código para mostrar una guía.

```
1 #Usamos la función circuito_suma para crear el circuito de la suma y generar los mutantes
2 n=5
3 qc = circuito_suma(n)
4 #Ahora creamos la lista de mutantes de circuito suma de manera aleatoria usando el módulo
   creado
5 m = 20
6 mutantes = [qc.mutant() for i in range(m)]
7 print('Mutantes generados')
8 # Ahora generamos un conjunto test
9
10
11 qc0 = suma_bits(5, '10101', '11100')
12 circuito_original = qc0.compose(qc)
13
14 def compilar(qc, verbose=False):
15     compiled_circuit = transpile(qc, simulator)
16     job = simulator.run(compiled_circuit)
17     result = job.result()
18     counts = result.get_counts(compiled_circuit)
19     if verbose:
20         print(qc.draw())
21         print('Resultado ', counts)
22     return counts
23
24 #Con esto, buscamos cuáles son los mutantes que dan un resultado distinto al de la suma con
   el circuito original y los matamos
25 resultado_original = compilar(circuito_original)
26
27 suma_mutantes = [qc0.compose(circuit) for circuit in mutantes]
28 print('Circuito de suma realizado para todos los mutantes')
29
30 resultado_mutantes = [compilar(circuit) for circuit in suma_mutantes]
31 print('Mutantes calculados')
32
33 comparacion_mutantes = [resultado_original==resultado for resultado in resultado_mutantes]
34 print(comparacion_mutantes)
35
36 mutantes_vivos = [mutantes[i] for i in range(len(mutantes)) if comparacion_mutantes[i]]
37
38 mutantes_matados = len(mutantes)-len(mutantes_vivos)
39 print('Mutantes matados: ', mutantes_matados, '/', m)
```

En el Jupyter Notebook adjunto se puede encontrar el resultado de la ejecución y también se puede realizar distintas pruebas. Para $n=5$ la cantidad de mutantes eliminados es bastante alta aunque el caso de test sea sólo uno. Esto nos puede indicar que los mutantes generados de manera aleatoria modifican en gran medida el circuito original. Después, debería ser realizado, o bien la aplicación de más casos de prueba sobre el conjunto de mutantes vivos, o bien otras técnicas para ver qué ha podido llevar a que la aplicación de un mutante devuelva el mismo resultado. Como ya hemos comentado, esto es un ejemplo de uso y no en sí de software testing. Con esta implementación se está simulando el circuito, por lo que no hay lugar a una medición no determinista, sin embargo. La propia medición real sería no determinista y de esta manera la muerte del mutante debería ser determinada a través de los métodos estadísticos que sean oportunos en cada caso.

Chapter 7

Conclusión

El foco principal del trabajo era el entendimiento profundo de la computación cuántica con sus algoritmos, circuitos y puertas para poder desarrollar en el lenguaje qiskit operadores de mutación de manera análoga a los que existen en computación clásica. Este trabajo surge desde una necesidad investigadora real, como ya hemos mencionado antes, en el paper [12] encontramos generación de mutantes de manera manual para realizar metamorphic testing. Dada la proliferación de la computación cuántica, este trabajo busca de manera fundamental la creación de una librería para qiskit que pueda ser usada para crear mutantes en general de manera automática. Estos operadores permiten la creación de mutantes de cualquier circuito de manera sistemática, lo que constituye una herramienta para técnicas de validación y verificación con mutantes para computación cuántica.

7.1 Trabajo futuro

En primer lugar, algo que sería muy interesante es tratar de convertir el módulo que se ha creado en una librería estandar de qiskit que todo el mundo pueda descargar y usar.

Por otro lado, un investigador que trabaje en computación cuántica en un área de testing podría alegrarse enormemente al encontrar la manera aquí desarrollada de fabricar mutantes de una manera tan sencilla sin tener que hacerlos de uno en uno. Podría realizar los mutantes que necesite o incluso dejarlo en manos del azar con la herramienta de crear mutantes aleatorios.

Por esta parte, el proceso de creación de un mutante que corresponde a los propios entresijos de qiskit quedaría solucionada. Sin embargo, falta algo fundamental, ¿Cuáles son los mejores mutantes? ¿Qué mutante elijo para cada circuito? Aunque en la computación clásica lleva muchos años de desarrollo y tiene estudios fuertes, en la computación cuántica esto es un área completamente nueva y sin investigación aún. Al no tener aún respuesta a estas preguntas planteadas, se ha tratado de dar una herramienta que genere mutantes aleatorios en un intento de sustituir una, aún por desarrollar, que pudiera decidir cuáles son los mejores mutantes en cada caso.

Hay muchas líneas en las que desarrollar este trabajo futuro, ya que la computación cuántica, como hemos comentado, añade superposición, por lo que introducir mutantes puede dar lugar a resultados muy sorprendentes. Sin embargo, aunque uno se quede con muchas ganas de encontrar cuáles son los mejores mutantes, se trata de un trabajo verdaderamente costoso y que excede con creces los objetivos de este trabajo.

Bibliography

- [1] A. P. French and E. F. Taylor, *An introduction to quantum physics*. Routledge, 2018.
- [2] B. J. Copeland, "The church-turing thesis," 1997.
- [3] R. R. Schaller, "Moore's law: past, present and future," *IEEE spectrum*, vol. 34, no. 6, pp. 52–59, 1997.
- [4] N. Johansson and J.-Å. Larsson, "Efficient classical simulation of the deutsch–jozsa and simon's algorithms," *Quantum Information Processing*, vol. 16, no. 9, pp. 1–14, 2017.
- [5] P. W. Shor, "Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer," *SIAM review*, vol. 41, no. 2, pp. 303–332, 1999.
- [6] L. K. Grover, "A fast quantum mechanical algorithm for database search," in *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 212–219, 1996.
- [7] R. P. Feynman, "Simulating physics with computers," in *Feynman and computation*, pp. 133–153, CRC Press, 2018.
- [8] R. W. Madhumita Murgia, "Google claims to have reached quantum supremacy." https://scholar.google.com/scholar?hl=en&as_sdt=0%2C5&q=quantum+supremacy&btnG=, 2019.
- [9] G. Kalai, "The argument against quantum computers, the quantum laws of nature, and google's supremacy claims," *arXiv preprint arXiv:2008.05188*, 2020.
- [10] F. Gaitan, *Quantum error correction and fault tolerant quantum computing*. CRC Press, 2008.
- [11] T. Y. Chen, F.-C. Kuo, H. Liu, P.-L. Poon, D. Towey, T. Tse, and Z. Q. Zhou, "Metamorphic testing: A review of challenges and opportunities," *ACM Computing Surveys (CSUR)*, vol. 51, no. 1, pp. 1–27, 2018.
- [12] L. L. Rui Abreu, João Paulo Fernandes and G. Tavares, "Metamorphic testing of oracle quantum programs," *Proceedings of The 3rd International Workshop on Quantum Software Engineering (Q-SE 2022) ACM, New York, NY, USA, 8 pages*. <https://doi.org/XXXXXXX.XXXXXXX>, 2022.
- [13] K. Schacke, "On the kronecker product," *Master's thesis, University of Waterloo*, 2004.
- [14] P. R. Halmos, *Finite-dimensional vector spaces*. Courier Dover Publications, 2017.
- [15] V. Dorobantu, "The postulates of quantum mechanics," *arXiv preprint physics/0602145*, 2006.
- [16] R. Feynman, "Feynman lectures on physics. vol. 3. quantum mechanics. le cours de physique de feynman. vol. 3. mecanique quantique," 1979.
- [17] M. A. Nielsen and I. Chuang, "Quantum computation and quantum information," 2002.
- [18] N. S. Yanofsky and M. A. Mannucci, *Quantum computing for computer scientists*. Cambridge University Press, 2008.
- [19] D. Yang, "A simple proof of monogamy of entanglement," *Physics Letters A*, vol. 360, pp. 249–250, dec 2006.

- [20] E. Bormashenko, "Generalization of the landauer principle for computing devices based on many-valued logic," *Entropy*, vol. 21, no. 12, p. 1150, 2019.
- [21] A. Galindo and M. A. Martin-Delgado, "Information and computation: Classical and quantum aspects," *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, no. 2, p. 347, 2002.
- [22] M. M. Mano, C. R. Kime, and T. Martin, "Logic and computer design fundamentals," 2000.
- [23] W. K. Wootters and W. H. Zurek, "The no-cloning theorem," *Physics Today*, vol. 62, no. 2, pp. 76–77, 2009.
- [24] N. Gisin and H. Bechmann-Pasquinucci, "Bell inequality, bell states and maximally entangled states for n qubits," *Physics Letters A*, vol. 246, no. 1-2, pp. 1–6, 1998.
- [25] S. Pirandola, J. Eisert, C. Weedbrook, A. Furusawa, and S. L. Braunstein, "Advances in quantum teleportation," *Nature photonics*, vol. 9, no. 10, pp. 641–652, 2015.
- [26] I. I. Manin, *Vychislimoe i nevychislimoe*. Sov. radio,, 1980.
- [27] K. L. Brown, W. J. Munro, and V. M. Kendon, "Using quantum computers for quantum simulation," *Entropy*, vol. 12, no. 11, pp. 2268–2307, 2010.
- [28] D. David and J. Richard, "Rapid solution of problems by quantum computation," 1992.
- [29] Z. Li, J. Dai, S. Pan, W. Zhang, and J. Hu, "Synthesis of deutsch-jozsa circuits and verification by ibm q," *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 59, no. 6, pp. 1668–1678, 2020.
- [30] D. Camps, R. Van Beeumen, and C. Yang, "Quantum fourier transform revisited," *Numerical Linear Algebra with Applications*, vol. 28, no. 1, p. e2331, 2021.
- [31] I. G. Karafyllidis, "Visualization of the quantum fourier transform using a quantum computer simulator," *Quantum Information Processing*, vol. 2, no. 4, pp. 271–288, 2003.
- [32] M. Hayward, "Quantum computing and shor's algorithm," *Sydney: Macquarie University Mathematics Department*, 2008.
- [33] C.-F. Chiang, "Quantum phase estimation with an arbitrary number of qubits," *International Journal of Quantum Information*, vol. 11, no. 01, p. 1350008, 2013.
- [34] Q. D. Team, "Quantum phase estimation." <https://qiskit.org/textbook/ch-algorithms/quantum-phase-estimation.html>, 2019.
- [35] "Continued fraction. encyclopedia of mathematics.." http://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Continued_fraction&oldid=30344, 2019.
- [36] A. Cherkas and S. Chivilikhin, "QUANTUM ADDER OF CLASSICAL NUMBERS," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 735, p. 012083, aug 2016.
- [37] H. A. B. Ateya and S. M. Baneamoon, "Software bug prediction using static analysis with abstract syntax trees," *International Journal of Engineering and Artificial Intelligence*, vol. 1, no. 4, pp. 57–64, 2020.
- [38] D. Huizinga and A. Kolawa, *Automated defect prevention: best practices in software management*. John Wiley & Sons, 2007.
- [39] T. Ostrand, "White-box testing," *Encyclopedia of Software Engineering*, 2002.
- [40] D. Huizinga and A. Kolawa, *Automated defect prevention: best practices in software management*. John Wiley & Sons, 2007.
- [41] A. J. Offutt and R. H. Untch, "Mutation 2000: Uniting the orthogonal," *Mutation testing for the new century*, pp. 34–44, 2001.
- [42] T. Chen, S. Cheung, and S. Yiu, "Metamorphic testing: a new approach for generating next test cases. technical report hkust-cs98-01," *Hong Kong Univ. of Science and Technology*, 1998.

- [43] "Ieee standard glossary of software engineering terminology," *IEEE Std 610.12-1990*, pp. 1–84, 1990.
- [44] S. Segura, D. Towey, Z. Q. Zhou, and T. Chen, "Metamorphic testing: Testing the untestable," *IEEE Software*, vol. PP, pp. 1–1, 12 2018.
- [45] D. Gachechiladze, F. Lanubile, N. Novielli, and A. Serebrenik, "Anger and its direction in collaborative software development," in *2017 IEEE/ACM 39th International Conference on Software Engineering: New Ideas and Emerging Technologies Results Track (ICSE-NIER)*, pp. 11–14, IEEE, 2017.
- [46] A. Cross, "The ibm q experience and qiskit open-source quantum computing software," in *APS March meeting abstracts*, vol. 2018, pp. L58–003, 2018.
- [47]
- [48] G. Carrascal, A. A. Del Barrio, and G. Botella, "First experiences of teaching quantum computing," *The Journal of Supercomputing*, vol. 77, no. 3, pp. 2770–2799, 2021.
- [49] Q. D. Team, "Introduction to qiskit." https://qiskit.org/documentation/intro_tutorial1.html, 2021.
- [50] Q. D. Team, "Circuit to gate." https://qiskit.org/documentation/stubs/qiskit.converters.circuit_to_gate.html, 2021.
- [51] Q. D. Team, "Quantumcircuit.data." <https://qiskit.org/documentation/stable/0.19/stubs/qiskit.circuit.QuantumCircuit.data.html>, 2021.
- [52] Q. D. Team, "Quantum circuit class." <https://qiskit.org/documentation/stubs/qiskit.circuit.QuantumCircuit.html>, 2019.