

Computación cuántica y las desigualdades de Bell

Protocolo de Tesis de Maestría en Física

Lic. Julio A. Medina¹

¹ Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de San Carlos de Guatemala
Ciudad Universitaria Z. 12, Guatemala
julioantonio.medina@gmail.com

1. Introducción

Varias aplicaciones de la mecánica cuántica han tenido gran relevancia en el desarrollo científico y tecnológico de la sociedad moderna. La computación cuántica es una de esas aplicaciones con un gran potencial en diversos tipos de problemas que van desde la misma simulación de sistemas intrínsecamente cuánticos hasta simulaciones financieras y la resolución de problemas de optimización complejos.

Los sistemas cuánticos proveen un paradigma de cómputo totalmente disruptivo en comparación a la computación clásica. Esto es posible gracias a dos propiedades fundamentales de los sistemas cuánticos, i.e. la superposición de estados y el *entrelazamiento de estados*. La unidad fundamental de la computación cuántica es el *qubit* que gracias a la superposición de estados y al entrelazamiento cuántico puede configurarse en sistemas de qubits entrelazados para que realicen operaciones en varios estados simultáneamente o en paralelo dando una ventaja o supremacía sobre la computación clásica. Un ejemplo bien conocido es el algoritmo de factorización de Shor[12] que se utiliza para hallar los factores de un número con ventajas comprobadas sobre la computación clásica.

2. Justificación

La motivación inicial para el desarrollo de dispositivos capaces de simular sistemas cuánticos viene de un artículo seminal de R. Feynman [5], en donde expone cómo inevitablemente se tienen que recurrir a sistemas de naturaleza cuántica para poder hacer simulaciones de sistemas cuánticos ya que conforme aumenta el número de partículas en dichos sistemas la complejidad algorítmica crece exponencialmente, algo que hace el estudio pragmático de estos sistemas sea un gran reto tecnológico para sistemas clásicos, sobretodo cuando se trata de problemas de varios cuerpos.

En esta investigación se quiere tener un entendimiento fundamental de los conceptos teóricos de la computación cuántica, además de complementarlo con aplicaciones de software específicamente utilizando las herramientas programáticas creadas por *IBM*, *Qiskit*. Con esto se quiere realizar una simulación en una

computadora cuántica real para revisar un resultado famoso que sirve para confirmar las desigualdades de Bell, i.e. las desigualdades CHSH llamadas así en honor a Clauser, Horne, Shimony y Holt [3].

También se investigarán temas relacionados como el *Quantum Machine Learning*, esto para poder entender cómo los ordenadores cuánticos pueden potenciar los ya exitosos sistemas de Inteligencia Artificial. Tener un entendimiento fundamental de estas tecnologías es necesario para poder a empezar a buscar aplicaciones que puedan impulsar el desarrollo tecnológico y científico.

3. Objetivos

3.1. General

Entender el estado actual de la computación cuántica para evaluar su estudio posterior o temas relacionados como el Aprendizaje Autónomo Cuántico (*Quantum Machine Learning*) a nivel de doctorado.

3.2. Específicos

1. Comprender los principios básicos de la computación cuántica a través de una revisión detallada de mecánica cuántica avanzada.
2. Derivar las desigualdades de Bell para entender su significancia.
3. Familiarizarse con las herramientas teóricas para el estudio de computación cuántica.
4. Entender las implementaciones básicas de los algoritmos cuánticos existentes, tales como el Algoritmo de Shor, el Algoritmo de Deutsch-Jozza entre otros.
5. Traducir los algoritmos cuánticos de su formulación matemática a una implementación en `Python` utilizando *Qiskit*.
6. Analizar la relación entre las desigualdades de Bell y las desigualdades CHSH.
7. Utilizar un ordenador cuántico real para comprobar las desigualdades CHSH y de esa manera comprobar experimentalmente el teorema de Bell.

4. Marco Teórico

El marco teórico se basa en los fundamentos de mecánica cuántica necesarios para poder entender los desarrollos teóricos en computación cuántica y también para el estudio detallado del teorema de Bell[2]. También se indagará en los conceptos de *Quantum Machine Learning*, algunos de estos tópicos fueron estudiados en los cursos de seminarios 1,2 y 3. Algunos temas importantes se incluyen en este protocolo:

4.1. Notación de Dirac

Se utilizan para describir estados cuánticos. Son vectores en el espacio de Hilbert, pueden ser vectores con dimensiones finitas o describir cantidades continuas y ser vectores de dimensión infinita. El físico inglés Paul Dirac popularizó la llamada notación de Dirac para hacer los cálculos en mecánica cuántica mas compactos. Se define al ket como

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

donde $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$. Y el bra se define como el vector fila, o vector en el espacio dual del ket definido como

$$\langle a| = (a_1^* \quad a_2^*), \quad (2)$$

donde $a_1^*, a_2^* \in \mathbb{C}$ son los complejos conjugados de a_1, a_2 , donde $a_1 = x + iy$ y $a_1^* = x - iy$ es el complejo conjugado. Los bra y los ket están relacionados de la siguiente manera

$$\langle a| = |a\rangle^\dagger, \quad (3)$$

que equivale a

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}^\dagger = (a_1^* \quad a_2^*), \quad (4)$$

el operador \dagger da el transpuesto conjugado de un vector o matriz.

Se define al braket como el producto interno o producto escalar en el espacio de Hilbert.

$$\langle b|a\rangle = a_1 b_1^* + a_2 b_2^* = \langle a|b\rangle^* \in \mathbb{C}. \quad (5)$$

El ketbra o producto abierto se define como

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* \\ a_2 b_1^* & a_2 b_2^* \end{pmatrix}. \quad (6)$$

4.2. Representación de Qubit

La representación de un qubit viene dada naturalmente por los espinores utilizados para describir el experimento de Stern-Gerlach en el que se mide el espín de átomos de plata. Estos espinores se definen como

$$|0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

como el análogo cuántico del estado 0 para un bit clásico, y para el estado clásico 1 se usa

$$|1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

estos estados cuánticos son evidentemente ortonormales $\langle 0|1\rangle = 0$ y $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$. Se nota que estos dos estados forman una base. Todos los estados cuánticos están normalizados

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1, \quad (9)$$

por ejemplo $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$.

4.2.1. Matrices de Pauli

La matriz de Pauli x , σ_x esta definida como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \quad (10)$$

esta matriz sirve como el análogo cuántico de la compuerta NOT, para ver esto basta con operar con la representación de los qubits definida en 7 y 8:

$$\sigma_x|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle. \quad (11)$$

De igual manera usando la notación de Dirac se tiene que

$$\sigma_x|1\rangle = (|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)|1\rangle = |0\rangle, \quad (12)$$

este comportamiento también se conoce como un bit-flip(intercambio de bit), también se puede actuar en superposiciones, los eigen-vectores de σ_x son los kets $|+\rangle, |-\rangle$.

La matriz de Pauli z , σ_z está definida como

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|, \quad (13)$$

el comportamiento de esta matriz se describe como un intercambio de fase(phase-flip), para visualizar esto, se opera sobre la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ con el siguiente ejemplo:

$$\sigma_z|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |-\rangle,$$

en notación de Dirac se tiene

$$\sigma_z|-\rangle = (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |+\rangle. \quad (14)$$

Los eigen-vectores de la matriz σ_z son los kets $|0\rangle, |1\rangle$.

La matriz Pauli y , σ_y está definida por

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i|1\rangle\langle 0| - i|0\rangle\langle 1|. \quad (15)$$

Se hace la observación que $\sigma_y = i\sigma_x\sigma_z$ por lo que se puede interpretar a esta compuerta como una sucesión de bit flip y phase flip.

Cualquiera de las matrices de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ cumple con

$$\sigma_i^2 = \mathbb{1}. \quad (16)$$

El conjunto de las matrices de Pauli y la matriz identidad forman una base de matrices de 2×2 .

4.3. Mediciones

Por lo general se utilizan bases ortonormales para describir y medir estados cuánticos, aquí se sigue esa convención. Durante una medición en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ el estado colapsará ya sea a $|0\rangle$ o $|1\rangle$, estos son los eigen-estados de σ_z la matriz Pauli-z(ver 4.2.1) a esto se le conoce como medición en z .

Hay infinitas bases distintas en las que se pueden realizar las mediciones pero otras bases comunes son $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ definidas como:

$$|+\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad (17)$$

$$|-\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \quad (18)$$

que son los eigen-vectores de la matriz de Pauli σ_x , y como se ha de esperar otra base comúnmente usada son los eigen-vectores de la matriz Pauli σ_y :

$$|+i\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle), \quad (19)$$

$$|-i\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle), \quad (20)$$

4.4. Regla de Born

La probabilidad que el estado $|\psi\rangle$ colapse durante una medición proyectiva en la base $\{|x\rangle, |x^+\rangle\}$ al estado $|x\rangle$ está dada por

$$P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2,$$

y del hecho que se está trabajando con estados normalizados se tiene, como es de esperarse que

$$\sum_i P(x_i) = 1.$$

Para ilustrar esto se presentan algunos ejemplos:

a. El estado $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + \sqrt{2}|1\rangle)$ es medido en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ calcule las probabilidades correspondientes:

$$P(0) = \left| \langle 0 | \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + \sqrt{2}|1\rangle) \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \langle 0|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle 0|1\rangle \right|^2,$$

$$P(0) = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{3},$$

$$P(1) = \left| \sqrt{\frac{2}{3}} \right|^2 = \frac{2}{3},$$

$$P(0) + P(1) = 1.$$

b. El estado $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ es medido en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, encontrar las probabilidades correspondientes:

$$P(+)=\left|\langle +|\psi\rangle\right|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0|+\langle 1|)\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)\right|^2$$

$$P(+) = \frac{1}{4} \left| \langle 0|0\rangle - \langle 0|1\rangle + \langle 1|0\rangle - \langle 1|1\rangle \right|^2 = 0$$

$$P(-) = 1$$

Como es de esperarse ya que $\left| \langle -|\psi\rangle \right|^2 = \left| \langle -|- \rangle \right|^2 = 1$ y $\left| \langle +|- \rangle \right|^2 = 0$ por la propiedad de ortogonalidad de estas bases.

4.5. Correlaciones en las mediciones de spin y las desigualdades de Bell

4.5.1. Correlaciones en estados *spin-singlets*

El ejemplo más simple de adición de momento angular en sistemas compuestos de varias partículas en Mecánica Cuántica es el caso de espín $\frac{1}{2}$ ver por ejemplo [11], este sistema se usa para demostrar uno de los efectos de la mecánica cuántica más sorprendentes y que ha causado controversias y discusiones científicas famosas i.e. La paradoja de Eistein, Podolsky y Rosen, ver [4], [2].

Considerando un sistema de dos electrones en un estado *spin-singlet*, i.e. con spin total igual a 0. El estado puede escribirse cómo

$$|spin-singlet\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\hat{\mathbf{z}}+; \hat{\mathbf{z}}-\rangle - |\hat{\mathbf{z}}-; \hat{\mathbf{z}}+\rangle) \quad (21)$$

donde se ha especificado explícitamente la dirección de cuantización, para hacer una reseña se recuerda que en $|\hat{\mathbf{z}}+; \hat{\mathbf{z}}-\rangle$ se interpreta que el primer electrón está en el estado spin "arriba" y el segundo está en el estado spin "abajo" de manera análoga para $|\hat{\mathbf{z}}-; \hat{\mathbf{z}}+\rangle$ se tiene al primer electrón en el estado spin "abajo" y al el segundo está en el estado spin "arriba".

Ahora si se realiza una medición sobre el estado definido en 21 hay una probabilidad $p = 0,5$ de encontrar al sistema en un estado "arriba" o "abajo" ya que el sistema tiene la misma probabilidad de estar en el estado $|\hat{\mathbf{z}}+; \hat{\mathbf{z}}-\rangle$ o $|\hat{\mathbf{z}}-; \hat{\mathbf{z}}+\rangle$. En esta medición si se encuentra a uno de los electrones con un spin "arriba" el otro necesariamente tiene que estar en con el spin "abajo" y viceversa. Cuando se halla al primer electrón en el estado spin "arriba" el aparato de medición a colapsado la función de onda del sistema al estado(en otras palabras el aparato de medición ha seleccionado) el primer término de 21, $|\hat{\mathbf{z}}+; \hat{\mathbf{z}}-\rangle$ una medición subsecuente en el spin del segundo electrón debe reafirmar que estado compuesto está dado por $|\hat{\mathbf{z}}+; \hat{\mathbf{z}}-\rangle$.

Es impresionante que este tipo de correlación pueda persistir incluso cuando las 2 partículas del sistema estén bastante alejadas una de otro y hayan dejado de interactuar localmente dado que cuando mientras se alejan el movimiento no cambia el spin de las partículas. Este es el caso de un sistema con momento angular $J = 0$ que se desintegra espontáneamente es dos partículas de spin $\frac{1}{2}$ sin momento angular orbital relativo, debido a que el momento angular se debe conservar en el proceso de desintegración. Un ejemplo experimental de esto se da en un proceso escaso o raro en el que un mesón η con masa $549 \frac{\text{MeV}}{c^2}$ decae un par de muones

$$\eta \rightarrow \mu^+ + \mu^-,$$

este proceso es extremadamente raro pero hay otros casos más realísticos cómo la dispersión de protón-protón a bajas energías cinéticas.

Para ser más ilustrativa la deducción y al mismo tiempo más pictórica se considera a un sistema de dos partículas de spin $\frac{1}{2}$ moviéndose en direcciones contrarias cómo se puede en la figura 1, el observador A se enfoca en medir el componente del spin S_z de la partícula 1 que se mueve hacia la derecha y el observador B se enfoca en medir S_z para la partícula 2 que se mueve hacia la izquierda. Asumiendo el caso en el que el observador A mide una S_z y obtiene un valor positivo, entonces este observador puede predecir el resultado de la medición que hace el observador B, incluso antes de el observador B realice cualquier medición, el resultado de la medición de B es certeza el valor negativo para S_z , por el otro lado si el observador A no realiza ninguna medición entonces hay un 50 % – 50 % de chance de medir S_z^+ o S_z^- . Esto incluso podría ser de esperarse, considerando la siguiente analogía: " es cómo tener un par de guantes uno con orientación derecha y otro con orientación izquierda y se ponen en cajas idénticas aleatoriamente, si alguien abre una caja al azar y encuentra por ejemplo el guante derecho sabrá con certeza que en la otra caja hay un guante izquierdo". Resulta que está analogía es demasiado sencilla para capturar la sofisticación intrínseca de la mecánica cuántica. En el caso de las partículas se puede elegir una dirección arbitraria del espín y medir por ejemplo medir S_x en lugar de S_z , en la analogía no hay manera de medir otra orientación de los guantes y por ejemplo hubiese otra diferencia en los guantes cómo que los guantes tuvieran un color en particular el derecho blanco y el izquierdo negro, en el caso cuántico significaría cambiar los colores de los guantes por ejemplo a un par rojo-azul o verde-amarillo y es ahí donde no se encuentra un sistema clásico análogo al fenómeno cuántico.

Para un sistema de una partícula de espín $\frac{1}{2}$ se tienen los eigenkets(también

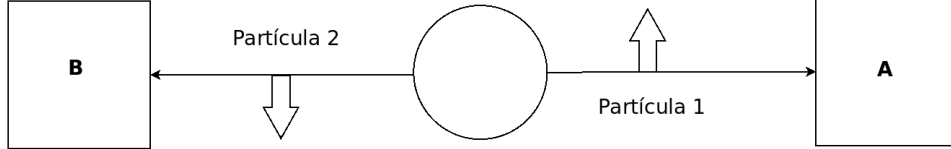


Figura 1: Correlación de espín para un estado *spin-singlet*

llamados *vectores propios*) S_x y S_z están relacionados de la siguiente manera ¹

$$|\hat{x}\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{z}+\rangle \pm |\hat{z}-\rangle), \quad |\hat{z}\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}+\rangle \pm |\hat{x}-\rangle).$$

Continuando la discusión con el sistema compuesto, se puede reescribir el estado de spin-singlet 21 escogiendo al eje x cómo eje de cuantización de la siguiente manera:

$$|\text{spin-singlet}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{x}-; \hat{x}+\rangle - |\hat{x}+; \hat{x}-\rangle).$$

está expresión es muy parecida a 21 y aparte del signo(que es una convención) se pudo esperaba tener una expresión análoga debido al hecho que para los estados

¹ver [11]

de *spin-singlet* no hay preferencia de dirección espacial. Suponiendo ahora que el observador A puede elegir medir S_z or S_x para la partícula 1 al cambiar la orientación de su dispositivo para medir el spin, mientras que el observador B se concentra en una sola dirección S_x para la partícula 2. Si A mide S_z y obtiene un valor positivo B tiene claramente 50 % – 50 % chance de hallar $S_x +$ o $S_x -$ aunque se sepa que S_z es con certeza negativo, su componente S_x está totalmente indeterminado. Por el otro lado, suponiendo que A escoge medir S_x entonces cuando mida un valor positivo para la partícula 1 el observador B tendrá con certeza un valor negativo para S_x . La última opción en la que el observador A prefiere no hacer ninguna medición sobre la partícula 1 entonces es claro que el observador B tiene de nuevo 50 % – 50 % chance de medir $S_x +$ o $S_x -$, para resumirlo

1. Si A mide S_z y B mide S_x , entonces hay una correlación completamente aleatoria entre las dos mediciones.
2. Si A mide S_x y B mide S_x , entonces hay una correlación perfecta(signos opuestos en las mediciones) entre las dos mediciones.
3. Si A no realiza medición, entonces las mediciones de B dan resultados aleatorios.

Estos hechos demuestran que el resultado de la medición realizada por B parece depender de que tipo de medición el observador decide hacer: una medición de S_x , una medición de S_y , o ninguna medición. Es importante recalcar que A y B pueden estar a kilómetros de distancia sin posibilidad de comunicación o alguna interacción. El observador A puede decidir la orientación de su dispositivo para medir el spin mucho después de que las partículas se separan. Pareciera ser que la partícula 2 "sabe" el componente del spin de la partícula 1 que se está midiendo instantáneamente.

La interpretación ortodoxa(la interpretación de Copenhagen) de esta situación es la siguiente, la medición del observador A es un proceso de selección o filtrado. Cuando se mide S_z de la partícula 1 y se obtiene un valor positivo, entonces se selecciona al componente $|\hat{z}+; \hat{z}-\rangle$ o la función de onda colapsa a este estado, una medición subsecuente de S_z en la otra partícula tan sólo confirma que el estado es de hecho $|\hat{z}+; \hat{z}-\rangle$ o sigue en este estado. Se debe aceptar que lo que parece ser una medición en una parte del sistema es una medición en el sistema bipartito o el sistema completo.

4.6. Principio de localidad de Einstein y la desigualdad de Bell

Varios físicos han tenido una inconformidad o han tenido otras interpretaciones con respecto a la interpretación ortodoxa antes expuesta. Probablemente el más famoso fue Albert Einstein que siempre mostró e hizo explícita su inconformidad con varios aspectos de la teoría cuántica. El principio de localidad de Einstein es el siguiente: Para un sistema bipartito $S = S_1 \times S_2$ la situación real es que el comportamiento del subsistema S_2 es independiente del subsistema S_1 que está espacialmente separado del primer sistema y por lo tanto no tiene una influencia directa. Este problema fue discutido por primera vez en un artículo seminal que se conoce como la paradoja EPR(Einstein, Podolsky y Rosen) ver

[4]. Algunos han argumentado que las dificultades o incongruencias encontradas en este fenómeno son inherentes de las interpretaciones probabilísticas de la mecánica cuántica y que el comportamiento de la dinámica a nivel microscópico aparenta ser probabilístico debido a que se desconocen algunos parámetros por descubrir que se han llamado *variables ocultas* (en inglés llamadas *hidden variables*) no han sido especificados. Hay varias propuestas teóricas alternativas a la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica basadas en variables ocultas u otras consideraciones, por ejemplo la teoría de onda piloto de Bohm, introducida por uno de los padres de la teoría cuántica, Louis de Broglie. La pregunta fundamental para establecer la validez de la teoría cuántica es, ¿las teorías alternativas hacen predicciones que difieren de las hechas por la mecánica cuántica?. Hasta 1964 se creía que las teorías alternativas podían manipularse de tal forma que sus predicciones siempre coincidían con las predicciones cuánticas, el debate se podía considerar en ese sentido un tópico metafísico o filosófico, al final los resultados experimentales eran idénticos. No fue hasta que John S. Bell dedujo que las teorías alternativas basadas en el principio de localidad de Einstein producían predicciones en la forma de una relación de desigualdad entre los observables de experimentos de correlaciones de espín que estaba en desacuerdo con las predicciones para el mismo experimento derivadas de la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica que además podía ser sometida a confirmación experimental.

Aquí se derivan la relación de desigualdad de Bell en el marco de un modelo simple concebido inicialmente por Eugene Wigner, que incorpora todos los aspectos fundamentales de las teorías alternativas basadas en las variables ocultas. Los proponentes de este modelo aseguran que es imposible determinar S_x y S_y simultáneamente, i.e. son variables conjugadas. Sin embargo cuando se tiene un número grande de partículas con espín $\frac{1}{2}$ se asigna a cierta fracción de las partículas con la siguiente propiedad:

1. Si se mide S_z , se obtiene un valor positivo con certeza.
2. Si se mide S_x , se obtiene un valor negativo con certeza.

Se dice que una partícula que satisface esta propiedad pertenece al tipo $(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}-)^2$, hay que notar con esta propiedad no se está aseverando que se pueda medir simultáneamente a S_x y S_z y medir $+$ y $-$ respectivamente. Cuando se mide S_x no mide S_z y viceversa. Se asignan valores definidos para componentes del espín en más de una dirección con la aclaración que sólo se mide un componente a la vez. Aunque este acercamiento es fundamentalmente distinto al de la mecánica cuántica, las predicciones cuánticas para las mediciones de S_z y S_x para el espín arriba (S_z+) pueden ser reproducidas dado que se tienen tantas partículas que pertenecen al tipo $(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}+)$ como al tipo $(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}-)$.

Examinando cómo este modelo relativamente sencillo puede explicar las correlaciones en la mediciones hechas sobre sistemas compuestos por estados de espín singlete (*spin-singlets*), es claro que para un par en particular debe cumplirse o debe haber una correlación perfecta en la hay una coincidencia entre la partícula 1 y partícula 2 de tal manera que el momento angular del sistema es igual a cero: si la partícula 1 es del tipo $(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}-)$, entonces la partícula 2 es del tipo $(\hat{\mathbf{z}}-, \hat{\mathbf{x}}+)$, y de manera análoga en todos los otros casos (ver [11]). Estos

²La notación utilizada hace referencia que el observable del espín en S_z y S_x es positivo y negativo respectivamente, se ha preparado al estado en esta configuración.

resultados de correlación pueden reproducirse si la partícula 1 y la partícula 2 coinciden de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
&\text{partícula 1} \quad \text{partícula 2} \\
&(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}-) \leftrightarrow (\hat{\mathbf{z}}-, \hat{\mathbf{x}}+), \\
&(\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}+) \leftrightarrow (\hat{\mathbf{z}}-, \hat{\mathbf{x}}-), \\
&(\hat{\mathbf{z}}-, \hat{\mathbf{x}}+) \leftrightarrow (\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}-), \\
&(\hat{\mathbf{z}}-, \hat{\mathbf{x}}-) \leftrightarrow (\hat{\mathbf{z}}+, \hat{\mathbf{x}}+),
\end{aligned} \tag{22}$$

con proporciones iguales, 25 % cada una de las porciones de partículas. Se implica una suposición importante en este desarrollo, suponiendo que un par que pertenece al tipo 21 y el observador A decide hacer una medición del componente S_z de la partícula 1, en este caso se obtiene un valor positivo independientemente si el observador B decide medir S_z o S_x . Es en este sentido en el que se incorpora el principio de localidad de Einstein en el modelo: el resultado de la medición de A está independientemente predeterminado de la elección que el observador B haga en su medición.

En los ejemplos considerados previamente, se han reproducido exitosamente las predicciones de la mecánica cuántica. Considerando situaciones más elaboradas en las que el modelo hace predicciones que difieren de las hechas por la teoría de la mecánica cuántica. En este caso más complejo se tienen tres vectores unitarios $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{b}}$ y $\hat{\mathbf{c}}$, que en general no son mutuamente ortogonales. Se tiene el caso en que una de las partículas pertenece al un grupo definido, por ejemplo $(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}+)$, que significa que si se mide $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{a}}$, se obtiene una medición negativa con certeza; si se mide $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{b}}$ se obtiene una medición positiva con certeza y finalmente si se mide $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{c}}$ también se obtiene una medición positiva. De manera análoga que el caso en el que sólo se tiene dos direcciones en este caso debe de haber una coincidencia perfecta con la otra partícula, por conservación de momento angular del sistema, es decir que la partícula 2 es del tipo $(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}-)$. En un caso aleatorio cualquiera el par de partículas debe de pertenecer a uno de los ocho tipos que se detallan en la tabla 4.6. Estas ocho posibilidades son mutuamente excluyentes y disjuntas³. El número de partículas de cada tipo se especifica en la primera columna de la tabla. Para ilustrar cómo se calculan las probabilidades en este experimento se supone que el observador A hace una medición de $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ y obtiene un valor positivo y el observador B hace una medición $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ también positiva entonces es claro que de la tabla 4.6 que el par de partículas sólo tiene puede pertenecer a dos grupos, el grupo 3 o el grupo 4 por lo que el número total de pares de partículas es $N_3 + N_4$. Debido a que $N_i \geq 0$, se tienen relaciones de desigualdad del tipo:

$$N_3 + N_4 \geq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_7) \tag{23}$$

Si $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$ es la probabilidad que, en una selección aleatoria el observador A mida $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{a}}$ y obtenga + y el observador B mida $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{b}}$ y obtenga +, y así de manera análoga para todas las otras combinaciones de posibilidades. La probabilidad está dada por

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +) = \frac{N_3 + N_4}{\sum_{i=1}^8 N_i}.$$

³Conjuntos sin elementos en común.

Grupo	Partícula 1	Partícula 1
N_1	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}-)$
N_2	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}+)$
N_3	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}-)$
N_4	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}+)$
N_5	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}-)$
N_6	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}+)$
N_7	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}+)$	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}-)$
N_8	$(\hat{\mathbf{a}}-, \hat{\mathbf{b}}-, \hat{\mathbf{c}}-)$	$(\hat{\mathbf{a}}+, \hat{\mathbf{b}}+, \hat{\mathbf{c}}+)$

De manera análoga se tiene que

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{c}}, +) = \frac{N_2 + N_4}{\sum_{i=1}^8 N_i},$$

y

$$P(\hat{\mathbf{c}}+; \hat{\mathbf{b}}, +) = \frac{N_3 + N_7}{\sum_{i=1}^8 N_i},$$

la condición de positividad del número de poblaciones en cada tipo 23 da como resultado

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +) \geq P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{c}}, +) + P(\hat{\mathbf{c}}+; \hat{\mathbf{b}}, +) \quad (24)$$

Esta es la *desigualdad de Bell*, que es una consecuencia del principio de localidad de Einstein.

4.7. Desigualdad de Bell y Mecánica Cuántica

En el punto de vista de la Mecánica Cuántica no se habla de una fracción de pares de partículas por ejemplo $\frac{N_3}{\sum_{i=1}^8 N_i}$ pertenecientes al tipo 3, en lugar de esto se caracterizan todos los sistemas de estado espín singlete (*spin-singlet*) por el mismo ket 21, en este sentido se tiene un ensamble puro (ver Sakurai [11]). Usando el ket 21 y las reglas de la mecánica cuántica se pueden calcular las probabilidades de la desigualdad de Bell 24 sin ninguna ambigüedad.

Primero se evalúa $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +)$. Suponiendo que el observador A mide $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{a}}$ y haya un valor +; debido a la correlación perfecta por la conservación del momento angular discutida previamente, la medición del observador B para $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{b}}$ va a resultar en - con certeza. Pero para calcular $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +)$ se debe considerar un nuevo eje de cuantización para $\hat{\mathbf{b}}$ con un ángulo θ_{ab} con respecto a $\hat{\mathbf{a}}$, ver figura 2. De acuerdo al formalismo de la formulación matricial de la mecánica cuántica (ver [11]), la probabilidad que la medición de $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ dé como resultado + cuando se sabe que la partícula 2 es un estado propio (*eigen vector*) de $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ con valor propio negativo, está dada por

$$\cos^2 \left[\frac{\pi - \theta_{ab}}{2} \right] = \sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right).$$

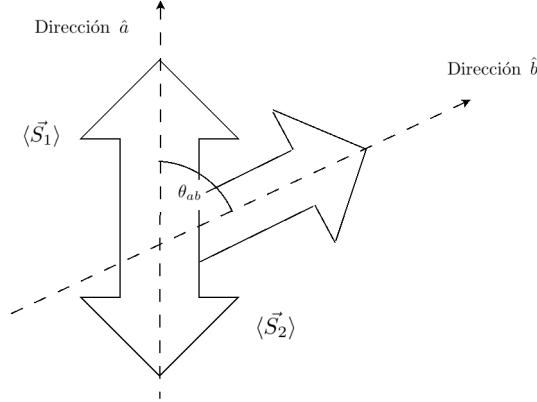


Figura 2: Evaluación de $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +)$

Cómo resultado se obtiene que

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}, +) = \frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right), \quad (25)$$

donde el factor $\frac{1}{2}$ surge de la probabilidad inicial de obtener $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ con valor $+$. Usando la expresión 26 y su generalización para los otros 2 términos de 24 se puede reescribir la desigualdad de Bell cómo:

$$\sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right) \leq \sin^2 \left(\frac{\theta_{ac}}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{\theta_{cb}}{2} \right) \quad (26)$$

Con este resultado se puede demostrar que la desigualdad 27 no siempre se cumple desde un acercamiento geométrico. Por simplicidad se escoge a $\hat{\mathbf{a}}$, $\hat{\mathbf{b}}$ y $\hat{\mathbf{c}}$ a estar en un plano, y se escoge a $\hat{\mathbf{c}}$ de tal manera que bisecte las direcciones definidas por $\hat{\mathbf{a}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$, con estas simplificaciones se obtiene:

$$\theta_{ab} = 2\theta, \quad \theta_{ac} = \theta_{cb} = \theta \quad (27)$$

La desigualdad 27 es violada para

$$0 < \theta < \frac{\pi}{2} \quad (28)$$

Por ejemplo, si se toma $\theta = \frac{\pi}{4}$ se obtiene la contradicción

$$0,500 \leq 0,292 \quad (29)$$

Con esto se puede evidenciar claramente que las predicciones de la mecánica cuántica no son compatibles con la desigualdad de Bell. Hay un observable real(en el sentido que puede verificarse experimentalmente) que difiere entre las predicciones cuánticas y la teoría alternativa que satisface el principio de localidad de Einstein.

4.8. Transformada Cuántica de Fourier

4.8.1. Introducción

Como se mencionó antes la transformada de Fourier tienen muchas aplicaciones en toda la física y también tiene aplicaciones importantes en la computación clásica en áreas como el procesamiento de señales, algoritmos de compresión de datos y teoría de complejidad de algoritmos. La transformada de Fourier Cuántica es la implementación cuántica de la transformada discreta de Fourier sobre las amplitudes de una función de onda⁴, es una parte fundamental de varios algoritmos cuánticos como el algoritmo de factorización de Shor y la estimación de fase cuántica.

La transformada de Fourier cuántica actúa sobre un vector (x_0, \dots, x_{N-1}) y lo mapea o transforma a otro vector (y_0, \dots, y_{N-1}) por medio de la siguiente fórmula

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \omega_N^{jk} \quad (30)$$

donde

$$\omega_N^{jk} = e^{2\pi i \frac{jk}{N}}. \quad (31)$$

De manera análoga la transformada cuántica de Fourier actúa sobre un estado cuántico⁵

$$|X\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle \quad (32)$$

y lo mapea a un estado

$$|Y\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle \quad (33)$$

conforme a la expresión

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \omega_N^{jk} \quad (34)$$

donde ω_N^{jk} está definido en 32, es importante notar que sólo las amplitudes del estado son afectadas por esta transformación, esto puede expresarse también como el mapeo

$$|j\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \quad (35)$$

o por la matriz unitaria

$$U_{\text{QFT}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \langle j| \quad (36)$$

⁴Una función de onda que evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger

⁵Un vector en un espacio de Hilbert, finito o infinito

4.8.2. Intuición detrás de la TCF(QFT)

La intuición detrás de la Transformada Cuántica de Fourier(QFT-*Quantum Fourier Transform*) viene del hecho que el efecto que tiene al transformar a un estado cuántico básicamente se está cambiando de la base computacional Z a la base de Fourier. La compuerta de Hadamard([6], [13], [8]) es la transformada de Fourier cuántica para un solo qubit, transforma de base computacional Z $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ a la base X $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. De la misma manera todos los estados de partículas múltiples es decir estados de varios qubit en la base computacional tiene una representación en la base de Fourier. La TCF simplemente es la función que transforma entre estas bases.

$$\text{QFT}|x\rangle = |\tilde{x}\rangle \quad (37)$$

donde la base de Fourier se denota como $|\tilde{x}\rangle$.

4.8.3. Ejemplo 1: TCF de 1-qubit

Se empieza por considerar como el operador QFT definido previamente, actúa sobre un estado de un solo qubit, i.e. $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. Para este caso $x_0 = \alpha, x_1 = \beta$, y $N = 2$, con esto se obtiene que el primer coeficiente de Fourier en la transformación es

$$y_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \exp\left(2\pi i \frac{0 \times 0}{2}\right) + \beta \exp\left(2\pi i \frac{1 \times 0}{2}\right) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) \quad (38)$$

y para el segundo coeficiente se tiene

$$y_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \exp\left(2\pi i \frac{0 \times 1}{2}\right) + \beta \exp\left(2\pi i \frac{1 \times 1}{2}\right) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta) \quad (39)$$

con esto se obtiene el resultado total sobre $|\psi\rangle$

$$U_{\text{QFT}}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta)|1\rangle \quad (40)$$

está operación es equivalente a aplicar el operador de Hadamard

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (41)$$

al estado $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta)|1\rangle \equiv \tilde{\alpha}|0\rangle + \tilde{\beta}|1\rangle \\ &= \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \end{aligned} \quad (42)$$

4.8.4. Transformada Cuántica de Fourier: definición general

La ejemplo anterior no deja del todo claro el como se aplica una transformada cuántica de Fourier para N más grandes. Aquí se toma a $N = 2^n$, es decir U_{QFT_N}

actuando en el estado $|x\rangle = |x_1 \dots x_n\rangle$ ⁶ donde x_1 es el bit más significativo. Con esto se aplica la expresión 34 para obtener

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} \omega_N^{xy} |y\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i xy/2^n} |y\rangle \end{aligned} \quad (43)$$

reescribiendo y en notación fraccional binaria $y = y_1 \dots y_n$ con

$$\frac{y}{2^n} = \sum_{k=1}^n \frac{y_k}{2^k}$$

donde $y_k \in \{0, 1\}$, sustituyendo en 44 se obtiene

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i (\sum_{k=1}^n y_k/2^k)} |y_1 \dots y_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} \prod_{k=1}^n e^{2\pi i y_k/2^k} |y_1 \dots y_n\rangle \end{aligned} \quad (44)$$

donde se ha expresado al exponencial de una suma como un producto de exponenciales. Re-arreglando las sumas y productos, y expandiendo $\sum_{y=0}^{N-1} = \sum_{y_1=0}^1 \sum_{y_2=0}^1 \dots \sum_{y_n=0}^1$, se obtiene

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \bigotimes_{k=1}^n \left(|0\rangle + e^{2\pi i x/2^k} |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2} x} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^2} x} |1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^n} x} |1\rangle \right) \end{aligned} \quad (45)$$

5. Metodología

La metodología a usar es un abordaje híbrido en el que se estudian a fondo los temas teóricos y se van aplicando a una implementación básica en *Qiskit*, estas implementaciones se van a ir versionando en un repositorio de **GitHub** para poder reproducir todos los resultados.

Los resultados teóricos se desarrollan desde principios fundamentales y se dejará constancia de las deducciones realizadas, los algoritmos se van a ir probando por medio de la interfaz que ofrece *IBM* para utilizar ordenares cuánticos reales, esto para cuantificar los efectos de los errores en los algoritmos desarrollados. También se investigará cómo el *Quantum Machine Learning* puede utilizarse para potenciar al *Machine Learning* clásico, esto servirá como base para escribir una sección en un artículo sobre un modelo de *Machine Learning* llamado SeismicNet. SeismicNet es un modelo red neuronal profunda para el análisis automático de señales sísmicas.

⁶Se hace uso de la notación $|x_1 \dots x_n\rangle = |x_1\rangle \otimes \dots \otimes |x_n\rangle$

Referencias

- [1] George Arfken. *Mathematical Methods for Physicists*.
- [2] J.S. Bell. *On the Einstein Podolski Rosen Paradox*. https://cds.cern.ch/record/111654/files/vol1p195-200_001.pdf
- [3] John F. Clauser, Michael A. Horne, Abner Shimony, Richard Holt. *PROPOSED EXPERIMENT TO TEST LOCAL HIDDEN-VARIABLE THEORIES*. Physical Review Letters,. 23(15):880-4, <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.23.880>.
- [4] Einstein A., B. Podolsky, N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?*. Physical Review. doi:10.1103/PhysRev.47.777
- [5] Richard P. Feynman. *Simulating Physics with Computers*. <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [6] Julio Medina. *Reporte de Seminario 1. Computación Cuántica*. https://github.com/Julio-Medina/Seminario/blob/main/Reporte_final/reportes_final.pdf
- [7] N. David Mermin *Quantum Computer Science: An Introduction*. Cambridge University Press, 2007.
- [8] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press 2010. 10th. Anniversary Edition.
- [9] OpenQASM. <https://github.com/openqasm/openqasm>.
- [10] *Qiskit Textbook*. <https://qiskit.org/textbook-beta>
- [11] J.J. Sakurai *Modern Quantum Mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985.
- [12] Peter W. Shor, *Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer*. <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/9508027>
- [13] *Qiskit Textbook*. <https://qiskit.org/textbook-beta>