

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
ESCUELA DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICA

Caminatas cuánticas 2D con decoherencia

Amado Alberto Cabrera Estrada

Carné: 201905757

22 de noviembre de 2024

Licenciatura en Física Aplicada

Asesorado por: *M.Sc. José Alfredo de León (IF-UNAM) e*
Ing. Rodolfo Samayoa (ICFM-USAC)

Índice

Objetivos	2
Introducción	2
Justificación	2
1 Antecedentes	2
1.1 Operador de densidad	2
1.1.1 Usos de la matriz de densidad	3
1.1.2 Propiedades del operador de densidad	4
1.1.3 Reformulación de los postulados de la mecánica cuántica	6
1.1.4 Matriz de densidad reducida	8
1.2 Caminatas cuánticas	9
1.2.1 Caminata trivial	10
1.2.2 Caminatas cuánticas discretas en una línea (DQWL)	10
2 Implementación	11
2.1 Procedimiento para encontrar distribuciones de probabilidad	11
2.2 Detalles de implementación	12
2.2.1 Inicialización de la caminata	12
2.2.2 Procedimiento de la caminata	12
2.3 Ejemplo de código	13
3 Resultados	13
3.1 Validación de resultados	13
3.2 Superposiciones en la moneda	14
3.3 Superposiciones en la posición	15
3.4 Estados entrelazados	16
3.5 Tablas de probabilidad	17
4 Conclusiones y trabajo futuro	18
4.1 Conclusiones	18
4.2 Trabajo futuro	19

Objetivos

General

Estudiar el marco teórico y la implementación numérica de las caminatas cuánticas discretas en el tiempo en una línea.

Específicos

- Estudiar el formalismo de la matriz de densidad y la matriz de densidad reducida.
- Estudiar el modelo de caminata cuántica discreta en una línea.
- Implementar numéricamente un modelo de caminata cuántica discreta en una línea.
- Estudiar la distribución de probabilidad del caminante cuántico en función del estado inicial

Introducción

Este proyecto pretendía en un inicio incluir decoherencia en el modelo de caminatas cuánticas; pero, debido a la extensión del tema, se limitó a trabajar caminatas cuánticas 1D.

El auge reciente de la computación cuántica ha llevado una gran cantidad de avances en distintos campos del conocimiento. En este sentido, el campo se ha expandido en distintas direcciones que van desde el desarrollo de algoritmos [1, 2], aplicaciones teóricas [3, 4, 5] hasta evaluación de la cuantificación de computadoras cuánticas [6, 7].

En este trabajo vamos a estudiar el comportamiento de la distribución de probabilidad de caminatas cuánticas discretas en una línea¹ bajo distintas condiciones iniciales. Para ello, utilizamos métodos numéricos de implementación propia hechos en el lenguaje de programación Wolfram Language.

En la sección 1 vamos a estudiar los antecedentes necesarios para entender las caminatas cuánticas y como se implementa este proceso. En la sección 2 se expondrán las ideas clave detrás del método de implementación y se mostrará el código usado para generar los resultados presentados en la sección 3. En los resultados presentaremos de manera separada cada una de las partes importantes de los resultados junto a la discusión de los mismos. Para acabar, en la sección 4 se presentarán las conclusiones del trabajo, algunas ideas de mejora y se presentarán los planes a futuro.

Justificación

Este trabajo de prácticas será el inicio de un proyecto que se planea continuar durante el trabajo de graduación en el que se investigará el comportamiento de las caminatas cuánticas bajo el efecto de la decoherencia. En ese sentido, este trabajo sienta las bases teóricas necesarias para comprender las caminatas cuánticas, introduciéndonos al formalismo de la matriz de densidad y, además de eso, se presentan avances en las herramientas computacionales que se usarían para analizar estos comportamientos.

1 Antecedentes

1.1 Operador de densidad

Típicamente, la mecánica cuántica ha sido formulada en el lenguaje del vector de estado [8, 9]. Sin embargo, es posible utilizar otras formulaciones². En este trabajo, utilizaremos el formalismo del «operador de densidad»³. Esta formulación es una manera más general, y conveniente en el escenario de los sistemas cuánticos abiertos, de representar a los estados cuánticos, dándonos la capacidad de describir matemáticamente mezclas estadísticas de estados puros.

¹DTQW por las siglas en inglés de *Discrete Time Quantum Walk*.

²Como el formalismo de las integrales de camino.

³También se le llama «matriz de densidad».

Para definir el operador de densidad es necesario hacer una distinción entre estados puros y estados mixtos. Se llaman estados puros a aquellos que pueden describirse por una función de onda o vector de estado [9]. Mientras que un estado mixto corresponde a una mezcla probabilística de estados puros [8].

Dada una mezcla estadística de estados puros, también conocida como un ensamble de estados puros, $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, el operador de densidad del sistema se define como [8]

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (1)$$

Podemos ver en la definición del operador de densidad que, al ser este la suma ponderada por probabilidad de los productos externos de cada estado puro, se puede representar estados mixtos con un único objeto (una matriz), en vez de tener que trabajar manualmente con la mezcla estadística.

1.1.1 Usos de la matriz de densidad

Una vez que hemos hablado ligeramente de las matrices de densidad vamos a ver ahora un ejemplo práctico que justifique usar este nuevo formalismo matemático en mecánica cuántica. En este ejemplo vamos a demostrar que, en general, una matriz de densidad no puede ser descrita con un vector de estado; esto mostrará a su vez que las matrices de densidad son la generalización de los vectores de estado.

En el ejemplo usaremos la polarización de la luz para realizar nuestros cálculos, así que haremos un pequeño repaso de óptica para poder desarrollar nuestro ejemplo. La polarización de la luz la describiremos usando los *vectores de Jones*; usaremos 3 bases distintas $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, $\{|D\rangle, |A\rangle\}$ y $\{|R\rangle, |L\rangle\}$, podemos ver como se relacionan entre ellas en la Tabla 1.

Polarización	Vector de Jones	Notación de Dirac
Horizontal	$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$	$ H\rangle$
Vertical	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$ V\rangle$
Diagonal	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$ D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle + V\rangle)$
Antidiagonal	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$	$ A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle - V\rangle)$
Circular derecha	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$	$ R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle - i V\rangle)$
Circular izquierda	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$	$ L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(H\rangle + i V\rangle)$

Tabla 1: Relación entre los vectores de Jones

También es necesario recordar el funcionamiento de los filtros polarizadores, ya que estos nos ayudarán a reconstruir un estado desconocido a partir de las medidas de estos estados en distintas bases, lo que es equivalente a hacerlos pasar por filtros a distintas orientaciones. Cuando un rayo de luz, sin importar su polarización, pasa a través de un filtro polarizador, toda la luz resultante sale en la dirección del filtro, pero con una intensidad menor. La intensidad resultante es proporcional a la parte del estado con la misma orientación al filtro.

Una vez hemos aclarado los conceptos de óptica necesarios podemos proseguir con el ejemplo. Tomaremos dos estados: (1) El estado puro de luz con orientación diagonal $|D\rangle$. (2) El estado de la luz natural, también llamada luz sin polarizar. Y vamos hacer pasar a ambos haces de luz por filtros polarizadores representando cada uno de los vectores de la Tabla 1.

Al hacer pasar los rayos de luz por un filtro polarizador tenemos que el cociente entre la intensidad final e inicial nos da la probabilidad que el haz de luz esté en el estado de cada filtro

$$P(X) = \frac{I_f}{I_0},$$

dónde $P(X)$ es la probabilidad que el haz de luz se encuentre en el estado $|X\rangle$. Ahora veremos las probabilidades de hacer pasar cada uno de los haces mencionados anteriormente por cada uno de los filtros:

(1) Luz con polarización diagonal

$$\begin{aligned} P(H) &= \frac{1}{2} \\ P(V) &= \frac{1}{2} \\ P(D) &= 1 \\ P(A) &= 0 \\ P(L) &= \frac{1}{2} \\ P(R) &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

(2) Luz sin polarizar

$$\begin{aligned} P(H) &= \frac{1}{2} \\ P(V) &= \frac{1}{2} \\ P(D) &= \frac{1}{2} \\ P(A) &= \frac{1}{2} \\ P(L) &= \frac{1}{2} \\ P(R) &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

De las mediciones en el lado izquierdo podemos ver que $P(A) = 1$, lo que quiere decir que la probabilidad que el estado de haz sea $|A\rangle$ es del 100 %. Con las del lado derecho, en cambio, es fácil ver que esto no sucederá para ningún vector de estado. Este tipo de casos son los que justifican el uso de la matriz de densidad, estados cuánticos que no se pueden representar con vectores de estado.

1.1.2 Propiedades del operador de densidad

Para proceder con la nueva formulación de la mecánica cuántica a partir del operador de densidad es necesario alejarnos un poco de la definición original, para introducir sus propiedades elementales.

Teorema 1: Caracterización del operador de densidad [8].

Un operador ρ es operador de densidad asociado a un ensamble $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ si y solo si satisface

1. (**Condición de traza**) La traza de ρ debe ser 1.
2. (**Condición de positividad**) ρ debe ser positivo semidefinido.

Demostración. Para demostrar este teorema es necesario hacerlo en ambas direcciones

(\implies) Suponiendo un operador de densidad $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, entonces

1. Para demostrar la condición de la traza

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho) &= \text{Tr}\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right), \\ &= \sum_i p_i \text{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|), \\ &= \sum_i p_i, \\ &= 1. \end{aligned}$$

2. Para la condición de positividad

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle &= \langle \varphi | \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) | \varphi \rangle, \\
&= \sum_i p_i \langle \varphi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \varphi \rangle, \\
&= \sum_i p_i |\langle \varphi | \psi_i \rangle|^2, \\
&\geq 0,
\end{aligned}$$

en la penúltima línea hemos utilizado el hecho de que las probabilidades $p_i > 0$.

(\Leftarrow) Suponiendo un operador ρ que cumple con las condiciones de traza y positividad.

Al ser un operador positivo debe tener descomposición espectral

$$\rho = \sum_j \lambda_j |j\rangle\langle j|,$$

donde los λ_j son los autovalores de ρ y deben ser reales y no negativos; y $|j\rangle$ los autovectores normalizados. Dónde, además, por la condición de la traza

$$\sum_j \lambda_j = 1.$$

De esto obtenemos que tomando los $|j\rangle$, estados cuánticos; junto a los λ_i , las probabilidades respectivas de los estados. El operador ρ representa un operador de densidad para el ensamble $\{\lambda_j, |j\rangle\}$. $\mathcal{Q.E.D.}$

Con el Teorema 1 podemos desacoplar la definición de operador de densidad y la del ensamble de estados, de tal modo que podemos pensar en el operador como un objeto abstracto y es *suficiente* que se cumplan las condiciones de traza y positividad para definirlo como tal. Ya que el operador de densidad nos permite unificar la representación de estados mixtos y puros, será útil un criterio que nos permita diferenciar que clase de estado es un operador de densidad dado.

Criterio para decidir si un estado es puro o mixto [8]:

Sea ρ un operador de densidad, para un estado puro se cumplirá que $\text{Tr}(\rho^2) = 1$, mientras que para estados mixtos tendremos que $\text{Tr}(\rho^2) < 1$.

Demostración. Tomando un operador de densidad cualquiera

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

y calculando el cuadrado

$$\begin{aligned}
\rho^2 &= \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \right), \\
&= \sum_{i,j} p_i p_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \langle\psi_i|\psi_j\rangle \langle\psi_j|, \\
&= \sum_{i,j} p_i p_j |\psi_i\rangle\langle\psi_j| \delta_{ij}, \\
&= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.
\end{aligned}$$

Por la tanto:

$$\begin{aligned}\text{Tr}[\rho^2] &= \text{Tr} \left[\sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right], \\ &= \sum_i p_i^2 \text{Tr}[|\psi_i\rangle\langle\psi_i|], \\ &= \sum_i p_i^2.\end{aligned}$$

Finalmente como para cada p_i tenemos que $p_i^2 \leq p_i$ ya que $0 \leq p_i \leq 1$ obtenemos

$$\text{Tr}[\rho^2] = \sum_i p_i^2 \leq \sum_i p_i = 1.$$

Esto quiere decir que

$$\text{Tr}[\rho^2] \leq 1,$$

donde la igualdad solo se obtiene cuando solo hay un $p_i = 1$ (estado puro), si no obtenemos la desigualdad (estado mixto). $\mathcal{Q.E.D.}$

1.1.3 Reformulación de los postulados de la mecánica cuántica

Por medio del Teorema 1 dimos una caracterización del operador de densidad que es intrínseca al operador mismo [8]. Esto quiere decir que nosotros podemos definir un operador de densidad como un operador positivo y de traza uno, sin tener que preocuparnos de cuál ensamble estadístico venga. Una vez hemos hecho esa caracterización podemos reformular los postulados de la mecánica cuántica para completar este lenguaje matemático.

Postulados de la mecánica cuántica [8]:

Podemos escribir los postulados de la mecánica cuántica como:

Postulado I: Asociado a cualquier sistema físico cerrado hay un espacio vectorial complejo con producto interno (i.e., un espacio de Hilbert) conocido como *espacio de estados* del sistema. El estado del sistema esta completamente descrito por su *operador de densidad*, el cual es un operador positivo ρ con traza uno, actuando en el espacio de estados del sistema. Si un sistema cuántico se encuentra en el estado ρ_i con probabilidad p_i , entonces el operador de densidad del sistema es

$$\sum_i p_i \rho_i. \tag{2}$$

Postulado II: La evolución de un sistema cuántico cerrado está descrita por una *transformación unitaria*. Es decir, el estado ρ del sistema en un tiempo t_1 está relacionado al estado ρ' del sistema en un tiempo t_2 por un operador unitario U el cual depende únicamente de los tiempos t_1 y t_2 ,

$$\rho' = U \rho U^\dagger. \tag{3}$$

Postulado III: Las mediciones cuánticas están descritas por una colección de *operadores de medición* $\{M_m\}$. Estos son los operadores actuando en el espacio de estados del sistema siendo medido. El índice m se refiere a los resultados que pueden ocurrir en el experimento. Si el estado del sistema cuántico es ρ inmediatamente antes de la medida, entonces la probabilidad de que ocurra el resultado m está dada por

$$p(m) = \text{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho), \tag{4}$$

y el estado del sistema inmediatamente después de la medición es

$$\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho)}. \tag{5}$$

Los operadores de medición satisfacen la ecuación de completitud,

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I. \quad (6)$$

Postulado IV: El espacio de estado de un sistema físico compuesto es el producto tensorial del espacio de estados de los sistemas físicos que lo componen. Sin embargo, si tenemos los sistemas numerados de 1 a n , y el sistema número i se encuentra preparado en el estado ρ_i , entonces el estado conjunto del sistema total es

$$\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_n. \quad (7)$$

Cabe aclarar que el estado más general de un sistema compuesto no tiene la forma de la ecuación (7) necesariamente. Un ejemplo de esto es el estado de Bell, el cual es un estado de un sistema de dos qubits y no puede ser escrito como el producto de dos estados:

$$|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \neq \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (8)$$

A los estados que no se pueden escribir como la ecuación (7) se les llama *entrelazados*.

Con esto conseguimos reformular completamente la mecánica cuántica en un lenguaje distinto al vector de estado, pero matemáticamente equivalente. Sin embargo, pensar en términos de la matriz de densidad nos dará dos grandes ventajas, en las cuales destaca este formalismo: la descripción de sistemas cuánticos abiertos y la descripción de subsistemas de un sistema cuántico compuesto [8].

Para ilustrar el postulado II vamos a ver la evolución de un qubit sometido a un campo magnético $\vec{B} = (0, 0, B_z)$. El hamiltoniano del qubit está dado por

$$H = \frac{g\mu_B B_z}{2} \sigma_z,$$

por lo que la evolución generada por este es

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(-itH/\hbar), \\ &= \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{itB_z\mu_B}{\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{itB_z\mu_B}{\hbar}\right) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Usando esta evolución unitaria vamos a ver como evoluciona un estado dado por

$$\rho = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-i}{\sqrt{6}} \\ \frac{i+1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{3} \end{pmatrix},$$

esto nos daría

$$\begin{aligned} \rho' &= U\rho U^\dagger, \\ &= \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{it\omega}{2\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{it\omega}{2\hbar}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-i}{\sqrt{6}} \\ \frac{i+1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{it\omega}{2\hbar}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{it\omega}{2\hbar}\right) \end{pmatrix}, \\ &= \frac{4}{3} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1-i}{\sqrt{6}} \exp\left(-\frac{2itB_z\mu_B}{\hbar}\right) \\ \frac{1+i}{\sqrt{6}} \exp\left(\frac{2itB_z\mu_B}{\hbar}\right) & \frac{1}{3} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Esta evolución la podemos visualizar gráficamente en la figura 1.

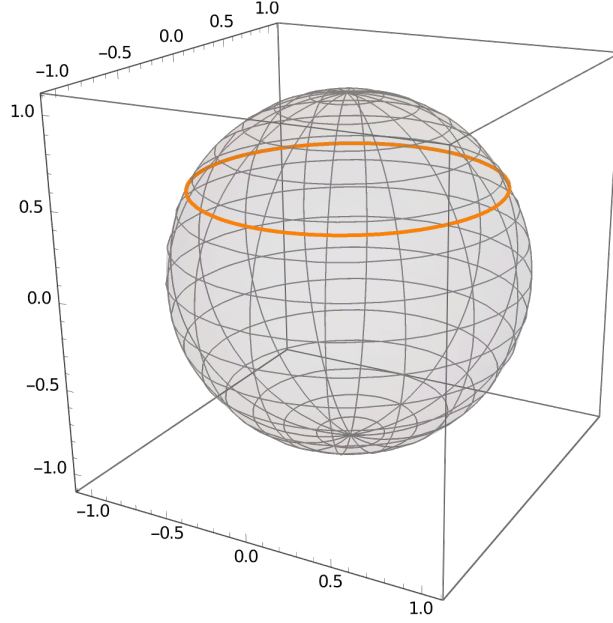


Figura 1: Dinámica de un qubit en un campo magnético.

1.1.4 Matriz de densidad reducida

El operador de densidad reducido es quizá una de las aplicaciones más importantes del formalismo de la matriz de densidad, pues a partir de este nosotros podemos encontrar el estado de un subsistema de un sistema compuesto en el cual tenemos toda la información necesaria para realizar cualquier medida en dicho subsistema. Formalmente, decimos que dados dos sistemas físicos A y B , cuyo estado total está descrito por la matriz de densidad ρ^{AB} ; entonces la matriz de densidad reducida para el sistema A se define como

$$\rho^A \equiv \text{Tr}_B(\rho^{AB}) \quad (9)$$

dónde $\text{Tr}_X(\cdot)$ es la traza parcial sobre el subsistema X , esto quiere decir que toma al subsistema del sistema compuesto sin X [8].

La traza parcial está definida como:

$$\text{Tr}_B \rho^{AB} = \sum_j \langle \psi_j | \rho | \psi_j \rangle, \quad (10)$$

donde $|\psi_j\rangle$ es una base del espacio de estados exclusivamente del sistema B , posteriormente realizaremos un ejemplo para mostrar cómo se ve esto.

$$\text{Tr}_B(|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|) \equiv |a_1\rangle\langle a_2| \text{Tr}(|b_1\rangle\langle b_2|) \quad (11)$$

dónde $\{|a_i\rangle\}$ y $\{|b_i\rangle\}$ pertenecen a los sistemas A y B respectivamente. Y al ser la traza un operador lineal, podemos utilizar esta definición para estados mixtos igualmente.

Con esto podemos ver la importancia de la matriz de densidad reducida, pues teniendo el estado de un sistema compuesto podemos acceder a medidas en los subsistemas. Esto es especialmente útil cuando nosotros queremos estudiar la dinámica de sistemas abiertos. En estos casos realizamos la evolución del sistema abierto junto a su entorno y trazamos los grados de libertad del entorno para recuperar la evolución del sistema que nos interesaba desde el inicio, esto se puede ver gráficamente en la figura 2.

Para aclarar el funcionamiento de la traza parcial y entender su uso con estados entrelazados, vamos a calcular la matriz de densidad reducida para el primer *qubit* del estado de Bell $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$. Dada la matriz de

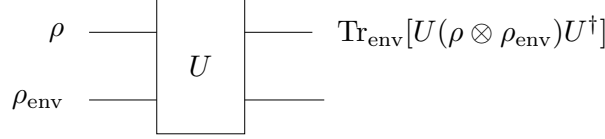


Figura 2: Modelo de evolución de un sistema cuántico abierto.

densidad

$$\begin{aligned}\rho &= \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}} \right), \\ &= \frac{|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|}{2}.\end{aligned}$$

Ahora, realizando la traza parcial sobre segundo *qubit*:

$$\begin{aligned}\rho_1 &= \text{Tr}_2(\rho), \\ &= \text{Tr}_2\left(\frac{|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|}{2}\right), \\ &= \frac{\text{Tr}_2(|00\rangle\langle 00|) + \text{Tr}_2(|00\rangle\langle 11|) + \text{Tr}_2(|11\rangle\langle 00|) + \text{Tr}_2(|11\rangle\langle 11|)}{2}, \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0| \text{Tr}(|0\rangle\langle 0|) + |0\rangle\langle 1| \text{Tr}(|0\rangle\langle 1|) + |1\rangle\langle 0| \text{Tr}(|1\rangle\langle 0|) + |1\rangle\langle 1| \text{Tr}(|1\rangle\langle 1|)}{2}, \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|}{2}, \\ &= \frac{\mathbb{1}}{2}.\end{aligned}$$

Adicionalmente, al cálculo de la traza parcial es interesante para el lector para notar que la matriz de densidad reducida de el estado entrelazado es un estado mixto

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\rho_1^2) &= \text{Tr}\left[\left(\frac{\mathbb{1}}{2}\right)^2\right], \\ &= \frac{1}{4} \text{Tr}(\mathbb{1}), \\ &= \frac{1}{2},\end{aligned}$$

al contrario de lo que pasa con estados producto, cuyas matrices de densidad reducidas son, en cambio, estados puros.

1.2 Caminatas cuánticas

Las caminatas cuánticas son la contraparte clásica de las caminatas aleatorias y han demostrado ser una herramienta muy útil en el desarrollo de algoritmos, entre otras aplicaciones teóricas. Existen dos tipos de caminatas cuánticas: continuas y discretas en el tiempo. Tal y como sus nombres indican, la diferencia entre estas está en cada cuanto se aplica el operador de evolución; para el caso discreto solo en pasos enteros y para el caso continuo para cualquier tiempo arbitrario [10].

Nosotros en este trabajo nos centraremos únicamente en las caminatas cuánticas discretas en el tiempo en 1 dimensión. Este modelo de caminatas cuánticas consiste de dos sistemas que interactúan entre si, uno llamado caminante y otro llamado moneda, y finalmente tenemos un operador en el sistema conjunto del caminante y la moneda que se aplica en pasos discretos de tiempo.

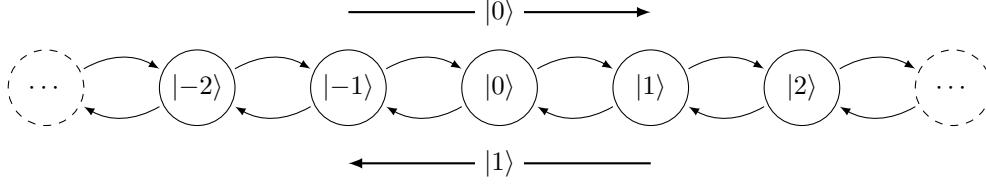


Figura 3: Diagrama de una caminata cuántica discreta en una línea.

1.2.1 Caminata trivial

Las caminatas aleatorias requieren de un proceso estocástico para funcionar; lo que, en las caminatas aleatorias en una línea, solemos representar con el lanzamiento de una moneda. La aleatoriedad implícita en los procesos cuánticos podría hacernos creer que en el análogo cuántico no hay necesidad de una moneda. Sin embargo esto no es cierto, pues las caminatas cuánticas discretas sí requieren ese grado de libertad adicional que indique en que direcciones se va a propagar la caminata. Esto hace necesario que, para realizar una caminata cuántica equilibrada, exista un operador de moneda que superponga el estado de la moneda en uno con todas las direcciones en las que se pueda propagar. En caso de que no se incluyera la moneda el estado inicial solo se desplazaría por la posición, pero sin dispersarse en el espacio; a ese comportamiento se le llama caminata trivial [11].

1.2.2 Caminatas cuánticas discretas en una línea (DQWL)

Un modelo bastante estudiado en la literatura, y el que utilizamos en este trabajo, es el modelo de caminatas cuánticas discretas en una línea infinita. En este modelo el sistema de posición es un sistema de infinitos grados de libertad y el sistema de la moneda, que es el que nos indica como se mueve el caminante en la línea, tiene solamente dos grados de libertad.

Como ya se había mencionado anteriormente, la dinámica de las caminatas discretas se modelará en base a un operador unitario en cada paso del tiempo, este dependerá a su vez de dos operadores llamados operador de moneda y de *shift*, y durante el transcurso del trabajo entenderemos su funcionamiento. En el caso de las Caminatas cuánticas discretas en una línea (DQWL) el operador de *shift* está dado por

$$S = |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_i |i+1\rangle\langle i| + |1\rangle\langle 1| \otimes \sum_i |i-1\rangle\langle i|, \quad (12)$$

mientras que el operador de moneda puede ser cualquier operador unitario de dos niveles, en nuestro caso se utilizó el Hadamard como la moneda

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

De esta manera el operador de la DQWL puede escribirse como

$$U = S(C \otimes \mathbf{1}). \quad (14)$$

El operador de evolución de la ecuación (14) nos da entonces la dinámica en cada paso de tiempo de una caminata cuántica que tiene la misma probabilidad de moverse hacia la derecha o izquierda,

$$|\psi\rangle_t = U |\psi\rangle_{t-1} \quad (15)$$

Para ejemplificar el comportamiento de las caminatas cuánticas se mostrará el cálculo en tres tiempos distintos: $t = 0$, $t = 1$ y $t = 2$ de la misma.

- Paso 0:

$$|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle.$$

- Paso 1:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle_1 &= U |\psi\rangle_0 \\
&= U(|0\rangle \otimes |0\rangle), \\
&= S(|+\rangle \otimes |0\rangle), \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle], \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} S(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle), \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle).
\end{aligned}$$

- Paso 2:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle_2 &= U |\psi\rangle_1 \\
&= U \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle) \right], \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} U(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle), \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} S(|+\rangle \otimes |1\rangle + |-\rangle \otimes |-1\rangle), \\
&= \frac{1}{2} S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle + (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |-1\rangle], \\
&= \frac{1}{2} S(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle + |0\rangle \otimes |-1\rangle - |1\rangle \otimes |-1\rangle), \\
&= \frac{1}{2} (|0\rangle \otimes |2\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle + |0\rangle \otimes |0\rangle - |1\rangle \otimes |-2\rangle).
\end{aligned}$$

Si se van haciendo los pasos poco a poco será fácil tomar intuición del funcionamiento de las caminatas cuánticas y permitirá un mejor entendimiento de las siguientes secciones.

2 Implementación

2.1 Procedimiento para encontrar distribuciones de probabilidad

Antes de poder entrar de lleno en la implementación exacta del paquete con el que se encuentran las distribuciones de probabilidad vamos a explicar el procedimiento matemático exacto en el que se inspira el código.

1. Definir el vector de estado que defina nuestro estado inicial:

$$|\psi\rangle_0.$$

2. Realizar tantos pasos de evolución como se requiera:

$$|\psi\rangle = U^n |\psi\rangle_0.$$

3. A continuación, se calculará la matriz de densidad de la evolución de la caminata cuántica:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

4. Una vez que tenemos la matriz de densidad, calculamos la matriz de densidad reducida solamente del espacio de la posición:

$$\rho_X = \text{Tr}_C(\rho).$$

5. A partir de eso, extraemos los elementos de la diagonal de la matriz de densidad reducida, pues estos representan las probabilidades de medir cada $|x\rangle$:

$$v = \sum_i P_i \rho_X P_i,$$

dónde P_i son los proyectores en el espacio de la posición.

6. Finalmente, v es el vector que contiene la distribución de probabilidad de la caminata.

2.2 Detalles de implementación

La implementación numérica se aprovecha de las funciones del álgebra lineal de Mathematica. El problema con esta implementación es que limita desde el inicio el tamaño de los espacios vectoriales con los que vamos a trabajar⁴.

No obstante, la ventaja es que no se tiene que re-allocar listas por el cambio de tamaño. Por otro lado, es una ventaja que Mathematica tiene funciones de álgebra lineal que están optimizadas.

2.2.1 Inicialización de la caminata

Para lidiar con los problemas mencionados se crearon rutinas de inicialización para la caminata cuántica, estas rutinas son:

1. `InitializeDTQW[c,x]`

Esta rutina configura las variables globales correspondientes al tamaño del espacio de la moneda c y de la posición x . Estas variables globales se aseguran de que todos los vectores y operadores utilizados en la caminata tengan los tamaños correctos.

2. `MakeCoin[r,θ,ϕ]`

Crea el operador de la moneda parametrizado por r , θ y ϕ .

3. `MakeShift[]`

Este operador implementa un operador de *shift* de una caminata DTQW de tamaño adecuado.

4. `MakeUnitary[]`

Implementa la transformación unitaria en términos de los operadores de moneda y *shift*.

2.2.2 Procedimiento de la caminata

Para facilitar la generación de resultados se implementaron rutinas que se encargan de esto.

1. `VectorState[v]`

Esta función se utiliza como cabecera que nos permite validar que una expresión v es un vector de estado. Para hacer la notación de vectores de estado independiente del tamaño de los espacios de Hilbert se utilizó una notación unificada. En esta notación v es `{{a1,c1,x1},...,{an,cn,xn}}`, dónde cada `ai` representa las amplitudes de probabilidad del vector y los `ci` y `xi` los vectores de cada uno de los espacios.

2. `DTQW2[s0,n]`

Realiza n pasos de la DTQW con estado inicial s_0 , cabe mencionar que esta devuelve como resultado un vector estándar de Mathematica. Es importante que $n \leq (x-1)/2$ cuando la posición inicial es $|0\rangle$, pues si no la simulación puede no corresponderse con un proceso físico.

3. `MatrixPartialTrace[M,i,{N1,...,Nj}]`

Calcula la traza parcial de el i -ésimo espacio con tamaño N_i aplicado a la matriz M .

⁴La complejidad computacional de la multiplicación matricial es mayor a $\mathcal{O}(n^2)$, con n el tamaño de la matriz.

2.3 Ejemplo de código

Veamos un ejemplo calculando la distribución de probabilidad de una caminata cuántica con el estado inicial $|\psi\rangle_0 = |+_y\rangle \otimes |0\rangle$.

```

1 dimensions = {2, 201};
2 InitializeDTQW @@ dimensions;
3 MakeCoin[1/2, 0, 0];
4 MakeShift[];
5 MakeUnitary[];
6 psipy0 = VectorState[{{1/Sqrt[2], 0, 0}, {I/Sqrt[2], 1, 0}}];
7 rhopy0 = #.ConjugateTranspose[#] &@ DTQW2[psipy0, 100];
8 probpy0 = Diagonal@MatrixPartialTrace[rhopy0, 1, dimensions];

```

En este código se siguen todos los pasos necesarios para calcular la distribución de probabilidad de una *DTQW* de 100 pasos. Se definen las dimensiones de los espacios 2 y 201⁵, se realizan las inicializaciones adecuadas, en la línea 6 se define el estado inicial, en la línea 7 se calculan 100 pasos de la *DTQW* junto a su matriz de densidad y finalmente, en la línea 8, se calcula la matriz de densidad reducida y extraen la probabilidades.

3 Resultados

En este capítulo se presentan los resultados en distintas secciones, siguiendo el orden en el que se fueron generando.

3.1 Validación de resultados

A modo de poder validar el código realizado, los primeros resultados se encaminaron a reproducir distribuciones de probabilidad ya bien conocidas en la literatura. Primero, empezamos generando las figuras 4 y 5, las cuales corresponden con caminatas cuánticas de 100 pasos que inician en la posición $|0\rangle$ y con monedas $|0\rangle$ y $|1\rangle$, respectivamente

$$|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle \quad \text{y} \quad |\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |1\rangle.$$

En estas dos figuras es, en mi opinión, especialmente interesante notar la asimetría provocada unicamente por realizar un cambio en el estado inicial de la moneda.

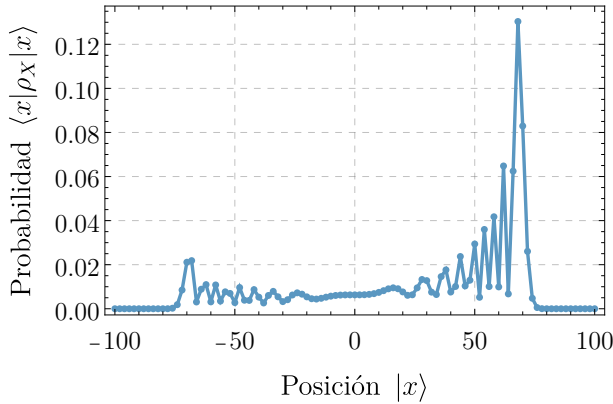


Figura 4: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una *DTQW* con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$.

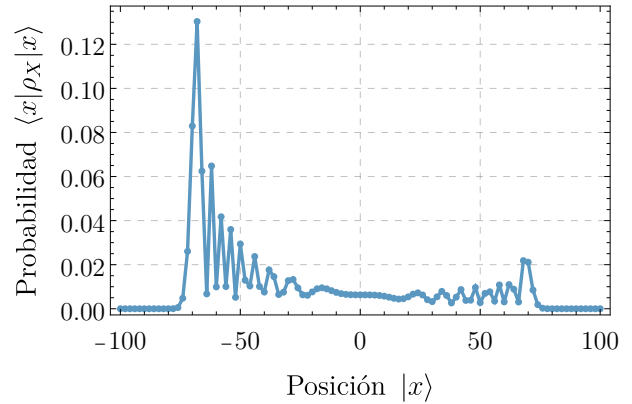


Figura 5: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una *DTQW* con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |1\rangle \otimes |0\rangle$.

⁵Son 201 dimensiones para tener desde -100 hasta 100.

Estos dos resultados nos permitieron validar el código generado, pues nuestros resultados concuerdan con los citados por Venegas-Andraca [10]. Esto nos permite tener la certeza que los resultados generados con nuestro método numérico son consistentes con la literatura.

Otro análisis interesante que se desprende de estos primeros resultados es su falta de simetría; pues el análogo clásico de las caminatas cuánticas, las caminatas aleatorias, cuando se encuentran balanceadas producen una distribución de probabilidad simétrica. Esto se puede observar en la figura 6. La razón por la cual se da la asimetría de la caminata cuántica radica en la propiedad de los sistemas cuánticos de interferir consigo mismos. Estas interferencias constructivas y destructivas se producen de tal modo que dirigen la caminata cuántica hacia uno de los lados y van disminuyendo las probabilidades en las áreas centrales.

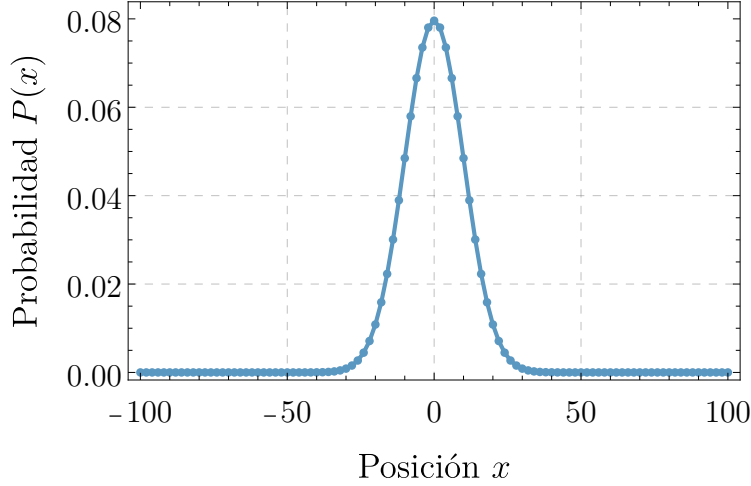


Figura 6: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una caminata aleatoria clásica balanceada.

3.2 Superposiciones en la moneda

A partir de estos primeros resultados, en los que vemos una dependencia importante del estado inicial de la moneda, se hace especialmente interesante saber qué sucederá al usar como estados iniciales de la moneda que sean una superposición de la base computacional. Los primeros estados que llamaron la atención después de haber probado con la base canónica de un *qubit*, $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, fueron las otras dos bases usuales $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ y $\{|+_y\rangle, |-_y\rangle\}$. La razón por la que usamos estas bases es por ser las eigenbases de las matrices de Pauli, las cuales representan las bases para representar estados de sistemas de espín 1/2.

De la simulación para $|+\rangle$ y $|-\rangle$ obtenemos resultados muy similares a los de $|0\rangle$ y $|1\rangle$, como se puede ver en las figuras 7 y 8. Este resultado es anti-intuitivo a primera vista, si los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ hacían tender la distribución de probabilidad hacia derecha e izquierda respectivamente, parece coherente pensar que una superposición entre estos podría dar lugar a una distribución simétrica. La razón por la cual la asimetría se mantiene está en el comportamiento del operador moneda, pues $C|+\rangle = |0\rangle$ y $C|-\rangle = |1\rangle$. Esto hace que el primer paso de la caminata en vez de avanzar hacia la dispersión de la caminata cuántica, prepare a la caminata a un estado muy similar al de las caminatas anteriores. En los siguientes cálculos podemos ver la evolución del estado $|0\rangle \otimes |0\rangle$ en $t = 1$ y $|+\rangle \otimes |0\rangle$ en $t = 2$:

Caminata con $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$ (un solo paso)

$$\begin{aligned} U(|0\rangle \otimes |0\rangle) &= S(|+\rangle \otimes |0\rangle), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle], \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} S(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle), \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |-1\rangle). \end{aligned}$$

Caminata con $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$ (dos pasos)

$$\begin{aligned}
U^2(|+\rangle \otimes |0\rangle) &= US(|0\rangle \otimes |0\rangle), \\
&= U(|0\rangle \otimes |1\rangle), \\
&= S(|+\rangle \otimes |1\rangle), \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}S[(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle], \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}S(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle), \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |2\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle).
\end{aligned}$$

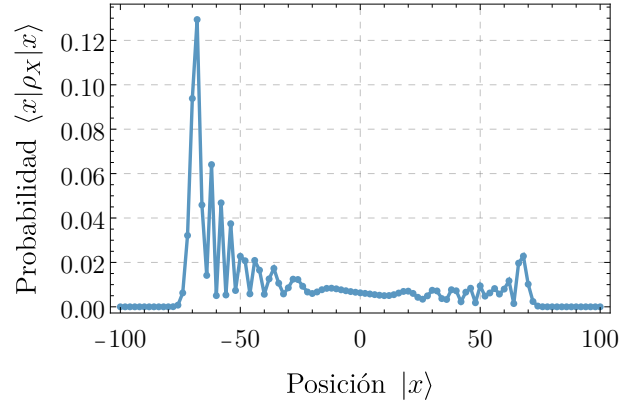
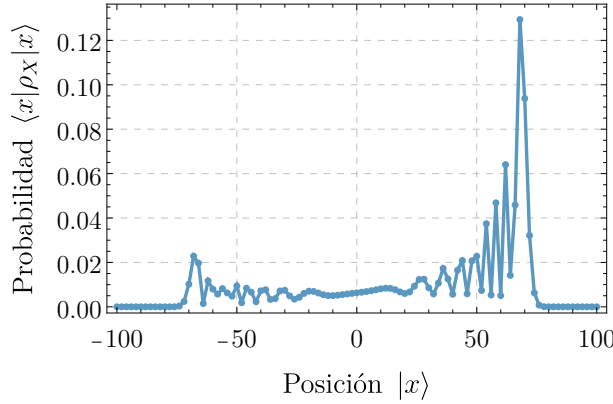


Figura 7: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$.

Figura 8: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |-\rangle \otimes |0\rangle$.

Como se puede ver, aunque las evoluciones no son idénticas, si tienen formas muy similares con un paso temporal de diferencia entre ellas.

Por otro lado, la simulación para $|+_y\rangle \otimes |0\rangle$ y $|-_y\rangle \otimes |0\rangle$ nos da resultados completamente distintos a los vistos anteriormente, como se puede ver en las figuras 9 y 10. Al contrario que los dos casos anteriores en donde las distribuciones de probabilidad siempre se encontraban tendidas hacia alguno de los lados. De hecho, cada una al contrario que su pareja, estas son simétricas e idénticas entre sí.

El que esta simetría ocurra en este caso particular es debido a la presencia de la unidad imaginaria en el segundo término de la superposición de $|+_y\rangle$, esto es por que el cambio de signo que da i^2 evita la interferencia destructiva en alguno de los lados de la caminata. La simetría de estos estados hará que sean opciones muy útiles cuando queramos realizar distintas simulaciones en el futuro que presenten comportamiento simétrico.

3.3 Superposiciones en la posición

Los resultados anteriores motivan investigar también el comportamiento de las caminatas cuánticas al encontrarse con superposiciones en el sistema de la posición. Desde el punto de vista físico, cambiar el estado de posición se puede interpretar como iniciar la caminata cuántica en una posición distinta a cero; en este sentido, nos interesa saber cual será el comportamiento ante superposiciones en este.

Antes de iniciar las simulaciones con superposición se decidió tomar un estado inicial en la posición para usar en cada uno de los ejemplos, en este caso se tomó $|\phi\rangle = (|20\rangle + |-20\rangle)/\sqrt{2}$. Por ahora tomaremos únicamente estados con superposición en el sistema de la posición. Los resultados se pueden ver en las figuras 11 y 12, de estas gráficas podemos observar, además de la inclinación ya característica de los estados iniciales de la moneda, que las distribuciones de probabilidad tienen dos máximos. Estos máximos además se encuentran

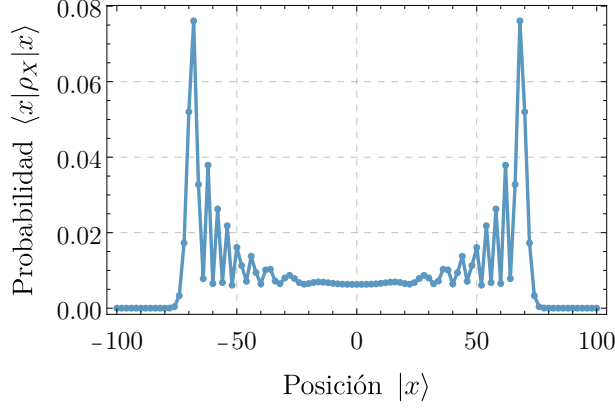


Figura 9: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |+_y\rangle \otimes |0\rangle$.

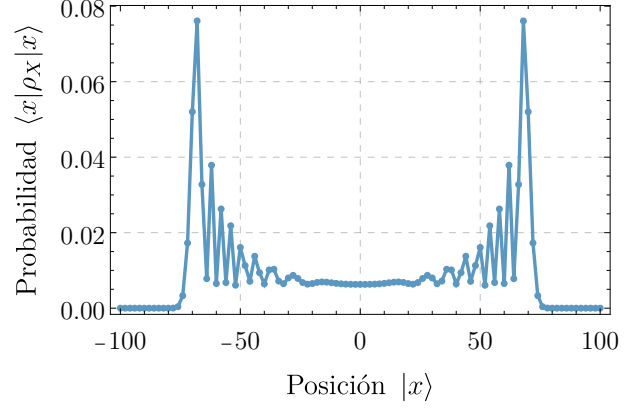


Figura 10: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |-_y\rangle \otimes |0\rangle$.

separados 40 posiciones en $|x\rangle$, lo que se corresponde a la separación inicial; lo que parece apuntar a que una caminata cuántica con superposición en la posición equivale a múltiples caminatas ocurriendo a la vez.

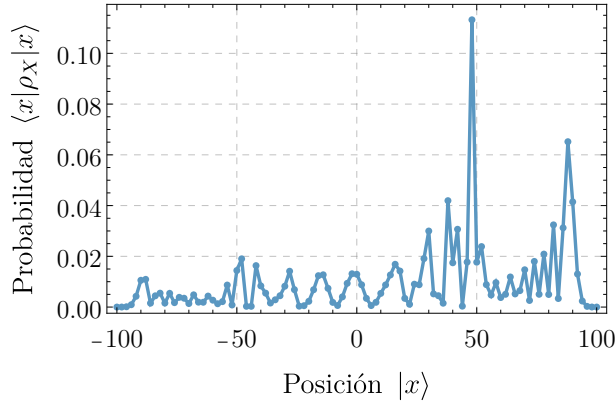


Figura 11: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |\phi\rangle$.

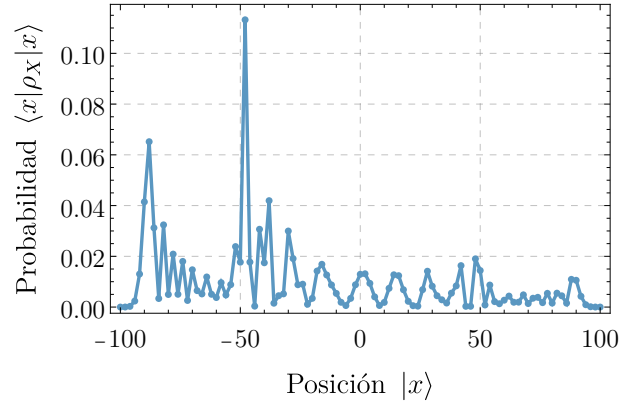


Figura 12: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |1\rangle \otimes |\phi\rangle$.

Asumiendo que lo anteriormente mencionado sea cierto, este comportamiento debería observarse también al usar $|+_y\rangle$ en la moneda. Para este estado inicial deberíamos ver 4 máximos los cuales también se encuentren separados por 40 espacios en la posición. El resultado de la simulación puede verse en la figura 13 y cumple con todo lo mencionado, esto es coherente con las interpretaciones previamente dadas.

3.4 Estados entrelazados

Hasta ahora las interpretaciones de los resultados han sido bastante sencillas, ya que no es tan difícil imaginar equivalentes clásicos a los estados producto que hemos usado hasta ahora. Podemos resumir que, las superposiciones en la moneda implican movimiento en distintas direcciones a la vez y que las superposiciones en la posición son múltiples caminantes moviéndose a la vez. A partir de esto, nos preguntamos cuál será el comportamiento de la caminata cuando tengamos estados entrelazados. Para estas simulaciones usamos los estados iniciales $(|0\rangle \otimes |-20\rangle + |1\rangle \otimes |20\rangle)/\sqrt{2}$ y $(|0\rangle \otimes |-20\rangle + i|1\rangle \otimes |20\rangle)/\sqrt{2}$.

La interpretación de las figuras 14 y 15 es menos clara, sin embargo sí se observa que mantienen bastante bien las propiedades mencionadas anteriormente; sea los 4 máximos con separación de 40 espacios entre los dos de cada lado.

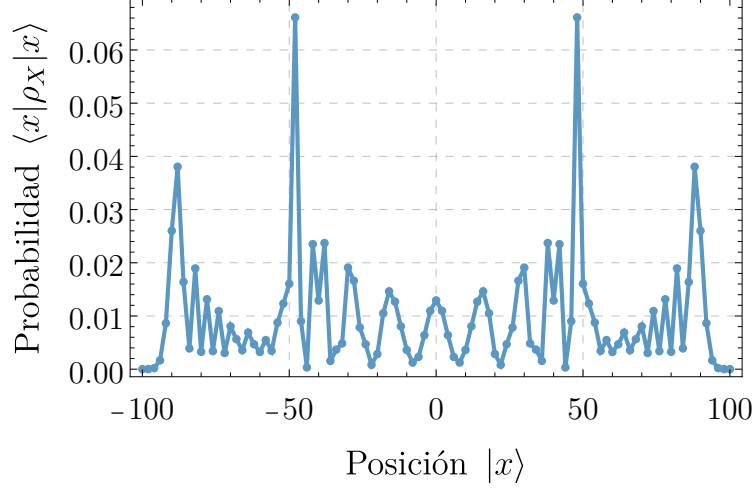


Figura 13: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |\phi\rangle$.

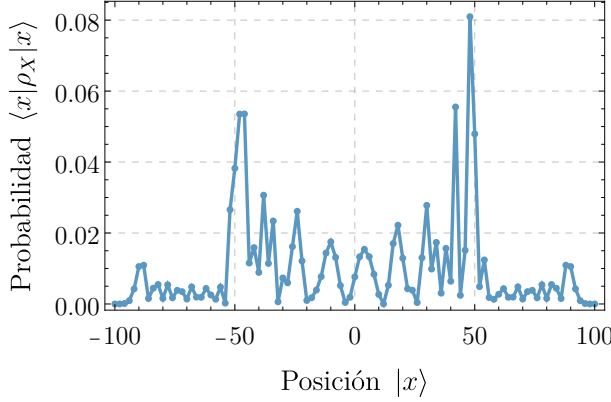


Figura 14: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = (|0\rangle \otimes |-20\rangle + |1\rangle \otimes |20\rangle)/\sqrt{2}$.

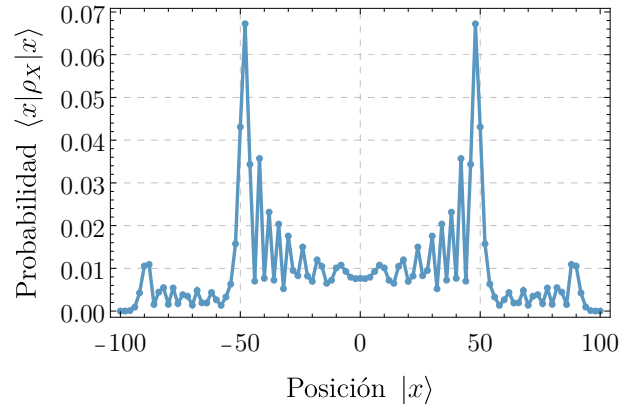


Figura 15: Distribución de probabilidad de 100 pasos de una DTQW con estado inicial $|\psi\rangle_0 = (|0\rangle \otimes |-20\rangle + i|1\rangle \otimes |20\rangle)/\sqrt{2}$.

3.5 Tablas de probabilidad

Finalmente para que el lector pueda examinar más fácilmente las distribuciones de probabilidad y se familiarice aun más con el comportamiento de las caminatas cuánticas se elaboraron tablas con los valores de la distribución de probabilidad⁶ para los primeros 6 pasos de las mismas.

En las figuras 16 y 17 podemos apreciar como empiezan a aparecer asimetrías desde el paso 3 de la caminata, cada una orientada hacia el lado que lo hacían sus gráficas igualmente.

En las figuras 18 y 19 resulta ver más fácil como se desplazan en una unidad temporal y espacial las caminatas respecto a las de 16 y 17 respectivamente.

Por último observamos la figura 20, la cual al ser idéntica a la del estado inicial $|\psi\rangle_0 = |-_y\rangle \otimes |0\rangle$, quedó en representación a ambas. En esta última figura podemos apreciar, ahora sí el comportamiento simétrico que exhibía su gráfica respectiva.

⁶A las que me gusta llamar triángulos de Pascal cuánticos, en analogía con la distribución de probabilidad de las caminatas aleatorias balanceadas.

$$|\psi_0\rangle = |0, 0\rangle$$

t \ p	$ -6\rangle$	$ -5\rangle$	$ -4\rangle$	$ -3\rangle$	$ -2\rangle$	$ -1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 2\rangle$	$ 3\rangle$	$ 4\rangle$	$ 5\rangle$	$ 6\rangle$
0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
1	0.	0.	0.	0.	0.	0.5	0.	0.5	0.	0.	0.	0.	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.25	0.	0.5	0.	0.25	0.	0.	0.	0.
3	0.	0.	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.	0.
4	0.	0.	0.0625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.0625	0.	0.
5	0.	0.03125	0.	0.15625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.53125	0.	0.03125	0.
6	0.015625	0.	0.15625	0.	0.078125	0.	0.125	0.	0.203125	0.	0.40625	0.	0.015625

Figura 16: Tabla de probabilidad para $|\psi\rangle_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$.

$$|\psi_0\rangle = |1, 0\rangle$$

t \ p	$ -6\rangle$	$ -5\rangle$	$ -4\rangle$	$ -3\rangle$	$ -2\rangle$	$ -1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 2\rangle$	$ 3\rangle$	$ 4\rangle$	$ 5\rangle$	$ 6\rangle$
0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
1	0.	0.	0.	0.	0.	0.5	0.	0.5	0.	0.	0.	0.	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.25	0.	0.5	0.	0.25	0.	0.	0.	0.
3	0.	0.	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.	0.
4	0.	0.	0.0625	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.0625	0.	0.
5	0.	0.03125	0.	0.53125	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.15625	0.	0.03125	0.
6	0.015625	0.	0.40625	0.	0.203125	0.	0.125	0.	0.078125	0.	0.15625	0.	0.015625

Figura 17: Tabla de probabilidad para $|\psi\rangle_0 = |1\rangle \otimes |0\rangle$.

4 Conclusiones y trabajo futuro

4.1 Conclusiones

Este trabajo de practicas sirvió para introducir el marco teórico necesario para el estudio de las caminatas cuánticas discretas; aunque el trabajo se orientó especialmente a las DTQW, se obtuvo la experiencia necesaria para abordar otros modelos de caminatas cuánticas. Se estudió el formalismo de la matriz de densidad, el cual nos ayuda a representar estados más generales aun que el formalismo de los vectores de estado. Este es especialmente útil en el estudio de caminatas cuánticas ya que, al ser estas el resultado de la interacción entre los sistemas de moneda y posición, nos permite tomar unicamente el resultado de la dinámica en el sistema de posición. Por otra parte, el estudio de los modelos de caminatas cuánticas nos permitió obtener los conocimientos necesarios para comprender el funcionamiento del modelo y poder implementarlo posteriormente.

$$|\psi_0\rangle = |+, 0\rangle$$

t \ p	$ -6\rangle$	$ -5\rangle$	$ -4\rangle$	$ -3\rangle$	$ -2\rangle$	$ -1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 2\rangle$	$ 3\rangle$	$ 4\rangle$	$ 5\rangle$	$ 6\rangle$
0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
1	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.5	0.	0.5	0.	0.	0.	0.
3	0.	0.	0.	0.	0.	0.25	0.	0.5	0.	0.25	0.	0.	0.
4	0.	0.	0.	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.
5	0.	0.	0.	0.0625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.0625	0.
6	0.	0.	0.03125	0.	0.15625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.53125	0.	0.03125

Figura 18: Tabla de probabilidad para $|\psi\rangle_0 = |+\rangle \otimes |0\rangle$.

$$|\psi_0\rangle = |-, 0\rangle$$

t \ p	-6)	-5)	-4)	-3)	-2)	-1)	0)	1)	2)	3)	4)	5)	6)
0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
1	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.5	0.	0.5	0.	0.	0.	0.	0.	0.
3	0.	0.	0.	0.25	0.	0.5	0.	0.25	0.	0.	0.	0.	0.
4	0.	0.	0.125	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.	0.	0.
5	0.	0.0625	0.	0.625	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.0625	0.	0.	0.
6	0.03125	0.	0.53125	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.15625	0.	0.03125	0.	0.

Figura 19: Tabla de probabilidad para $|\psi\rangle_0 = |-\rangle \otimes |0\rangle$.

$$|\psi_0\rangle = |+_y, 0\rangle$$

t \ p	-6)	-5)	-4)	-3)	-2)	-1)	0)	1)	2)	3)	4)	5)	6)
0	0.	0.	0.	0.	0.	0.	1.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
1	0.	0.	0.	0.	0.	0.5	0.	0.5	0.	0.	0.	0.	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.25	0.	0.5	0.	0.25	0.	0.	0.	0.
3	0.	0.	0.	0.125	0.	0.375	0.	0.375	0.	0.125	0.	0.	0.
4	0.	0.	0.0625	0.	0.375	0.	0.125	0.	0.375	0.	0.0625	0.	0.
5	0.	0.03125	0.	0.34375	0.	0.125	0.	0.125	0.	0.34375	0.	0.03125	0.
6	0.015625	0.	0.28125	0.	0.140625	0.	0.125	0.	0.140625	0.	0.28125	0.	0.015625

Figura 20: Tabla de probabilidad para $|\psi\rangle_0 = |+_y\rangle \otimes |0\rangle$.

Además de eso se elaboró un paquete en Mathematica con el cual se realizaron los cálculos mostrados en la sección de resultados. El código se realizó de manera que sea fácil de usar, fácilmente extensible para trabajo futuro y lo más modular posible; de este modo es posible experimentar con distintos estados iniciales y producir rápidamente resultados para estudiar.

Finalmente, del estudio de las distribuciones de probabilidad conseguimos bastantes conclusiones relativas al comportamiento de las caminatas cuánticas respecto a sus condiciones iniciales. En particular mencionaremos como afectan las superposiciones en cada uno de los espacios.

Para las superposiciones en la moneda encontramos que estos actúan como las direcciones de movimiento en cada paso temporal de la caminata y es necesario tener un operador que superponga el estado de la moneda en todas las direcciones para que la caminata se disperse por todo el espacio. Esto no implica que todas las superposiciones con las mismas amplitudes de probabilidad lleven a la misma distribución.

Para las superposiciones en el estado de la posición encontramos que el número de superposiciones equivale al número de caminantes simultáneos en este proceso, cosa que concuerda con el modo de dispersión que tienen las caminatas.

4.2 Trabajo futuro

Como trabajo a futuro se propone un trabajo de grado orientado a mantener el estudio de las caminatas cuánticas, pero mejorando un modelo de evolución por uno más general que las evoluciones unitarias; el llamado formalismo de canales cuánticos. Este trabajo requerirá una nueva implementación que no solo cambie el modelo de evolución, de evolución con operadores unitarios a canales cuánticos, sino que también requerirá que los estados iniciales sean matrices de densidad en vez de vectores de estado. Esto abrirá las posibilidades de investigación al poder usar también estados mixtos como estados iniciales.

Otra oportunidad de mejorar el trabajo actual se encuentra en la topología de espacio de posición. Cuando hablamos de la topología del espacio de posición nos referimos al número de estados de la posición y como

estos se encuentran conectados entre sí (e.g. un círculo, una rejilla, etc). Esto es por que experimentalmente la mayoría de caminatas ocurren en espacios mucho más pequeños y con distintas condiciones de frontera. Con estos cambios podríamos obtener simulaciones más cercanas a resultados experimentales para hacer comparaciones entre estos.

Referencias

- [1] G. Li and L. Li, “Super-exponential quantum advantage for finding the center of a sphere,” Jan. 2024. arXiv: 2401.14932.
- [2] A. M. Childs, R. Cleve, E. Deotto, E. Farhi, S. Gutmann, and D. A. Spielman, “Exponential algorithmic speedup by quantum walk,” tech. rep., 2002. ISBN: 0209131v225.
- [3] J. Wójcik, “Quantum Walks in Weak Stochastic Gauge Fields,” Feb. 2024. arXiv: 2402.09133.
- [4] H. Sahu and C. M. Chandrashekar, “Open system approach to neutrino oscillations in a quantum walk framework,” *Quantum Information Processing*, vol. 23, p. 7, Jan. 2024.
- [5] K. Sengupta, K. M. Shafi, S. P. Dinesh, S. Asokan, and C. M. Chandrashekar, “Experimental realization of universal quantum gates and six-qubit state using photonic quantum walk,” Mar. 2024. arXiv:2403.06665.
- [6] B. R. Rao, R. Srikanth, C. M. Chandrashekar, and S. Banerjee, “Quantumness of noisy quantum walks: a comparison between measurement-induced disturbance and quantum discord,” Dec. 2010. arXiv: 1012.5040.
- [7] R. Srikanth, S. Banerjee, and C. M. Chandrashekar, “Quantumness in a decoherent quantum walk using measurement-induced disturbance,” *Physical Review A*, vol. 81, p. 062123, June 2010. Publisher: American Physical Society.
- [8] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*. Cambridge ; New York: Cambridge University Press, 10th anniversary ed ed., 2010.
- [9] J. J. Sakurai and S. F. Tuan, *Modern quantum mechanics*. Reading (Mass.): Addison-Wesley, rev. ed ed., 1994.
- [10] S. E. Venegas-Andraca, “Quantum walks: a comprehensive review,” *Quantum Information Processing*, vol. 11, pp. 1015–1106, Oct. 2012.
- [11] A. Nayak and A. Vishwanath, “Quantum Walk on the Line,” Oct. 2000. arXiv:quant-ph/0010117.