

$|WECIQ\ 2007\rangle$

Mini-Curso 2. Computação Quântica Básica

Carlile Lavor

Departamento de Matemática Aplicada
IMECC / UNICAMP

clavor@ime.unicamp.br

Michael Souza

Programa de Engenharia de Sistemas e Computação
COPPE / UFRJ

michael@cos.ufrj.br

2º Workshop Escola de Computação e Informação Quântica
Campina Grande - PB, Brasil, 2007.

Conteúdo

1	Introdução	2
1.1	O Bit Quântico	2
1.2	Produto Tensorial	5
1.3	Produtos Interno e Externo	9
2	Circuitos Quânticos	10
2.1	Notação e Convenções	10
2.2	Porta NOT Quântica	11
2.3	Porta Hadamard	12
2.4	Porta de Fase ou Porta S	12
2.5	Porta $\pi/8$ ou Porta T	13
2.6	Porta CNOT Quântica	13
2.7	Porta Toffoli Quântica	15
3	Algoritmo de Grover	17
3.1	Introdução	17
3.2	Operadores do Algoritmo	18
3.3	Custo Computacional do Algoritmo	27
3.4	Circuitos Quânticos do Operador G	32
3.4.1	Circuito quântico para o operador U_f	32
3.4.2	Circuito quântico para o operador $2 \psi\rangle\langle\psi - I$	33

Capítulo 1

Introdução

1.1 O Bit Quântico

Em computação quântica, utilizam-se estados quânticos em vez de estados clássicos. O bit é, então, substituído pelo bit quântico, o *q-bit*, e os valores 0 e 1 de um bit são substituídos pelos vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$, representados por

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Essa notação, utilizada em mecânica quântica, é conhecida por notação de Dirac.

A diferença entre um bit e um q-bit é que um q-bit genérico $|\psi\rangle$ pode também ser uma combinação linear dos vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$, ou seja,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \tag{1.1}$$

onde α e β são números complexos. Note que os vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$ formam uma base ortonormal do espaço vetorial \mathbb{C}^2 . Essa base é chamada de *base computacional* e o vetor $|\psi\rangle$ é chamado de *superposição* dos vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$, com *amplitudes* α e β . Em mecânica quântica, vetor é também chamado de *estado*. Usaremos os dois termos com o mesmo significado.

A interpretação física do q-bit, em (1.1), é que ele está simultaneamente nos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Isso faz com que a quantidade de informação que pode ser armazenada no estado $|\psi\rangle$ seja infinita. Entretanto, essa informação está no nível quântico. Para torná-la acessível, no nível clássico, precisamos fazer uma medida. A mecânica quântica diz que o processo de medida altera o estado de um q-bit, fazendo-o assumir o estado $|0\rangle$, com probabilidade $|\alpha|^2$, ou o estado $|1\rangle$, com probabilidade $|\beta|^2$ (isso significa que os valores α e β não podem ser conhecidos através de uma medida). Com apenas duas possibilidades, $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, temos, então,

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \tag{1.2}$$

Isso significa que a norma do vetor $|\psi\rangle$ vale 1 (vetor unitário). Resumindo: matematicamente, um q-bit é um vetor de norma 1 de \mathbb{C}^2 .

Na verdade, a definição da base computacional deveria ser

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} (1,0) \\ (0,0) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} (0,0) \\ (1,0) \end{bmatrix},$$

pois todas as coordenadas são números complexos. Para simplificar a notação, usaremos 1 para representar (1,0) e 0 para representar (0,0).

Na equação (1.2), considere $\alpha = a + i b$ ($a, b \in \mathbb{R}$) e $\beta = c + i d$ ($c, d \in \mathbb{R}$). Como $|\alpha|^2 = (\sqrt{a^2 + b^2})^2$ e $|\beta|^2 = (\sqrt{c^2 + d^2})^2$, podemos escrever

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1. \quad (1.3)$$

Nesse caso, podemos interpretar um q-bit como sendo um vetor unitário de \mathbb{R}^4 . Entretanto, existe uma representação geométrica de um q-bit em \mathbb{R}^3 : a *esfera de Bloch* (Figura 1.1). Para tanto, passemos o q-bit

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1.4)$$

de coordenadas cartesianas para coordenadas polares (como anteriormente, $\alpha = a + i b$ e $\beta = c + i d$ ($a, b, c, d \in \mathbb{R}$)). Usando as representações polares de α e β ,

$$\alpha = |\alpha| \exp(i\gamma) \quad \text{e} \quad \beta = |\beta| \exp(i(\gamma + \varphi)),$$

e definindo

$$\cos(\theta/2) = |\alpha| \quad \text{e} \quad \sin(\theta/2) = |\beta|,$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \theta &= 2 \arccos(\sqrt{a^2 + b^2}) = 2 \arcsen(\sqrt{c^2 + d^2}), \\ \varphi &= \arg(\beta) - \arg(\alpha), \\ \gamma &= \arg(\alpha), \end{aligned} \quad (1.5)$$

podemos, finalmente, escrever

$$|\psi\rangle = \exp(i\gamma)[\cos(\theta/2) |0\rangle + \exp(i\varphi) \sin(\theta/2) |1\rangle]. \quad (1.6)$$

Para fins de representação, vamos desconsiderar o termo externo aos colchetes, $\exp(i\gamma)$, também chamado *fator de fase global*. Uma razão que permite essa simplificação é que o valor do quadrado do módulo das amplitudes de um q-bit não se altera, quando excluimos esse fator. Por exemplo:

$$|\alpha|^2 = |\exp(i\gamma) \cos(\theta/2)|^2 = |\exp(i\gamma)|^2 |\cos(\theta/2)|^2 = |\cos(\theta/2)|^2,$$

o mesmo ocorrendo com $|\beta|^2$. Ficamos, então, com uma representação de três parâmetros: dois explícitos, θ e φ , e um implícito, o comprimento do vetor, que

é sempre igual a um. Esses parâmetros podem ser utilizados para obtermos uma representação polar no \mathbb{R}^3 , da forma

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \varphi \sen \theta \\ \sen \varphi \sen \theta \\ \cos \theta \end{bmatrix},$$

onde $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi < 2\pi$.

Usando essas convenções, a representação da base computacional, na esfera de Bloch (Figura 1.1), será:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Ou seja, $|0\rangle$ será o pólo norte da esfera e $|1\rangle$ será seu pólo sul.

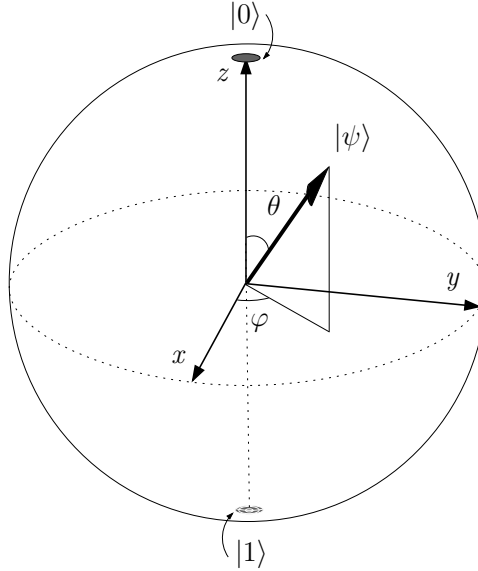


Figura 1.1: Esfera de Bloch.

Dessa forma, todos os estados de um q-bit podem ser representados (a menos de um fator multiplicativo) na esfera de Bloch. Por exemplo, os estados $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, que serão utilizados mais à frente, são representados por $(1, 0, 0)$ e $(-1, 0, 0)$, respectivamente.

Há outro tipo de fenômeno que ocorre com um estado quântico, além daquele ocasionado por sua medida. A mecânica quântica também nos diz que a evolução no tempo de um sistema quântico isolado é descrita matematicamente por uma

transformação linear. Ora, sistemas quânticos isolados são descritos por vetores unitários, e, como sabemos da álgebra linear, as funções que transformam vetores unitários em vetores unitários do mesmo espaço vetorial são as *transformações unitárias*.

Transformações lineares unitárias U podem ser definidas (há outras definições equivalentes) como aquelas que atendam à seguinte propriedade:

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I,$$

onde $U^\dagger = (U^*)^T$, com $*$ indicando a conjugação complexa, e T indicando a transposição matricial. U^\dagger é denominada *transformação adjunta* de U . Desse ponto em diante, faremos referência indistintamente à transformação U e à matriz que a representa usando a mesma notação, salvo indicação explícita. Usaremos, também, o termo operador com esse mesmo significado. Com isso, quando escrevermos $U|\psi\rangle$, estaremos falando tanto da aplicação de U , quanto da multiplicação da matriz U pelo estado $|\psi\rangle$.

Resumindo: temos, então, duas interações básicas de um computador quântico com os dados de entrada: transformação unitária e medida. A primeira, atuando no nível quântico, e a segunda, fazendo a ligação entre o mundo quântico e o clássico.

1.2 Produto Tensorial

Para considerarmos estados com mais de um q-bit, precisamos introduzir o conceito de *produto tensorial*. Há vários graus de generalidade para a introdução dessa definição. Usaremos, aqui, a mais simples e que será plenamente suficiente para os nossos propósitos.

O produto tensorial de dois estados

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_m \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad |\varphi\rangle = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_p \end{bmatrix},$$

denotado por $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$, tem como resultado o estado $|\chi\rangle$ com mp -linhas, dado por

$$|\chi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1\varphi_1 \\ \psi_1\varphi_2 \\ \vdots \\ \psi_1\varphi_p \\ \psi_2\varphi_1 \\ \psi_2\varphi_2 \\ \vdots \\ \psi_2\varphi_p \\ \vdots \\ \psi_m\varphi_1 \\ \psi_m\varphi_2 \\ \vdots \\ \psi_m\varphi_p \end{bmatrix}, \quad (1.7)$$

onde $\psi_i\varphi_j$ é o produto usual dos complexos.

Usaremos, também, outras notações mais simplificadas para o produto tensorial $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$. São elas: $|\psi\rangle|\varphi\rangle$, $|\psi, \varphi\rangle$ e $|\psi\varphi\rangle$. Por exemplo:

$$|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

e

$$|10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Note que o produto tensorial não é comutativo.

O produto tensorial pode ser estendido para matrizes quaisquer. Dadas as matrizes $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ e $B \in \mathbb{C}^{p \times q}$, a matriz $A \otimes B \in \mathbb{C}^{mp \times nq}$ é definida por

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \cdots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \cdots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \cdots & A_{mn}B \end{bmatrix}, \quad (1.8)$$

onde A_{ij} é o elemento da linha i e da coluna j de A . De forma mais precisa, porém mais criptográfica, cada elemento da matriz $A \otimes B$ é definido por

$$(A \otimes B)_{rs} = A_{ij}B_{kl}, \quad (1.9)$$

onde $r = (i-1)p + k$ e $s = (j-1)q + l$, com os índices variando da seguinte forma: $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$, $1 \leq k \leq p$, $1 \leq l \leq q$.

Por exemplo, se

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

então

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

A seguir, damos algumas propriedades do produto tensorial que serão utilizadas ao longo do texto (considere $z \in \mathbb{C}$, $v, v_1, v_2 \in \mathbb{C}^n$ e $w, w_1, w_2 \in \mathbb{C}^m$):

1. $z(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (z|v\rangle) \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (z|w\rangle)$,
2. $(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = (|v_1\rangle \otimes |w\rangle) + (|v_2\rangle \otimes |w\rangle)$,
3. $|v\rangle \otimes (|w_1\rangle + |w_2\rangle) = (|v\rangle \otimes |w_1\rangle) + (|v\rangle \otimes |w_2\rangle)$.

Dadas duas transformações lineares A e B , podemos definir um novo operador linear, $A \otimes B$, por

$$(A \otimes B)(|u\rangle \otimes |w\rangle) = A|u\rangle \otimes B|w\rangle, \quad (1.10)$$

desde que garantidas as dimensões corretas para possibilitar as multiplicações das matrizes pelos vetores.

Ainda, introduzindo mais algumas notações, diremos que $|\psi\rangle^{\otimes n}$ e $A^{\otimes n}$ são os produtos tensoriais de $|\psi\rangle$, por ele próprio n vezes, e de A , por ela própria n vezes, respectivamente.

Vejam, agora, a descrição de um estado genérico $|\psi\rangle$ de 2 q-bits. Esse será uma superposição dos estados $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ e $|11\rangle$ (estamos usando a notação simplificada para o produto tensorial entre dois estados de 1 q-bit), ou seja,

$$|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle, \quad (1.11)$$

onde

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1.$$

Visando a reduzir a notação, podemos considerar os zeros e uns que aparecem na equação (1.11) como números binários, e assim,

$$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$$

podem ser abreviados por

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle,$$

usando a notação decimal. É claro que o $|0\rangle$ acima não é o mesmo que aparece na definição de um q-bit, pois têm dimensões diferentes. Em cada caso, o contexto esclarecerá a que situação estamos nos referindo.

Em geral, um estado $|\psi\rangle$ de n q-bits é uma superposição de 2^n estados da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |2^n - 1\rangle\}$, dada por

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} \alpha_i |i\rangle,$$

com as amplitudes α_i atendendo a

$$\sum_{i=0}^{2^n-1} |\alpha_i|^2 = 1.$$

Como havíamos comentado anteriormente, a medição do estado genérico $|\psi\rangle$ produz um resultado $|i_0\rangle$ com probabilidade $|\alpha_{i_0}|^2$, com $0 \leq i_0 \leq 2^n - 1$. Usualmente, a medida é realizada q-bit a q-bit, produzindo zeros e uns que são lidos em conjunto, gerando a saída $|i_0\rangle$. Repetiremos, aqui, uma propriedade central do processo de medida. O estado $|\psi\rangle$, antes da medição, é inacessível, a não ser que ele pertença à base computacional. O procedimento de medida altera inevitavelmente $|\psi\rangle$, forçando-o a um colapso para algum dos vetores da base computacional. Este colapso, como vimos, é não-determinístico, com probabilidades dadas pelos quadrados dos módulos das amplitudes de $|\psi\rangle$.

Consideremos, agora, outro conceito fundamental em computação quântica: o *emaranhamento*. Um estado de 2 q-bits, em geral, não é o produto tensorial de estados de 1 q-bit. Quando isso acontece, dizemos que o estado está emaranhado. Por exemplo, o estado $|01\rangle$ pode, obviamente, ser descrito como produto tensorial dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, isto é,

$$|01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

No entanto, o estado

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

é um estado emaranhado, pois não pode ser descrito como produto tensorial de estados de 1 q-bit.

1.3 Produtos Interno e Externo

Podemos definir o *produto interno* entre os estados $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbb{C}^n$, denotado por $\langle\varphi|\psi\rangle$, como sendo o produto matricial entre $|\varphi\rangle^\dagger$ e $|\psi\rangle$, ou seja,

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle)^\dagger |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \varphi_i^* \psi_i. \quad (1.12)$$

O estado $|\varphi\rangle^\dagger$ é chamado *dual* de $|\varphi\rangle$ e denotado por $\langle\varphi|$ ($|\varphi\rangle$ e $\langle\varphi|$ são denominados *ket* e *bra*, respectivamente).

O produto interno satisfaz às seguintes propriedades:

1. $\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*$,
2. $\langle\varphi|(a|u\rangle + b|v\rangle)\rangle = a\langle\varphi|u\rangle + b\langle\varphi|v\rangle$,
3. $\langle\varphi|\varphi\rangle > 0$ (se $|\varphi\rangle \neq 0$),

com $a, b \in \mathbb{C}$ e $|\varphi\rangle, |\psi\rangle, |u\rangle, |v\rangle \in \mathbb{C}^n$.

A *norma* de um estado $|\varphi\rangle$ pode, então, ser definida por

$$\| |\varphi\rangle \| = \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}.$$

Podemos, também, definir o *produto externo* entre os estados $|\varphi\rangle \in \mathbb{C}^m$ e $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^n$, denotado por $|\varphi\rangle\langle\psi|$, como sendo o produto matricial de $|\varphi\rangle$ por $\langle\psi|$, ou seja,

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = |\varphi\rangle(|\psi\rangle)^\dagger.$$

Note que $|\varphi\rangle\langle\psi|$ é uma matriz de ordem $m \times n$.

Como exemplos das definições acima, considere os estados de 1 q-bit

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

e

$$|\psi\rangle = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle.$$

Temos, então,

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma \\ \delta \end{bmatrix} = \alpha^* \gamma + \beta^* \delta,$$

para o produto interno, e

$$|\varphi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma^* & \delta^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha\gamma^* & \alpha\delta^* \\ \beta\gamma^* & \beta\delta^* \end{bmatrix},$$

para o produto externo.

Usando o produto interno, podemos definir o *ângulo* θ entre dois vetores unitários $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbb{R}^n$ por

$$\theta = \arccos(\langle\varphi|\psi\rangle). \quad (1.13)$$

Observe que, usando essa definição, $\theta \in [0, \pi]$.

Capítulo 2

Circuitos Quânticos

2.1 Notação e Convenções

Para apresentar as convenções usadas em circuitos quânticos, vamos utilizar um circuito (porta U-controlada) em que a entrada e a saída são um estado de 2 q-bits (Figura 2.1).

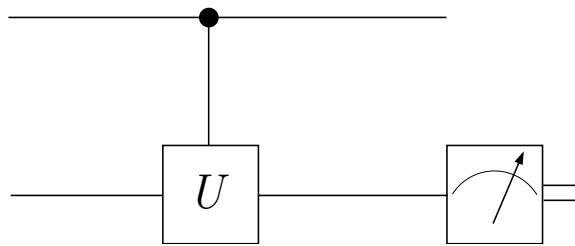


Figura 2.1: Porta quântica U-controlada.

Entrada: pode ser o produto tensorial entre os q-bits de entrada ou um estado emaranhado (os q-bits não devem ser considerados individualmente).

Linhas horizontais: as linhas que aparecem não são necessariamente fios. Elas representam a evolução de um q-bit, podendo ser apenas a passagem do tempo ou, por exemplo, o deslocamento de um fóton.

Sentido: o circuito descreve a evolução do sistema quântico no tempo, da esquerda para a direita. Com isso, não há sentido em aparecer retroalimentação, que pode ocorrer em um circuito clássico.

Linhas verticais: o segmento vertical que aparece unindo os símbolos \bullet e \boxed{U} informa que o circuito atua simultaneamente nos dois q-bits. A linha vertical

representa o sincronismo, e não o envio de informação. Portanto, não são permitidas nem junções, nem bifurcações de q-bits.

Controle: o símbolo \bullet indica que o q-bit representado nessa linha é um q-bit de controle, ou seja, caso esteja no estado $|1\rangle$, a porta U realiza a operação; caso esteja no estado $|0\rangle$, a porta U não realiza operação alguma. Caso o q-bit de controle seja um estado superposto ou os 2 q-bits estejam emaranhados, não é possível compreender o comportamento individual do q-bit de controle e do q-bit alvo. Devemos considerar a ação do operador unitário, que representa todo o circuito, atuando simultaneamente nos 2 q-bits.

Saída: os q-bits que compõem a saída do circuito podem ou não ser medidos. Como o q-bit inferior está sendo medido (o símbolo de medida está indicado na Figura 2.1), o resultado será 0 ou 1.

Vistas as principais convenções, vamos apresentar algumas portas quânticas. Começemos por portas de 1 q-bit. No caso clássico, há apenas uma possibilidade: a porta NOT. O mesmo não ocorre nos circuitos quânticos, como veremos.

Antes de prosseguir, façamos uma observação. A importância do estudo de portas lógicas em computação quântica baseia-se no fato de que toda matriz unitária 2×2 pode ser representada por um circuito quântico de 1 q-bit e vice-versa. Sendo assim, a evolução no tempo de um sistema quântico isolado, dado por um q-bit, pode ser representada tanto matematicamente (por uma transformação unitária) quanto logicamente (por um circuito quântico).

2.2 Porta NOT Quântica

No caso clássico, a porta NOT troca o 1 por 0 e vice-versa. A generalização para o caso quântico é dada por um operador X que satisfaz

$$X|0\rangle = |1\rangle \quad \text{e} \quad X|1\rangle = |0\rangle. \quad (2.1)$$

Com isso, verifica-se facilmente que a representação matricial do operador X é dada por

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Com a porta NOT quântica, temos situações sem contrapartida no caso clássico, pois, se a entrada $|\varphi\rangle$ for uma superposição dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$,

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

a saída será

$$X|\varphi\rangle = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle.$$

A porta X é apenas uma das portas de 1 q-bit, já que há infinitas matrizes unitárias 2×2 .

2.3 Porta Hadamard

Uma outra porta de 1 q-bit, largamente utilizada, é a porta Hadamard H , definida pelo operador

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Aplicando H no estado $|0\rangle$, obtemos

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle),$$

que é uma superposição dos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$, onde a probabilidade de se obter um dos estados, ao se fazer uma medida do estado $H|0\rangle$, é a mesma: 50%. Aplicando o operador H em cada q-bit de um registrador com 2 q-bits no estado $|00\rangle$, temos:

$$\begin{aligned} H^{\otimes 2}|00\rangle &= H|0\rangle \otimes H|0\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right) \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle). \end{aligned}$$

Em notação decimal,

$$H^{\otimes 2}|00\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle).$$

Generalizando para estados com n q-bits, obtemos:

$$\begin{aligned} H^{\otimes n}|0\dots 0\rangle &= (H|0\rangle)^{\otimes n} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right)^{\otimes n} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{i=0}^{2^n-1} |i\rangle. \end{aligned}$$

Esse resultado será importante no algoritmo de Grover.

2.4 Porta de Fase ou Porta S

A matriz unitária associada à porta S é

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix},$$

onde i é a unidade imaginária ($i^2 = -1$). A porta S pode também ser representada por

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/2) \end{bmatrix},$$

já que $\exp(i\pi/2) = \cos(\pi/2) + i \sin(\pi/2) = i$.

Aplicando S em um estado genérico

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

obtemos

$$S|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + i\beta|1\rangle.$$

Note que, se for feita uma medida do estado $S|\psi\rangle$, as probabilidades de se obter os estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ serão as mesmas, comparadas com uma medida realizada sobre o estado $|\psi\rangle$. Isso não acontece, por exemplo, usando a porta H .

2.5 Porta $\pi/8$ ou Porta T

A matriz unitária associada à porta T é

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/4) \end{bmatrix},$$

que poderia ser representada, também, na forma

$$T = \exp(i\pi/8) \begin{bmatrix} \exp(-i\pi/8) & 0 \\ 0 & \exp(i\pi/8) \end{bmatrix}.$$

Aplicando T em um estado genérico

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle,$$

obtemos

$$T|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \exp(i\pi/4)\beta|1\rangle.$$

Também, nesse caso, se for feita uma medida do estado $T|\psi\rangle$, as probabilidades de se obter os estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$ serão as mesmas, comparadas com uma medida realizada sobre o estado $|\psi\rangle$.

2.6 Porta CNOT Quântica

A porta CNOT Quântica tem 2 q-bits de entrada, o de controle e o alvo (Figura 2.2). Uma porta controlada, como já vimos (Figura 2.1), age dependendo do valor do q-bit de controle. Ela é “ativada” se o q-bit de controle estiver no estado $|1\rangle$, e nada faz, se ele estiver no estado $|0\rangle$. Essa descrição é adequada apenas quando o q-bit de controle está nos estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Entretanto, os q-bits alvo e de controle podem ser estados superpostos, e, além disso, os dois q-bits podem estar emaranhados.

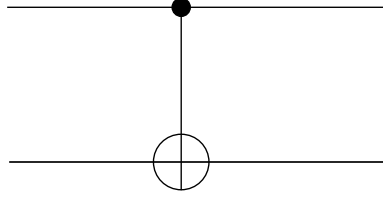


Figura 2.2: Porta CNOT quântica.

A ação da porta CNOT pode ser caracterizada pelas transformações operadas nos elementos da base computacional associada, ou seja,

$$\begin{aligned} |00\rangle &\rightarrow |00\rangle, \\ |01\rangle &\rightarrow |01\rangle, \\ |10\rangle &\rightarrow |11\rangle, \\ |11\rangle &\rightarrow |10\rangle. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Note que podemos representar essa ação na base computacional de forma mais esquemática por

$$|i, j\rangle \rightarrow |i, i \oplus j\rangle, \tag{2.4}$$

onde $i, j \in \{0, 1\}$ e \oplus é a adição módulo 2.

Para obtermos a matriz U_{CNOT} associada à porta CNOT, basta usarmos os valores dados em (2.3), isto é,

$$\begin{aligned} U_{CNOT} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, & U_{CNOT} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ U_{CNOT} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, & U_{CNOT} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

que resulta em

$$U_{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \tag{2.5}$$

Um resultado importante sobre circuitos quânticos é que qualquer operador unitário pode ser representado usando portas CNOT e portas de 1 q-bit.

2.7 Porta Toffoli Quântica

A próxima porta, a Toffoli quântica, também é uma porta controlada, só que nesse caso, com dois q-bits de controle (Figura 2.3). Sua ação na base computacional associada pode ser representada por

$$|i, j, k\rangle \rightarrow |i, j, k \oplus ij\rangle,$$

onde $i, j, k \in \{0, 1\}$ e \oplus é a adição módulo 2. Observe que, nesse caso, a base computacional possui 8 elementos.

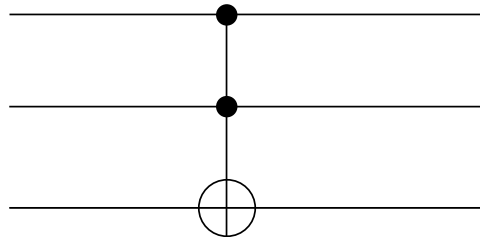


Figura 2.3: Porta Toffoli quântica.

A porta Toffoli é usada para simplificar a representação de circuitos quânticos. Como já sabemos, ela pode ser descrita usando portas de 1 q-bit e portas CNOT. Uma representação possível é dada na Figura 2.4.

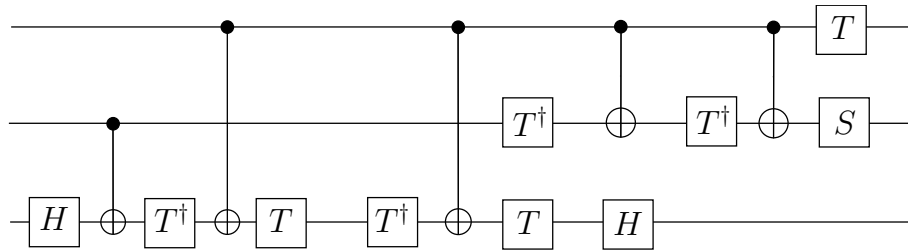


Figura 2.4: Decomposição da porta Toffoli em portas de 1 q-bit e portas CNOT.

Para simplificar ainda mais a representação de circuitos quânticos, temos também a porta Toffoli generalizada (Figura 2.5), que será utilizada no capítulo seguinte.

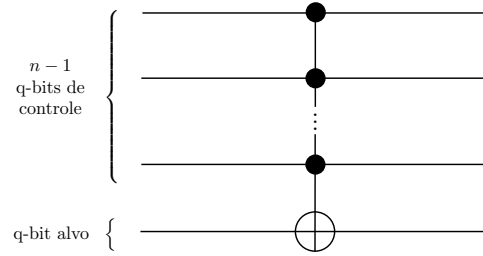


Figura 2.5: Porta Toffoli generalizada.

A decomposição da porta Toffoli generalizada, em termos de portas Toffoli simples, é mostrada na Figura 2.6. Os $n-2$ q-bits de trabalho são q-bits extras, cujas entradas são conhecidas antecipadamente. São utilizados para simplificar a decomposição.

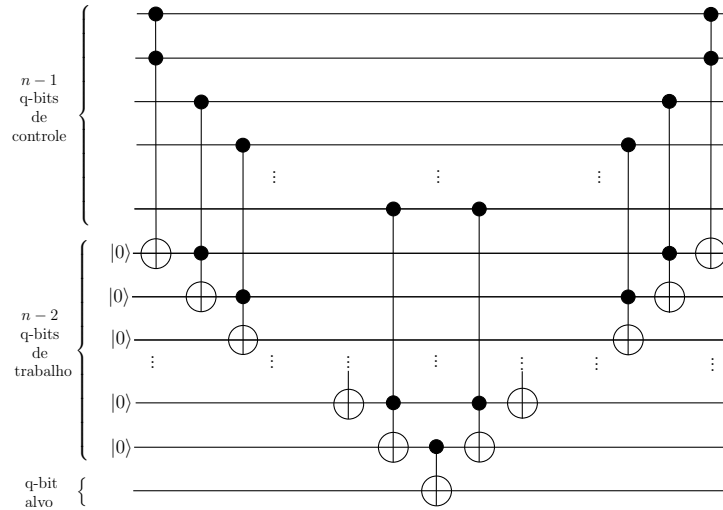


Figura 2.6: Porta Toffoli generalizada decomposta em portas Toffoli simples.

Capítulo 3

Algoritmo de Grover

3.1 Introdução

Considere o seguinte problema: temos uma lista não ordenada com N elementos e desejamos encontrar um elemento específico que está na lista. Classicamente, deveríamos testar elemento a elemento. No pior caso possível, precisaríamos realizar N testes. Como veremos, usando as propriedades da mecânica quântica, a quantidade de “testes” necessários para a identificação do elemento procurado será proporcional a \sqrt{N} . Este resultado será obtido usando o algoritmo de Grover.

Para representar matematicamente o problema, vamos supor que a busca será realizada sobre a lista $\{0, 1, \dots, N-1\}$, onde $N = 2^n$ para algum número natural n , e que a função

$$f : \{0, 1, \dots, N-1\} \rightarrow \{0, 1\},$$

definida por

$$f(i) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = i_0, \\ 0, & \text{se } i \neq i_0, \end{cases} \quad (3.1)$$

será utilizada para o reconhecimento do elemento procurado i_0 (assumiremos que existe um único elemento $i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ tal que $f(i) = 1$). Dessa forma, o custo computacional para resolver o problema está associado ao número de vezes que a função f deve ser “utilizada”. Imagine a função f como sendo um oráculo que está à disposição para informar se um dado elemento é ou não o elemento procurado.

O algoritmo de Grover utiliza dois registradores quânticos (Figura 3.1): o primeiro, com n q-bits, inicializado no estado $|0\dots 0\rangle$, e o segundo, com 1 q-bit, inicializado no estado $|1\rangle$. O primeiro registrador está relacionado aos elementos da lista onde será feita a busca, enquanto que o segundo é um registrador que terá um papel fundamental, como veremos. A cada elemento i da lista $\{0, 1, \dots, N-1\}$, associaremos o estado $|i\rangle$ de n q-bits.

3.2 Operadores do Algoritmo

Antes da execução propriamente dita do algoritmo, o primeiro registrador é alterado para formar uma superposição de todos os estados associados aos elementos da lista. Isso pode ser obtido aplicando o operador Hadamard H (2.2) em cada q-bit do primeiro registrador (Figura 3.1).

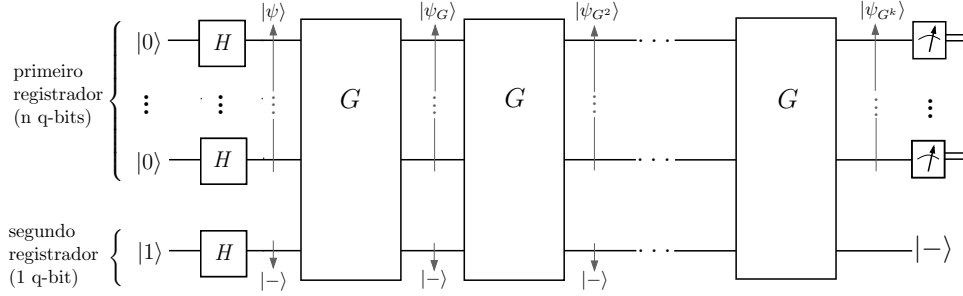


Figura 3.1: Esquema genérico para o algoritmo de Grover (G é um operador unitário que será definido mais adiante).

A superposição obtida será denotada por $|\psi\rangle$, ou seja,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle. \quad (3.2)$$

Observe que aplicando n vezes o operador H , obtemos uma superposição de $N = 2^n$ estados com mesma amplitude.

Para completar a inicialização do algoritmo, o operador H também é aplicado sobre o estado inicial do segundo registrador (Figura 3.1). Denotando o resultado por $|-\rangle$, temos:

$$|-\rangle = H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (3.3)$$

Já sabemos que qualquer alteração de um sistema quântico isolado (que não seja uma medida) é descrita por um operador unitário. Para “representar” quanticamente a função f , em (3.1), utilizada para a identificação do elemento procurado, imaginemos, então, um operador linear U_f que transforme $|i\rangle$ em $|f(i)\rangle$, onde $|i\rangle$ é o estado de n q-bits do primeiro registrador. Como U_f deve ser unitário, a “entrada” e a “saída” de U_f devem ter a mesma dimensão. Considere, então,

$$|i\rangle|0\rangle \xrightarrow{U_f} |i\rangle|f(i)\rangle, \quad (3.4)$$

onde, na “entrada” e na “saída”, o primeiro registrador tem n q-bits e o segundo apenas 1 q-bit. Usando (3.4), temos:

$$U_f(|i\rangle|0\rangle) = \begin{cases} |i\rangle|1\rangle, & \text{se } i = i_0, \\ |i\rangle|0\rangle, & \text{se } i \neq i_0. \end{cases} \quad (3.5)$$

Ou seja, o operador U_f altera o estado do segundo registrador quando o primeiro registrador representa o elemento procurado. Para completar a definição, precisamos definir o valor de $U_f(|i\rangle|1\rangle)$. Mantendo a mesma idéia, definimos:

$$U_f(|i\rangle|1\rangle) = \begin{cases} |i\rangle|0\rangle, & \text{se } i = i_0, \\ |i\rangle|1\rangle, & \text{se } i \neq i_0. \end{cases} \quad (3.6)$$

Com isso, U_f fica bem definido, pois, sendo um operador linear, basta defini-lo nos elementos da base. Note que a base é formada usando o produto tensorial. Por exemplo, para uma lista com 4 elementos (o primeiro registrador terá 2 q-bits), a base será

$$\{|0\rangle|0\rangle, |0\rangle|1\rangle, |1\rangle|0\rangle, |1\rangle|1\rangle, |2\rangle|0\rangle, |2\rangle|1\rangle, |3\rangle|0\rangle, |3\rangle|1\rangle\},$$

ou melhor,

$$\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}.$$

Para facilitar os cálculos a seguir, representaremos (3.5) e (3.6) de uma única maneira, isto é,

$$U_f(|i\rangle|j\rangle) = |i\rangle|j \oplus f(i)\rangle, \quad (3.7)$$

onde $|i\rangle$ é o estado de n q-bits do primeiro registrador ($i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$), $|j\rangle$ é o estado de 1 q-bit do segundo registrador ($j \in \{0, 1\}$) e \oplus é a soma módulo 2. Note que $U_f \in \mathbb{C}^{(2^{n+1} \times 2^{n+1})}$.

O operador U_f foi definido para simular quanticamente o papel da função f (3.1). Para identificar o elemento procurado i_0 , bastaria aplicar U_f em cada estado associado aos elementos da lista e manter o segundo registrador no estado $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Quando o estado do segundo registrador fosse alterado, saberíamos que o elemento buscado teria sido encontrado. Neste caso, o estado do primeiro registrador seria $|i_0\rangle$. No entanto, isso não proporcionaria ganho algum em relação ao caso clássico, usando a função f . O que vai fazer diferença é que podemos também aplicar U_f em estados superpostos. Vejamos.

O próximo passo do algoritmo é aplicar o operador U_f sobre o estado $|\psi\rangle|-\rangle$, resultante da inicialização (Figura 3.2). Ou seja,

$$U_f(|\psi\rangle|-\rangle) = U_f\left(\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle\right) |-\rangle\right).$$

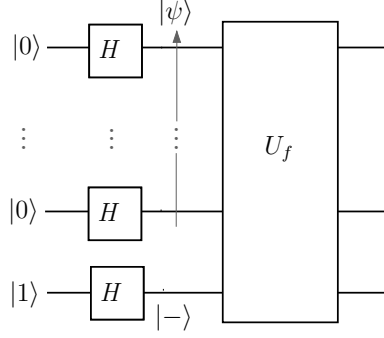


Figura 3.2: Aplicação do operador U_f sobre o estado $|\psi\rangle|-\rangle$.

Usando a distributividade do produto tensorial em relação à adição de vetores,

$$U_f(|\psi\rangle|-\rangle) = U_f\left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle|-\rangle\right).$$

Da linearidade do operador U_f ,

$$U_f(|\psi\rangle|-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} U_f(|i\rangle|-\rangle).$$

Substituindo a definição do estado $|-\rangle$, dada em (3.3), na expressão acima, obtemos:

$$\begin{aligned} U_f(|\psi\rangle|-\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} U_f\left(|i\rangle\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)\right)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} U_f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|i\rangle|0\rangle - |i\rangle|1\rangle)\right). \end{aligned}$$

Novamente, da linearidade de U_f ,

$$U_f(|\psi\rangle|-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{2}} (U_f(|i\rangle|0\rangle) - U_f(|i\rangle|1\rangle)).$$

Da definição de U_f , em (3.7), temos:

$$\begin{aligned} U_f(|\psi\rangle|-\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{2}} (|i\rangle|f(i)\rangle - |i\rangle|1 \oplus f(i)\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{2}} (|i\rangle(|f(i)\rangle - |1 \oplus f(i)\rangle)). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Da definição de f , em (3.1),

$$|i\rangle (|f(i)\rangle - |1 \oplus f(i)\rangle) = \begin{cases} |i\rangle (|1\rangle - |0\rangle), & \text{se } i = i_0, \\ |i\rangle (|0\rangle - |1\rangle), & \text{se } i \neq i_0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Substituindo a expressão anterior em (3.8), temos:

$$U_f (|\psi\rangle|-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|i\rangle (|0\rangle - |1\rangle)) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|i_0\rangle (|1\rangle - |0\rangle)) \right).$$

Novamente, da definição de $|-\rangle$,

$$\begin{aligned} U_f (|\psi\rangle|-\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\left(\sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} |i\rangle|-\rangle \right) - |i_0\rangle|-\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{f(i)} |i\rangle|-\rangle \right). \end{aligned}$$

Ou ainda,

$$U_f (|\psi\rangle|-\rangle) = \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{f(i)} |i\rangle \right) |-\rangle. \quad (3.10)$$

Note que o estado do segundo registrador não se altera (como visto acima, isso não quer dizer que ele seja desnecessário!). O estado do primeiro registrador continua sendo uma superposição de todos os estados associados aos elementos da lista. Entretanto, a amplitude do elemento procurado foi alterada de $\frac{1}{\sqrt{N}}$ para $-\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Após a aplicação do operador U_f , um fato interessante ocorreu. Além da função f ter sido “avaliada” em todos os elementos da lista onde está sendo feita a busca, com apenas uma aplicação de U_f (este fenômeno é conhecido como *paralelismo quântico*), o estado associado ao elemento procurado foi “identificado” como sendo o único que teve sua amplitude alterada. No entanto, essa informação só está disponível quanticamente. Não adiantaria fazer uma medida do primeiro registrador, pois a probabilidade de se obter o elemento procurado é

$$\left| \frac{-1}{\sqrt{N}} \right|^2 = \frac{1}{N}.$$

Antes de prosseguirmos, consideremos a seguinte questão: a aplicação do operador U_f sobre um estado qualquer, no primeiro registrador, ainda mantém o segundo registrador no estado $|-\rangle$? Vejamos.

Seja $|i\rangle$, um estado qualquer da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$. Usando as definições do operador U_f e do estado $|-\rangle$, temos:

$$\begin{aligned} U_f(|i\rangle|-\rangle) &= U_f\left(|i\rangle\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)\right)\right) \\ &= U_f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|i\rangle|0\rangle - |i\rangle|1\rangle)\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_f(|i\rangle|0\rangle) - U_f(|i\rangle|1\rangle)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|i\rangle|f(i)\rangle - |i\rangle|1 \oplus f(i)\rangle). \end{aligned}$$

Da mesma forma que fizemos no cálculo de $U_f(|\psi\rangle|-\rangle)$, obtemos:

$$U_f(|i\rangle|-\rangle) = (-1)^{f(i)}|i\rangle|-\rangle.$$

Ou seja,

$$U_f(|i\rangle|-\rangle) = \begin{cases} -|i\rangle|-\rangle, & \text{se } i = i_0, \\ |i\rangle|-\rangle, & \text{se } i \neq i_0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Usando este resultado e aplicando U_f sobre um vetor unitário qualquer

$$|v\rangle = \sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle + \alpha_{i_0} |i_0\rangle,$$

gerado pelos elementos da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$, no primeiro registrador, e mantendo o estado $|-\rangle$, no segundo registrador, temos:

$$\begin{aligned} U_f\left(\left(\sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle + \alpha_{i_0} |i_0\rangle\right)|-\rangle\right) &= U_f\left(\sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle|-\rangle + \alpha_{i_0} |i_0\rangle|-\rangle\right) \\ &= \sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i U_f(|i\rangle|-\rangle) + \alpha_{i_0} U_f(|i_0\rangle|-\rangle) \\ &= \sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle|-\rangle - \alpha_{i_0} |i_0\rangle|-\rangle \\ &= \left(\sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle - \alpha_{i_0} |i_0\rangle\right)|-\rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Conclusão: a aplicação de U_f sobre o estado $|v\rangle|-\rangle$ não altera o estado do segundo registrador. Portanto, para simplificar os cálculos, sempre que o estado do segundo registrador for $|-\rangle$, como é o caso no algoritmo de Grover, omitiremos o segundo

registrador. É importante destacar que o estado $|-\rangle$ é fundamental no processo de marcação do elemento procurado.

Voltemos ao algoritmo. Com o elemento a ser buscado já identificado quanticamente, o próximo passo será aumentar a probabilidade de esse elemento ser obtido, após uma medida.

O novo estado do primeiro registrador será denotado por $|\psi_1\rangle$, isto é,

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} (-1)^{f(i)} |i\rangle. \quad (3.13)$$

Olhando com mais cuidado o resultado da aplicação de U_f sobre o estado $|v\rangle|-\rangle$, em (3.12), podemos obter uma interpretação geométrica do efeito do operador U_f sobre o primeiro registrador: a aplicação de U_f sobre um vetor unitário qualquer gerado pelos elementos da base computacional $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$ resulta numa reflexão desse vetor em relação ao subespaço ortogonal a $|i_0\rangle$, gerado por todos os outros elementos da base computacional. Para “visualizar” esse resultado, podemos considerar essa reflexão como uma reflexão em relação à projeção de $|v\rangle$ sobre o subespaço ortogonal a $|i_0\rangle$. Considerando o vetor unitário na direção dessa projeção, denotado por $|u\rangle$, temos:

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} |i\rangle, \quad (3.14)$$

que pode ser representado por

$$|u\rangle = \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N-1}} |\psi\rangle - \frac{1}{\sqrt{N-1}} |i_0\rangle. \quad (3.15)$$

Para completar a visualização, calculemos os ângulos entre $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$ e entre $|u\rangle$ e $|i_0\rangle$. Usando o produto interno, temos:

$$\langle \psi | i_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} \langle i | i_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle i_0 | i_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (3.16)$$

e

$$\langle u | i_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=0, i \neq i_0}^{N-1} \langle i | i_0 \rangle = 0. \quad (3.17)$$

Ou seja, o ângulo entre $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$ é menor do que $\pi/2$ rad (se N é grande, o ângulo é quase $\pi/2$ rad) e o ângulo entre $|u\rangle$ e $|i_0\rangle$ é exatamente $\pi/2$ rad. Usando os resultados (3.16), (3.17) e a expressão dada em (3.15), podemos, finalmente, obter uma representação geométrica para a ação do operador U_f sobre o estado $|\psi\rangle$, dada na Figura 3.3.

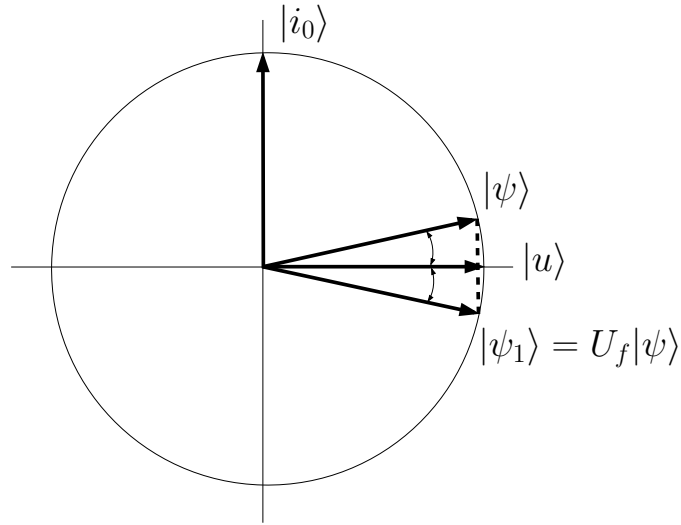


Figura 3.3: Ação de U_f sobre o estado $|\psi\rangle$.

Induzidos por essa representação, poderíamos, então, refletir o vetor $|\psi_1\rangle$ em relação ao vetor $|\psi\rangle$, para aumentar a amplitude do elemento procurado $|i_0\rangle$, em relação à sua amplitude no estado $|\psi\rangle$ (Figura 3.4).

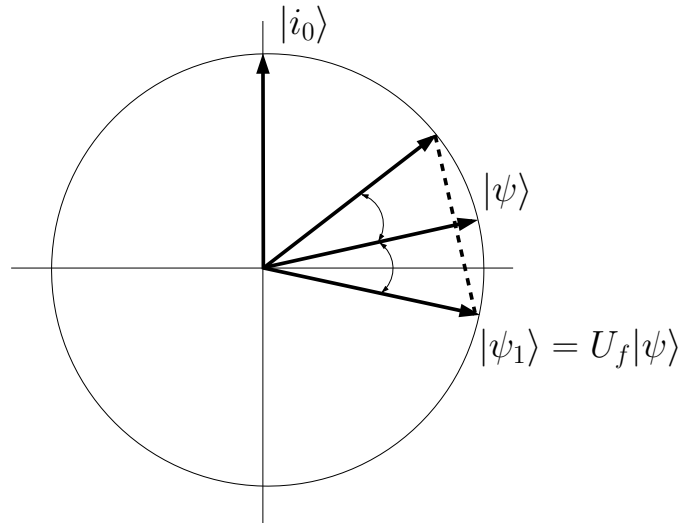


Figura 3.4: Reflexão de $|\psi_1\rangle$ em relação a $|\psi\rangle$.

Uma observação importante: como todas as amplitudes dos estados envolvidos no algoritmo de Grover são números reais, o produto interno sempre resultará em

um número real. Isso possibilita a comparação entre ângulos de dois pares de estados quaisquer. A partir de agora, teremos em mente esse fato.

A projeção de $|\psi_1\rangle$ sobre $|\psi\rangle$ é dada por $\langle\psi|\psi_1\rangle|\psi\rangle$. Motivados pelo losango abaixo (Figura 3.5), vemos que o vetor resultante da reflexão de $|\psi_1\rangle$ em relação a $|\psi\rangle$ pode ser descrito como

$$(2\langle\psi|\psi_1\rangle)|\psi\rangle - |\psi_1\rangle. \quad (3.18)$$

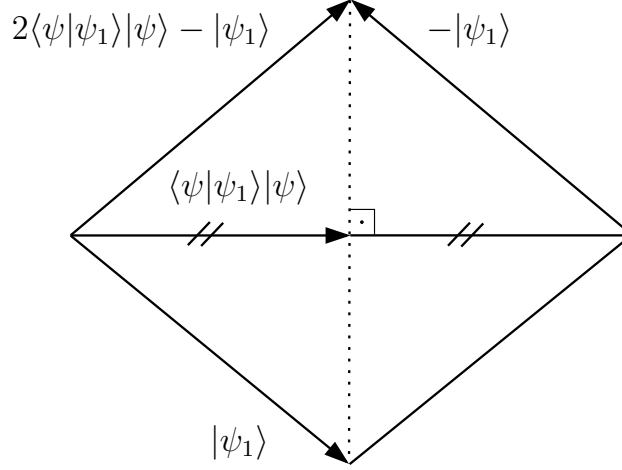


Figura 3.5: Reflexão de $|\psi_1\rangle$ em relação a $|\psi\rangle$.

O que desejamos é obter um novo operador que produza essa reflexão. Reescrevendo a expressão acima, obtemos:

$$(2\langle\psi|\psi_1\rangle)|\psi\rangle - |\psi_1\rangle = (2|\psi\rangle\langle\psi|)|\psi_1\rangle - |\psi_1\rangle = (2|\psi\rangle\langle\psi| - I)|\psi_1\rangle.$$

Ou seja, o operador que procuramos é

$$2|\psi\rangle\langle\psi| - I, \quad (3.19)$$

onde I é o operador identidade.

O estado resultante do primeiro registrador, após a aplicação do operador U_f , em (3.13), pode ser reescrito como

$$|\psi_1\rangle = |\psi\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}}|i_0\rangle, \quad (3.20)$$

onde

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle \quad (3.21)$$

e i_0 é o elemento procurado. Denotando por $|\psi_G\rangle$ (Figura 3.6), o estado resultante da aplicação do operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ sobre $|\psi_1\rangle$, e usando (3.20), obtemos:

$$\begin{aligned} |\psi_G\rangle &= (2|\psi\rangle\langle\psi| - I) |\psi_1\rangle \\ &= (2|\psi\rangle\langle\psi| - I) \left(|\psi\rangle - \frac{2}{\sqrt{N}} |i_0\rangle \right) \\ &= (2\langle\psi|\psi\rangle) |\psi\rangle - \left(\frac{4}{\sqrt{N}} \langle\psi|i_0\rangle \right) |\psi\rangle - |\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} |i_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Substituindo (3.16) em (3.22), temos:

$$|\psi_G\rangle = \frac{N-4}{N} |\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} |i_0\rangle. \quad (3.23)$$

Esse é, então, o estado do primeiro registrador após a aplicação dos operadores U_f e $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ (o estado do segundo registrador permanece inalterado). A composição desses dois operadores é chamada de *operador de Grover* G , isto é,

$$G = ((2|\psi\rangle\langle\psi| - I) \otimes I) U_f. \quad (3.24)$$

O segundo operador identidade aparece, porque o operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ é aplicado apenas no primeiro registrador (Figura 3.6).

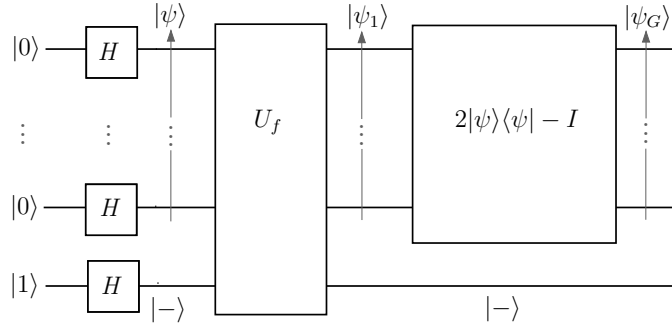


Figura 3.6: Uma aplicação do operador de Grover (G).

De (3.23), obtemos a amplitude do estado $|i_0\rangle$, após a primeira aplicação do operador G :

$$\left(\frac{N-4}{N} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \right) + \frac{2}{\sqrt{N}} = \left(\frac{3N-4}{N\sqrt{N}} \right).$$

Por exemplo, para $N = 4$, a probabilidade de se obter o elemento procurado, após uma medida do estado $|\psi\rangle$, em (3.21), é 25%. Já a probabilidade de se obter o elemento procurado, após uma medida do estado $|\psi_G\rangle$, em (3.23), é 100%. No entanto, para valores grandes de N , essa probabilidade ainda é pequena. Até agora,

o que podemos garantir é que, com uma aplicação do operador G , a amplitude do estado $|i_0\rangle$ é aumentada, em relação à sua amplitude no estado $|\psi\rangle$. E se aplicarmos novamente o operador G sobre o estado $|\psi_G\rangle|-\rangle$? A interpretação geométrica dos operadores U_f e $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$ nos induz justamente a isso (Figuras 3.3 e 3.4).

3.3 Custo Computacional do Algoritmo

Como demonstraremos nesta seção, o estado resultante do primeiro registrador, após cada aplicação do operador G , vai se aproximando do estado $|i_0\rangle$. Então, para determinar o custo computacional do algoritmo de Grover, temos que calcular quantas aplicações de G serão necessárias.

Inicialmente, demonstraremos que a aplicação de G^k ($k \in \mathbb{N}$) produz uma rotação de $|\psi\rangle$ em direção a $|i_0\rangle$, de $k\theta$ rad, no subespaço gerado pelos vetores $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$, onde θ é o ângulo entre $|\psi\rangle$ e $G|\psi\rangle$ (Figura 3.7). Para facilitar a leitura, dividiremos a demonstração em 4 proposições. A Proposição 1 diz que $G^k|\psi\rangle$ pertence ao subespaço gerado por $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$, para todo $k \in \mathbb{N}$. A Proposição 2 estabelece que o ângulo entre $G^k|\psi\rangle$ e $G^{k+1}|\psi\rangle$ também é θ , para todo $k \in \mathbb{N}$. Na Proposição 3, demonstramos que G rotaciona $|\psi\rangle$ em direção a $|i_0\rangle$. Finalmente, na Proposição 4, provamos que o sentido da rotação produzida quando G é aplicado sobre $G^k|\psi\rangle$, para todo $k \in \mathbb{N}$, é o mesmo obtido quando G é aplicado sobre $|\psi\rangle$. O subespaço gerado por $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$ será denotado por Ω e o estado do primeiro registrador de $G^k|\psi\rangle$ será denotado por $|\psi_{G^k}\rangle$. O estado do segundo registrador ($|-\rangle$) será omitido, pois ele é constante durante todo o processo.

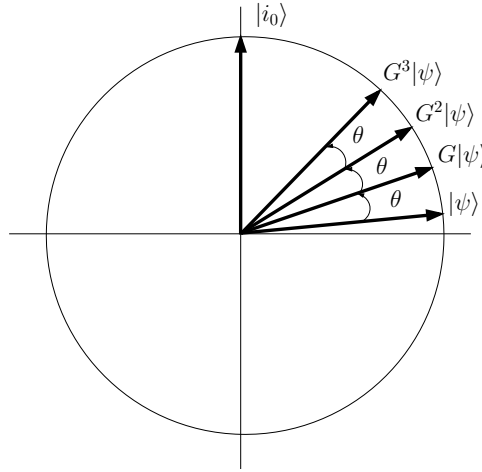


Figura 3.7: Efeito da aplicação do operador G .

PROPOSIÇÃO 1 $G^n|\psi\rangle \in \Omega$, para todo $n \in \mathbb{N}$.

Prova. A demonstração é por indução. De (3.23), sabemos que

$$G|\psi\rangle = \frac{N-4}{N}|\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|i_0\rangle. \quad (3.25)$$

Com isso, temos o resultado para $n = 1$. Suponhamos que, para um dado $k \in \mathbb{N}$,

$$G^k|\psi\rangle \in \Omega.$$

Isto é, existem $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tais que

$$G^k|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle + \beta|i_0\rangle. \quad (3.26)$$

Temos que provar que

$$G^{k+1}|\psi\rangle \in \Omega.$$

Aplicando o operador G nos dois lados de (3.26), obtemos:

$$G^{k+1}|\psi\rangle = \alpha G|\psi\rangle + \beta G|i_0\rangle. \quad (3.27)$$

Já sabemos que $G|\psi\rangle \in \Omega$. Calculemos $G|i_0\rangle$. Da definição de G , em (3.24), temos:

$$G|i_0\rangle = (2|\psi\rangle\langle\psi| - I)U_f|i_0\rangle. \quad (3.28)$$

De (3.11),

$$U_f|i_0\rangle = -|i_0\rangle. \quad (3.29)$$

Substituindo (3.29) em (3.28) e usando (3.16), obtemos:

$$\begin{aligned} G|i_0\rangle &= (2|\psi\rangle\langle\psi| - I)(-|i_0\rangle) \\ &= -2\langle\psi|i_0\rangle|\psi\rangle + |i_0\rangle \\ &= -\frac{2}{\sqrt{N}}|\psi\rangle + |i_0\rangle. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Ou seja, $G|i_0\rangle \in \Omega$. Como os estados $G|\psi\rangle$ e $G|i_0\rangle$ pertencem a Ω , de (3.27), concluímos que

$$G^{k+1}|\psi\rangle \in \Omega,$$

que finaliza a indução. ■

PROPOSIÇÃO 2 *O ângulo entre $G^k|\psi\rangle$ e $G^{k+1}|\psi\rangle$ é θ rad, para todo $k \in \mathbb{N}$.*

Prova. Usando a definição de ângulo entre dois vetores, dada no Capítulo 1, p. 9, o enunciado deste lema torna-se equivalente a

$$\langle\psi_{G^k}|\psi_{G^{k+1}}\rangle = \cos\theta, \forall k \in \mathbb{N}.$$

Reescrevendo, temos

$$\begin{aligned} \langle\psi_{G^k}|\psi_{G^{k+1}}\rangle &= \langle\psi_{G^k}|G^k|\psi_G\rangle \\ &= \langle(G^k)^\dagger\psi_{G^k}|\psi_G\rangle. \end{aligned}$$

Usando o fato de que

$$(G^k)^\dagger |\psi_{G^k}\rangle = (G^k)^\dagger G^k |\psi\rangle = |\psi\rangle,$$

obtemos, para todo $k \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{G^k} | \psi_{G^{k+1}} \rangle &= \langle \psi | \psi_G \rangle \\ &= \cos \theta, \end{aligned}$$

como queríamos demonstrar. ■

PROPOSIÇÃO 3 *O operador G rotaciona $|\psi\rangle$ em direção a $|i_0\rangle$.*

Prova. Inicialmente, calculemos o ângulo θ entre os vetores $|\psi\rangle$ e $G|\psi\rangle$. De (3.16) e (3.23), temos:

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \langle \psi | \psi_G \rangle \\ &= \frac{N-4}{N} \langle \psi | \psi \rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} \langle \psi | i_0 \rangle \\ &= \frac{N-4}{N} + \frac{2}{\sqrt{N}} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \right) \\ &= \frac{N-2}{N}. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Calculemos, agora, o ângulo entre $G|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$. De (3.16) e (3.25), temos:

$$\begin{aligned} \langle \psi_G | i_0 \rangle &= \frac{N-4}{N} \langle \psi | i_0 \rangle + \frac{2}{\sqrt{N}} \langle i_0 | i_0 \rangle \\ &= \frac{N-4}{N\sqrt{N}} + \frac{2}{\sqrt{N}} \\ &= \frac{3N-4}{N\sqrt{N}}. \end{aligned}$$

Para uma lista com 2 elementos ($N = 2$), o algoritmo de Grover “não funciona” (dê uma justificativa para isso). Vamos supor, então, que $N > 2$. Neste caso,

$$\frac{3N-4}{N\sqrt{N}} > \frac{1}{\sqrt{N}},$$

ou melhor,

$$\langle \psi_G | i_0 \rangle > \langle \psi | i_0 \rangle.$$

Como a função \arccos é decrescente no intervalo $[-1, 1]$, a desigualdade acima é equivalente a

$$\arccos(\langle \psi_G | i_0 \rangle) < \arccos(\langle \psi | i_0 \rangle).$$

Da Proposição 1, $|\psi_G\rangle \in \Omega$ e, de (3.31), sabemos que a rotação produzida por G é, no máximo, de $\pi/2$ rad. Portanto, usando a desigualdade acima, a única possibilidade é que a rotação de $|\psi\rangle$ seja em direção a $|i_0\rangle$. ■

PROPOSIÇÃO 4 *A aplicação de G sobre $|\psi_{G^n}\rangle$, para todo $n \in \mathbb{N}$, mantém o mesmo sentido de rotação quando G é aplicado sobre $|\psi\rangle$.*

Prova. Pelas Proposições 1, 2 e 3, já sabemos que, quando aplicamos o operador G sobre o estado $|\psi_{G^n}\rangle$, temos apenas duas possibilidades: $G(G^n|\psi\rangle)$ é um estado resultante de uma rotação de θ rad, em Ω , no sentido horário ou anti-horário. Se demonstrarmos que, para todo $n \in \mathbb{N}$,

$$G(G^n|\psi\rangle) \neq G^{n-1}|\psi\rangle,$$

poderemos concluir que a rotação mantém o mesmo sentido quando G é aplicado sobre $|\psi\rangle$. A demonstração será, portanto, por indução. Inicialmente, mostremos que

$$G(G^1|\psi\rangle) \neq G^0|\psi\rangle,$$

ou seja,

$$G|\psi_G\rangle \neq |\psi\rangle.$$

Usando (3.25) e (3.30), podemos calcular $G|\psi_G\rangle$:

$$\begin{aligned} G|\psi_G\rangle &= G\left(\frac{N-4}{N}|\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|i_0\rangle\right) \\ &= \frac{N-4}{N}G|\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}G|i_0\rangle \\ &= \frac{N-4}{N}\left(\frac{N-4}{N}|\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|i_0\rangle\right) + \frac{2}{\sqrt{N}}\left(-\frac{2}{\sqrt{N}}|\psi\rangle + |i_0\rangle\right) \\ &= \left(\frac{N-4}{N}\right)^2|\psi\rangle + \frac{2N-8}{N\sqrt{N}}|i_0\rangle - \frac{4}{N}|\psi\rangle + \frac{2}{\sqrt{N}}|i_0\rangle \\ &= \left(\left(\frac{N-4}{N}\right)^2 - \frac{4}{N}\right)|\psi\rangle + \frac{4N-8}{N\sqrt{N}}|i_0\rangle. \end{aligned}$$

Para $N > 2$, este estado é diferente de $|\psi\rangle$. Suponhamos agora que, para um dado $k \in \mathbb{N}$,

$$G(G^k|\psi\rangle) \neq G^{k-1}|\psi\rangle.$$

Como G é um operador unitário, podemos aplicá-lo nos dois lados da expressão acima e ainda obter estados distintos, isto é,

$$G(G^{k+1}|\psi\rangle) \neq G^k|\psi\rangle.$$

Isso conclui a indução (dê um exemplo mostrando que a conclusão da indução só é possível, porque G é um operador unitário). ■

Conclusão: a aplicação de G^k sobre $|\psi\rangle$ produz uma rotação de $k\theta$ rad em direção a $|i_0\rangle$, no subespaço gerado por $|\psi\rangle$ e $|i_0\rangle$, para todo $k \in \mathbb{N}$.

Consideremos, então, o “custo” do algoritmo de Grover. De forma mais precisa, devemos calcular o número de vezes k que o operador G deve ser aplicado para

que o estado $G^k|\psi\rangle$ torne-se o mais próximo do estado $|i_0\rangle$. Dito de outra forma, queremos saber que valor de k faz com que o ângulo entre $|i_0\rangle$ e $G^k|\psi\rangle$ seja o mais próximo de zero (Figura 3.8). Admitindo que k seja um número real, podemos representar matematicamente o problema acima através da seguinte equação:

$$\arccos(\langle\psi|i_0\rangle) - k\theta = 0. \quad (3.32)$$

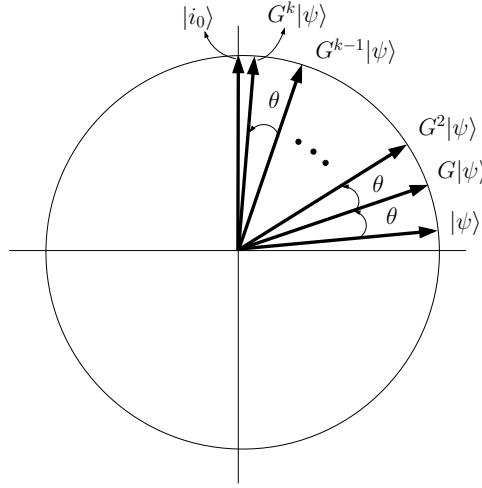


Figura 3.8: Aplicações sucessivas do operador G .

De (3.31), já sabemos que o ângulo θ entre $|\psi\rangle$ e $G|\psi\rangle$ é

$$\theta = \arccos\left(\frac{N-2}{N}\right). \quad (3.33)$$

Substituindo (3.16) e (3.33) em (3.32), obtemos:

$$\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) - k \arccos\left(\frac{N-2}{N}\right) = 0.$$

Isolando k , temos:

$$k = \frac{\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)}{\arccos\left(\frac{N-2}{N}\right)}. \quad (3.34)$$

Para sabermos a ordem de grandeza de k , inicialmente, “comparemos” k com N . Calculando o limite, temos:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k}{N} = 0.$$

Ou seja, k é “menor” do que N , para valores grandes de N . Calculemos, então, o seguinte:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k}{\log_2(N)} = \infty.$$

Neste caso, k é “maior” do que $\log_2(N)$, para valores grandes de N . Tentando um valor “intermediário”, obtemos:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k}{\sqrt{N}} = \frac{\pi}{4}.$$

Isso significa que, para valores suficientemente grandes de N , o número de vezes que o operador G deve ser aplicado é, no máximo, \sqrt{N} vezes.

3.4 Circuitos Quânticos do Operador G

Nesta seção, iremos decompor o operador G em termos de portas de 1 q-bit e portas CNOT. Essa decomposição mostrará como poderia ser uma implementação prática do operador G .

3.4.1 Circuito quântico para o operador U_f

Recordemos que a função f (3.1) age como um oráculo para identificar o elemento procurado i_0 . De forma similar, o operador U_f também pode ser imaginado como um oráculo. Nesse sentido, ele é um operador diferente do operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$, pois deve ser “preparado” para a identificação do estado $|i_0\rangle$. O operador U_f pode ser representado por uma porta Toffoli generalizada com n q-bits de controle, 1 q-bit alvo no estado $|-\rangle$ e 2 portas X atuando no i -ésimo q-bit de controle, sempre que o i -ésimo dígito binário de i_0 for 0. Por exemplo, o circuito quântico para o operador U_f , considerando $n = 3$ e $i_0 = 101$, tem a forma apresentada na Figura 3.9. Se o elemento procurado fosse 111, nenhuma porta X seria usada. Caso fosse 000, 3 pares de portas X seriam usadas, um par em cada q-bit de controle.

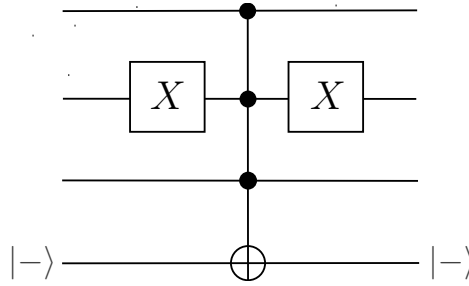


Figura 3.9: Circuito quântico para o operador U_f ($n = 3$ e $i_0 = 101$).

3.4.2 Circuito quântico para o operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$

Consideremos, agora, a decomposição do operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$. Usando

$$|\psi\rangle = H^{\otimes n}|0\rangle \text{ e } \langle\psi| = \langle 0|(H^{\otimes n})^\dagger,$$

temos, então,

$$\begin{aligned} 2|\psi\rangle\langle\psi| - I &= 2H^{\otimes n}(|0\rangle\langle 0|)(H^{\otimes n})^\dagger - I \\ &= H^{\otimes n}(2|0\rangle\langle 0|)(H^{\otimes n})^\dagger - H^{\otimes n}(H^{\otimes n})^\dagger \\ &= H^{\otimes n}(2|0\rangle\langle 0| - I)(H^{\otimes n})^\dagger \\ &= H^{\otimes n}(2|0\rangle\langle 0| - I)H^{\otimes n}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Observe que $H^{\otimes n}$ é uma matriz simétrica com apenas entradas reais. Portanto, $(H^{\otimes n})^\dagger = H^{\otimes n}$.

A equação (3.35) mostra que, para obtermos o circuito quântico do operador $2|\psi\rangle\langle\psi| - I$, basta considerarmos o operador $2|0\rangle\langle 0| - I$. Esse operador faz uma reflexão em relação ao estado $|0\rangle$. O circuito para esse operador é dado na Figura 3.10.

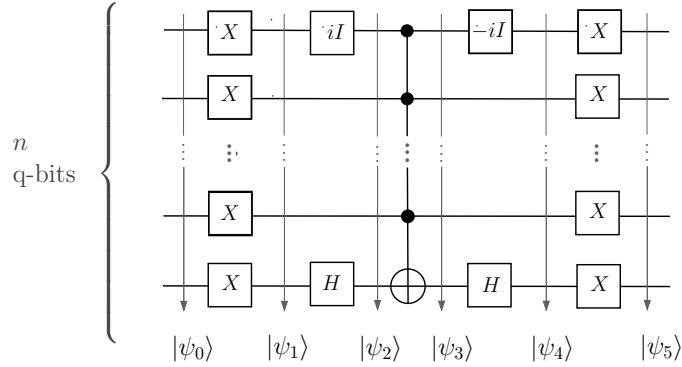


Figura 3.10: Circuito quântico para o operador $2|0\rangle\langle 0| - I$.

Observe que a única porta que atua nos n q-bits ao mesmo tempo, na Figura 3.10, é a porta Toffoli generalizada (Figura 2.5).

Um ponto importante que não foi discutido é o custo computacional associado a cada operador que compõe G . Pode-se demonstrar que esse custo é proporcional a $\log_2 N$.

OBSERVAÇÃO 1 *Este texto foi baseado, principalmente, nas referências [3] e [4]. Para aprofundar os conceitos aqui apresentados, consulte os outros textos listados na bibliografia, assim como as referências lá citadas.*

Bibliografia

- [1] G. Benenti, G. Casati, and G. Strini, “Principles of Quantum Computation and Information”, Vol. I, World Scientific, Singapore, 2004.
- [2] A. Yu. Kitaev, A.H. Shen, and M.N. Vyalyi, “Classical and Quantum Computation”, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2002.
- [3] M.A. Nielsen and I. L. Chuang, “Quantum Computation and Quantum Information”, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [4] R. Portugal, C. Lavor, L.M. Carvalho e N. Maculan, “Uma Introdução à Computação Quântica”, vol. 8 da Série Notas em Matemática Aplicada, SBMAC, São Carlos, 2004.
- [5] J. Preskill, Quantum Information and Computation, Lecture Notes, California Institute of Technology, 1998.
- [6] T. Siegfried, “O Bit e o Pêndulo”, Editora Campus, Rio de Janeiro, 2000.