

Transformada Cuántica de Fourier

Seminario 2

Lic. Julio A. Medina¹

¹ Universidad de San Carlos, Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Maestría en Física
julioantonio.medina@gmail.com

La transformada de Fourier y el análisis de Fourier en general son una maquinaria matemática ubicua en la física. Esto es de esperarse ya que muchos fenómenos físicos son de naturaleza ondulatoria es decir que son fenómenos que involucran el estudio de ondas para su entendimiento, por mencionar algunos casos importantes en los que se aplica el análisis de Fourier en la física se tienen:

- Mecánica Cuántica
- Sismología
- Teoría electromagnética
- Vibraciones mecánicas.
- Procesamiento de señales naturales y artificiales.
- Espectroscopia.
- Solución de ecuaciones diferenciales.
- Teoría cuántica de campo.
- Computación cuántica.

1. Transformada de Fourier Clásica

1.1. Series de Fourier

Una serie de Fourier se puede definir como una expansión o una representación de una función en series de seno y coseno con la forma

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx \quad (1)$$

Las condiciones impuestas sobre $f(x)$ para que la ecuación anterior sea válida, son que $f(x)$ tenga un número finito de discontinuidades finitas y un número finito de valores extremos, máximos y mínimos. Estas condiciones se conocen como condiciones de Dirichlet. La teoría de Sturm-Liouville(ver [1]) garantiza la validez de la ecuación 1 usando las relaciones de ortogonalidad se pueden obtener los coeficientes de expansión

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cos nt \, dt$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \sin nt \, dt, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Sustituyendo los coeficientes a_n y b_n en 1 se obtiene

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty f(t) dt + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^\infty \left[\cos nx \int_0^{2\pi} f(t) \cos nt \, dt + \sin nx \int_0^{2\pi} f(t) \sin nt \, dt \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty f(t) dt + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^\infty \int_0^{2\pi} f(t) \cos n(x-t) \, dt \end{aligned} \quad (2)$$

las expresiones anteriores son válidas para representar a la función $f(x)$ en el intervalo $[0, 2\pi]$. Para representarlas en un intervalo de longitud $2L$ se pueden expresar la ecuación 1 y sus coeficientes como:

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^\infty \left[a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right] \quad (3)$$

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(t) \cos \frac{n\pi t}{L} \, dt \\ b_n &= \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(t) \sin \frac{n\pi t}{L} \, dt, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (4)$$

1.2. Integral de Fourier

Como se ha mencionado las series de Fourier son especialmente útiles para representar cierto tipo de funciones en un rango definido: $[0, 2\pi]$, $[-L, L]$, y así sucesivamente como sea necesario, o en el intervalo $[-\infty, \infty]$ si la función es periódica. Ahora se analiza el problema de representar una función no periódica sobre un rango infinito. Esto se puede interpretar físicamente como la descomposición de un pulso aislado o un paquete de onda en sus componentes senoidales. Los coeficientes de la serie de Fourier en el intervalo $[-L, L]$ dados por 4 dan como resultado la serie de Fourier:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(t) \, dt + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^\infty \cos \frac{n\pi x}{L} \int_{-L}^L f(t) \cos \frac{n\pi t}{L} \, dt + \\ &\quad \frac{1}{L} \sum_{n=1}^\infty \sin \frac{n\pi x}{L} \int_{-L}^L f(t) \, dt \sin \frac{n\pi t}{L} \, dt \end{aligned} \quad (5)$$

esto se puede reescribir como

$$f(x) = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(t) \, dt + \frac{1}{L} \sum_{n=1}^\infty \int_{-L}^L f(t) \cos \frac{n\pi}{L} (t-x) \, dt. \quad (6)$$

Ahora se permite que el parámetro L se acerque al infinito, transformando el intervalo finito $[-L, L]$ en un intervalo infinito $(-\infty, \infty)$. Se asignan

$$\omega = \frac{n\pi}{L}, \quad \Delta\omega = \frac{\pi}{L}, \quad \text{con } L \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Con esto se obtiene

$$f(x) \rightarrow \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \Delta\omega \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega(t-x) dt, \quad (8)$$

sustituyendo la suma infinita por una integral sobre ω , se obtiene

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega(t-x) dt, \quad (9)$$

el término a_0 se desvanece asumiendo que $\int_{-\infty}^{\infty} f(t) dt$ existe.

El resultado 9 se conoce como integral de Fourier, este resultado puede expresarse convenientemente de manera exponencial al notar que

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos \omega(t-x) dt, \quad (10)$$

además se tiene que

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \sin \omega(t-x) dt = 0 \quad (11)$$

estos resultados son consecuencia que la función $\cos \omega(t-x)$ es una función par sobre la variable ω y $\sin \omega(t-x)$ es una función impar en ω , sumando 10 y 11 multiplicada por un factor de la unidad imaginaria i , se obtiene

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (12)$$

La variable ω es una variable arbitraria, también conocida como variable muda, juega el papel que toma un índice en una sumatoria como índice mudo, sin embargo en muchos problemas físicos ω representa una frecuencia angular. Con esto se puede interpretar a las expresiones 10 y 12 como representaciones de $f(x)$ en términos de una distribución de frentes de onda de longitud infinita con frecuencia angular ω donde la frecuencia es una variable real continua.

1.3. Transformada de Fourier

Definiendo a una función $g(\omega)$, como la transformada de Fourier a través de

$$g(\omega) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (13)$$

entonces es fácil ver que de la integral de Fourier 12 se tiene

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{-i\omega x} d\omega. \quad (14)$$

esta relación también es conocida como teorema de la inversión o transformada inversa de Fourier, vale la pena notar que las expresiones 13 y 14 son casi simétricas, sin embargo difieren por el signo de la unidad imaginaria i .

2. Transformada Cuántica de Fourier

2.1. 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 onda¹, 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

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \omega_N^{jk} \quad (15)$$

donde

$$\omega_N^{jk} = e^{2\pi i \frac{jk}{N}}. \quad (16)$$

De manera análoga la transformada cuántica de Fourier actúa sobre un estado cuántico²

$$|X\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle \quad (17)$$

y lo mapea a un estado

$$|Y\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle \quad (18)$$

conforme a la expresión

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \omega_N^{jk} \quad (19)$$

donde ω_N^{jk} está definido en 16, es importante notar que sólo las amplitudes del estado son afectadas por esta transformación, esto puede expresarse también como el mapeo

$$|j\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \quad (20)$$

o por la matriz unitaria

$$U_{\text{QFT}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_N^{jk} |k\rangle \langle j| \quad (21)$$

¹Una función de onda que evoluciona de acuerdo a la ecuación de Schrödinger

²un vector en un espacio de Hilbert, finito o infinito

2.1.1. 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([3], [6], [4]) 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.

$$\text{QFT}|x\rangle = |\tilde{x}\rangle \quad (22)$$

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

2.2. 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

$$y_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \exp \left(2\pi i \frac{0 \times 0}{2} \right) + \beta \exp \left(2\pi i \frac{1 \times 0}{2} \right) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta) \quad (23)$$

y para el segundo coeficiente se tiene

$$y_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \exp \left(2\pi i \frac{0 \times 1}{2} \right) + \beta \exp \left(2\pi i \frac{1 \times 1}{2} \right) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta) \quad (24)$$

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

$$U_{\text{QFT}}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta)|1\rangle \quad (25)$$

está operación es equivalente a aplicar el operador de Hadamard

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (26)$$

al estado $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta)|1\rangle \equiv \tilde{\alpha}|0\rangle + \tilde{\beta}|1\rangle \\ &= \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

2.3. 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 $|x\rangle = |x_1 \dots x_n\rangle^3$ donde x_1 es el bit más significativo. Con esto se aplica la expresión 18 para obtener

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} \omega_N^{xy} |y\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i xy/2^n} |y\rangle \end{aligned} \quad (28)$$

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 28 se obtiene

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i (\sum_{k=1}^n y_k/2^k)} |y_1 \dots y_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} \prod_{k=1}^n e^{2\pi i x y_k/2^k} |y_1 \dots y_n\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

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

$$\begin{aligned} U_{\text{QFT}_N}|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \bigotimes_{k=1}^n \left(|0\rangle + e^{2\pi i x/2^k} |1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2} x} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^2} x} |1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{\frac{2\pi i}{2^n} x} |1\rangle \right) \end{aligned} \quad (30)$$

3. Circuito para la Transformada Cuántica de Fourier

La transformada cuántica de Fourier se puede implementar utilizando el modelo de circuitos cuántico utilizado por varias implementaciones reales de la computación cuántica, para ver una introducción de estos circuitos se puede consultar [6], [3], [4] etc. Para construir el circuito de QFT se utilizan 2 compuertas, la primera es una compuerta de un solo qubit i.e. la compuerta de Hadamard 26, de la discusión del ejemplo de la QFT para 1-qubit y de la deducción de la expresión general para la QFT se sabe que para el estado de un solo qubit $|x_k\rangle$ la transformada de Fourier cuántica correspondiente es

$$H|x_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2} x_k\right) |1\rangle \right) \quad (31)$$

³Se hace uso de la notación $|x_1 \dots x_n\rangle = |x_1\rangle \otimes \dots \otimes |x_n\rangle$

la segunda compuerta para 2 qubit, es la rotación controlada $CROT_k$, que en notación de bloques de matrices está definida como

$$CROT_k = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & UROT_k \end{bmatrix} \quad (32)$$

donde

$$UROT_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{2\pi i}{2^k}\right) \end{bmatrix} \quad (33)$$

El efecto de aplicar $CROT_k$ en un estado de dos qubits $|x_l x_j\rangle$ donde el primer qubit es el qubit de control y el segundo qubit es el objetivo, viene dado por

$$CROT_k|0 x_j\rangle = |0 x_j\rangle \quad (34)$$

y

$$CROT_k|1 x_j\rangle = \exp\left(\frac{2\pi i}{2^k} x_j\right) |1 x_j\rangle \quad (35)$$

Con estas dos compuertas se puede construir el circuito que implementa la transformada de cuántica de Fourier como se muestra en el siguiente diagrama

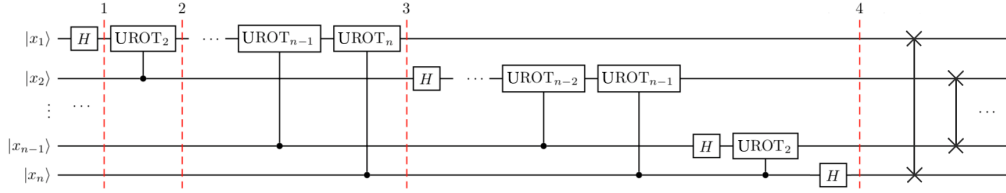


Figura 1: Implementación de circuito QFT

El circuito opera de la siguiente manera. Se empieza con un estado de entrada $|x_1 x_2 \dots x_n\rangle$.

1. Se aplica la compuerta de Hadamard al primer qubit y se transforma al estado de entrada de la siguiente manera

$$H_1|x_1 x_2 \dots x_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2} x_1\right) |1\rangle \right] \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (36)$$

2. Después se aplica la compuerta $UROT_2$ al qubit 1 controlado por el qubit 2, esto resulta en

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^2} x_2 + \frac{2\pi i}{2} x_1\right) |1\rangle \right] \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (37)$$

3. Este proceso del paso anterior se repite hasta llegar al qubit n, es decir cuando se aplica la última compuerta $UROT_n$ al qubit 1 controlado por el qubit n, el estado es transformado a

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^n} x_n + \frac{2\pi i}{2^{n-1}} x_{n-1} + \dots + \frac{2\pi i}{2^2} x_2 + \frac{2\pi i}{2} x_1\right) |1\rangle \right] \otimes |x_2 x_3 \dots x_n\rangle \quad (38)$$

Notando que⁴

$$x = 2^{n-1}x_1 + 2^{n-2}x_2 + \dots + 2^1x_{n-1} + 2^0x_n \quad (39)$$

se puede escribir el estado 38 como

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^n}x\right) |1\rangle \right] \otimes |x_2x_3\dots x_n\rangle \quad (40)$$

4. Después de una secuencia análoga a la de los pasos 1-3 para los qubits $2\dots n$ se obtiene el estado final

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^n}x\right) |1\rangle \right] \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^{n-1}}x\right) |1\rangle \right] \otimes \dots \\ & \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^2}x\right) |1\rangle \right] \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^1}x\right) |1\rangle \right] \end{aligned} \quad (41)$$

que es equivalente a la expresión general 30 desarrollada anteriormente, con la observación que el orden de los qubits se ha revertido en el estado final de salida, es por esto que se utilizan unos operadores llamados *swap* como se ve al final del diagrama 1.

3.1. Ejemplo 2: TCF de 3 qubits

Para hacer explícitos los cálculos para hallar la TCF para 3 qubits se quiere encontrar $|y_1y_2y_3\rangle = QFT_8|x_3x_2x_1\rangle$. Los pasos son los siguientes:

1. Aplicar la compuerta de Hadamard al qubit $|x_1\rangle$

$$|\psi_1\rangle = |x_3\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2}x_1\right) |1\rangle \right] \quad (42)$$

2. Aplicar la compuerta $U\text{ROT}_2$ al qubit $|x_1\rangle$ controlado o dependiente del qubit $|x_2\rangle$

$$|\psi_2\rangle = |x_3\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^2}x_2 + \frac{2\pi i}{2}x_1\right) |1\rangle \right] \quad (43)$$

3. Aplicar la compuerta $U\text{ROT}_3$ a $|x_1\rangle$ controlado por $|x_3\rangle$

$$|\psi_3\rangle = |x_3\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + \exp\left(\frac{2\pi i}{2^3}x_3 + \frac{2\pi i}{2^2}x_2 + \frac{2\pi i}{2}x_1\right) |1\rangle \right] \quad (44)$$

3.2. Observaciones sobre el circuito QFT

Referencias

- [1] George Arfken. *Mathematical Methods for Physicists*.

⁴Se hace la observación que al final x es una etiqueta para el estado y $\{x_1, \dots, x_n\} \in \{0, 1\}$, por lo que se tiene es una representación de la etiqueta de forma binaria, i.e. base 2

- [2] J.S. Bell. *On the Einstein Podolski Rosen Paradox*. https://cds.cern.ch/record/111654/files/vol1p195-200_001.pdf
- [3] J. Medina. *Reporte de Seminario 1. Computación Cuántica*. https://github.com/Julio-Medina/Seminario/blob/main/Reporte_final/reporte_final.pdf
- [4] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press 2010. 10th. Anniversary Edition.
- [5] Richard P. Feynman. *Simulating Physics with Computers*. <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [6] *Qiskit Textbook*. <https://qiskit.org/textbook-beta>
- [7] N. David Mermin *Quantum Computer Science: An Introduction*. Cambridge University Press, 2007.
- [8] J.J. Sakurai *Modern Quantum Mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985.
- [9] Viktor Dotsenko. *An Introduction to the Theory of Spin Glasses and Neural Networks*. World Scientific 1994.
- [10] Yasaman Bahri, Jonathan Kadmon, Jeffrey Pennington, Sam S. Schoenholz, Jascha Sohl-Dickstein, Surya Ganguli. *Statistical Mechanics of Deep Learning*. <https://www.annualreviews.org/doi/pdf/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050745>