



UNIVERSITÀ POLITECNICA DELLE MARCHE

FACOLTÀ DI INGEGNERIA

Corso di Laurea triennale in
INGEGNERIA GESTIONALE

**Simulazione Variazionale Quantistica per i
Modi Trasverso Magnetici delle Guide
D'onda**

**Variational Quantum Simulation for
Transverse Magnetic Waveguide Modes**

Relatore:

Prof. Franco Moglie

Correlatore:

Prof. Valter Mariani Primiani

Tesi di Laurea di:

Alessandro Antonio Macchia

Anno accademico:

2022/2023

ABSTRACT

Variational quantum algorithms have emerged as one of the most promising techniques for achieving quantum advantage on noisy intermediate scale quantum machines. In this thesis it is proposed an innovative approach that combines *VQA* with the finite difference method to calculate the propagation modes of electromagnetic waves in a hollow metallic waveguide. The 2-D waveguide problem starts with Helmholtz equation later approximated as a system of linear equations which is equivalent to a Hamiltonian matrix. Simple quantum expectation values are used to express the solutions that can be efficiently evaluated on quantum hardware. The final considerations of this dissertation show the results of the simulation to demonstrate the effectiveness of the proposed method for solving complex 2-D waveguide problems. The present findings showcase the potential of *VQA* as a tool to work out real world problems on quantum simulators.

CONTENTS

1	Richiami di elettromagnetismo	1
1.1	Onde elettromagnetiche	1
1.2	Guide d'onda	3
1.3	Equazione di Helmholtz	4
1.4	I modi TE	5
1.5	I modi TM	5
2	Richiami di meccanica quantistica	8
2.1	Principi generali	8
2.2	La notazione di Dirac	10
2.3	I postulati della meccanica quantistica	12
3	Quantum computing	14
3.1	Cosa sono i qubits	14
3.2	La sfera di Bloch	15
3.3	Gates quantistici	16
4	Simulazione Variazionale Quantistica per i modi TM	20
4.1	Variational Quantum Eigensolver (VQE)	20
4.2	Formulazione dell'Hamiltoniana	21
4.3	La decomposizione dell'Hamiltoniana	22
4.4	La trasformazione in base Pauli Z	23
4.5	La funzione di costo	23
5	Implementazione del VQE su un simulatore quantistico	26
5.1	Ambiente di sviluppo	26
5.2	Implementazione del VQE	26
6	Risultati	31
7	Considerazioni finali	37

INTRODUZIONE

L'approccio quantistico è diventato in questi ultimi anni di tale importanza da non poter essere trascurato ormai in nessun ambito di ricerca e sviluppo. A titolo esemplificativo, le onde elettromagnetiche vengono spesso trattate attraverso il metodo quantistico e risultano essenziali in molteplici settori, dalle comunicazioni wireless alla produzione di energia elettrica. Con una tale prospettiva di analisi, in questa tesi, si affronta il problema della progettazione di guide d'onda rettangolari per studiare i modi delle onde trasverso magnetiche (TM) tramite un algoritmo variazionale. Tra gli aspetti che il tema investe vi è l'utilizzo del Variational Quantum Eigensolver (VQE) per individuare i modi di propagazione delle onde TM , rappresentando un'importante applicazione della computazione quantistica in campo elettromagnetico. Questo tipo di onde, che hanno infiniti modi di propagazione, possono muoversi in particolari strutture, le cosiddette guide d'onda, che permettono il trasporto di energia elettromagnetica con bassissime perdite. La progettazione delle strutture sopra citate ha lo scopo di sfruttare i modi più efficienti di trasmissione rappresentando però un problema complesso, che richiede, per essere risolto, la soluzione dell'equazione di Helmholtz con opportune condizioni di contorno. La problematica sovraesposta quindi, non risulta essere di facile risoluzione: difatti l'equazione di Helmholtz per essere utilizzata e poi implementata in un computer quantistico deve essere semplificata e discretizzata. Viene quindi qui in rilievo l'applicazione della computazione quantistica tramite l'uso del VQE . L'idea alla base di tale algoritmo è di introdurre un'Ansatz, ovvero una funzione d'onda parametrizzata, che approssima la soluzione dell'equazione di Helmholtz. La funzione d'onda viene ottimizzata attraverso un processo di ricerca variazionale, al fine di minimizzare la funzione di costo associata all'Hamiltoniana del sistema. Il processo di ottimizzazione, tramite il VQE , trova l'autovalore di energia minimo dell'Hamiltoniana, che corrisponde alla frequenza di propagazione minima della guida d'onda.

Dopo una breve introduzione alle onde elettromagnetiche, alle guide d'onda e ai concetti fondamentali di meccanica quantistica e quantum computing, si procederà con la trattazione del problema partendo dalla sua descrizione analitica tramite l'equazione di Helmholtz semplificata, utilizzando opportune condizioni di contorno, in un'equazione matriciale di autovalori ovvero la matrice Hamiltoniana per le onde TM . A questo punto si introdurrà una funzione di costo, associata ad un opportuno Ansatz, i cui expectation value rappresenteranno il minimo valore dell'energia di propagazione. Infine, si illustreranno

gli step fondamentali e i risultati ottenuti dall'implementazione del VQE con 3 qubits su un simulatore quantistico utilizzato durante il tirocinio. L'ambiente di programmazione su cui è stato implementato l'algoritmo è Jupyter tramite il linguaggio Python e utilizzando le librerie Qiskit, Numpy, Mathplotlib e Scipy.

Si dimostrerà, quindi, come l'utilizzo del Variational Quantum Eigensolver rappresenti una soluzione innovativa ed efficace nella progettazione di dispositivi elettronici basati su guide d'onda rettangolari delle onde TM. Grazie all'impiego di tecniche di deep learning e di intelligenza artificiale, infatti, è possibile automatizzare il processo di progettazione e di ottimizzazione delle guide d'onda, riducendo i tempi e i costi necessari per la realizzazione di dispositivi funzionali e performanti.

RICHIAMI DI ELETTROMAGNETISMO

L'elettromagnetismo è una branca della fisica che studia l'interazione tra particelle cariche e il campo elettromagnetico. Il campo elettromagnetico è composto da due componenti, il campo elettrico e il campo magnetico, che sono strettamente interconnessi e si propagano attraverso lo spazio. Le basi teoriche dell'elettromagnetismo sono state fornite da Maxwell che, nel XIX secolo, propose un sistema di quattro equazioni differenziali parziali in grado di descrivere il comportamento dei campi elettromagnetici. Tali equazioni rappresentano una sintesi delle leggi dell'elettromagnetismo precedentemente formulate da Coulomb, Ampere, Faraday ed altri fisici dell'epoca:

- Legge di Gauss per il campo elettrico: il flusso del campo elettrico attraverso una superficie chiusa è proporzionale alla carica totale contenuta all'interno della superficie;
- Legge di Gauss per il campo magnetico: il flusso del campo magnetico attraverso una superficie chiusa è sempre nullo;
- Legge di Faraday: una variazione del campo magnetico nel tempo genera un campo elettrico circolare;
- Legge di Ampere-Maxwell: una corrente elettrica o una variazione del campo elettrico genera un campo magnetico circolare.

L'elettromagnetismo spiega fenomeni fisici, come la luce, l'elettricità, il magnetismo, le onde radio e molte altre forme di radiazione elettromagnetica.

In questo capitolo si procederà con la descrizione delle onde elettromagnetiche, per poi introdurre le guide d'onda e i relativi modi di propagazione. In particolare, si analizzeranno i modi di propagazione trasverso magnetici ed elettrici, i quali costituiscono il cuore della trattazione.

1.1 ONDE ELETTROMAGNETICHE

Le onde elettromagnetiche sono onde che si propagano attraverso il vuoto o attraverso un mezzo materiale trasportando energia e quantità di moto da un punto ad un altro dello spazio mediante campi elettrici e magnetici oscillanti che si propagano in modo perpendicolare l'uno rispetto all'altro e rispetto alla direzione di propagazione dell'onda stessa. Lo studio del piano di propagazione di esse inoltre ci suggerisce che le onde elettromagnetiche sono onde trasversali, infatti, sia il

campo magnetico sia il campo elettrico risultano perpendicolari alla propagazione dell'onda stessa. La loro natura trasversale consente loro di interagire con la materia in modi specifici e di essere utilizzate in molte applicazioni, come le comunicazioni wireless, le tecnologie laser e l'imaging medico e scientifico.

In generale, la propagazione delle onde può essere descritta mediante i parametri:

- ampiezza (A) ovvero lo spostamento massimo di un punto dalla posizione di equilibrio;
- lunghezza d'onda (λ) ovvero la distanza percorsa dall'onda in un periodo T o la minima distanza tra due punti in cui lo spostamento dalla configurazione di equilibrio assume lo stesso valore;
- frequenza (f) che rappresenta il numero di vibrazioni complete che avvengono in 1 secondo e si misura in Hertz (H).

Oltre ai parametri ampiezza, lunghezza d'onda e frequenza è fondamentale determinare l'energia dell'onda che è data dal prodotto della costante di Planck (h) per la frequenza (f). La rappresentazione grafica delle onde elettromagnetiche è descritta dallo spettro elettromagnetico che è l'insieme di tutte le possibili frequenze delle onde elettromagnetiche ed è diviso in diverse regioni ognuna delle quali corrisponde a una gamma specifica di frequenze e lunghezze d'onda. Queste regioni sono generalmente raggruppate in base alla loro energia, dalla più bassa alla più alta:

- Onde radio: questa regione dello spettro ha la frequenza più bassa e la lunghezza d'onda più lunga e sono utilizzate per la comunicazione radio e televisiva, la navigazione e la ricerca scientifica;
- Microonde: questa regione dello spettro ha frequenze leggermente più alte rispetto alle onde radio e viene utilizzata per la comunicazione wireless, la cottura dei cibi e la ricerca scientifica;
- Infrarossi: questa regione dello spettro ha frequenze leggermente più alte rispetto alle microonde e viene utilizzata per la rilevazione di calore, la terapia fisica e la comunicazione wireless a corto raggio;
- Luce visibile: questa regione dello spettro è quella che gli esseri umani possono vedere e va dal rosso al violetto;
- Ultravioletto: questa regione dello spettro ha frequenze leggermente più alte rispetto alla luce visibile e viene utilizzata per la ricerca scientifica e la fotografia;

- Raggi X: questa regione dello spettro ha frequenze molto alte e vengono utilizzate per la radiografia medica, la ricerca scientifica e la sicurezza dei trasporti;
- Raggi gamma: questa regione dello spettro ha la frequenza più alta e lunghezza d'onda più corta e vengono utilizzati per la radioterapia, la ricerca scientifica.

In sintesi, lo spettro elettromagnetico rappresenta l'insieme di tutte le possibili frequenze delle onde elettromagnetiche e ha molteplici applicazioni in campo scientifico e tecnologico. La relazione simmetrica tra il campo elettrico e il campo magnetico viene sintetizzata tramite le quattro equazioni di Maxwell.

Infine, lo studio delle onde elettromagnetiche è fondamentale alla comprensione e alla descrizione del comportamento che hanno le stesse nelle immediate vicinanze di superfici conduttrici o dielettriche, nel caso in cui la loro configurazione abbia l'effetto di guidare le onde lungo le superfici medesime.

1.2 GUIDE D'ONDA

Una guida d'onda è una struttura che confina e convoglia onde elettromagnetiche all'interno di un percorso specifico compreso fra due estremità. La scelta del tipo di guida d'onda dipende dalle specifiche esigenze dell'applicazione, come la frequenza del segnale, la distanza di trasmissione e la larghezza di banda. Grazie alla loro versatilità e alla capacità di trasportare segnali ad alta velocità e frequenza, le guide d'onda sono diventate un elemento essenziale nella tecnologia moderna. Da un punto di vista elettronico, le guide d'onda si presentano come dei filtri passa alto, con frequenze di taglio fT dell'ordine dei GHz, con un diagramma di attenuazione che presenta un minimo. Le onde elettromagnetiche, immesse nella guida attraverso antenne particolari di varia forma, si propagano dentro le guide d'onda per riflessioni successive lungo le pareti interne fino ad arrivare a destinazione. Particolari e molto usate sono le guide d'onda rettangolari. Le guide d'onda rettangolari sono un tipo di guida d'onda che ha una sezione trasversale rettangolare, le cui dimensioni sono normalizzate, con il lato maggiore A che è lungo il doppio del lato minore B . La sovrapposizione fra l'onda incidente e l'onda riflessa dalle pareti della guida dà luogo a zone di interferenza costruttiva e zone di interferenza distruttiva alternate, che determinano distribuzioni dei due campi elettrici e magnetici all'interno della guida dalle forme caratteristiche. Queste guide d'onda sono utilizzate per la trasmissione di onde elettromagnetiche ad alta frequenza e sono comunemente utilizzate in applicazioni come radar, satelliti, trasmissione di segnali wireless ad alta velocità e in alcuni dispositivi medici. Ogni guida ha una serie di modi di propagazione possibili, e la scelta del modo

dipende dalle specifiche esigenze dell'applicazione. La presenza di modi di propagazione multipli, ovvero onde elettromagnetiche che si propagano lungo la guida d'onda con diverse frequenze e lunghezze d'onda può causare interferenze e perdite di segnale, limitando la capacità della guida d'onda di trasmettere segnali ad alta frequenza. Per far fronte a tale problema si utilizza un VQA (Variational Quantum Algorithm) in combinazione con il metodo delle differenze finite per il calcolo delle modalità di propagazione di un'onda elettromagnetica in una guida d'onda metallica cava, partendo dall'equazione di Helmholtz.

1.3 EQUAZIONE DI HELMHOLTZ

L'equazione di Helmholtz è un'equazione differenziale parziale che descrive la propagazione di onde in un mezzo omogeneo e isotropo. In particolare, l'equazione di Helmholtz descrive l'evoluzione temporale di un campo scalare o vettoriale, come il campo elettrico o magnetico di un'onda elettromagnetica.

Consideriamo una guida d'onda metallica cava rettangolare, il cui asse di propagazione dell'onda coincide con l'asse z e che è riempita di materiale omogeneo caratterizzato da una determinata permeabilità μ e permittività ϵ . I campi elettrici e magnetici che si propagano all'interno della guida d'onda possono essere suddivisi in componenti parallele e trasversali all'asse z .

Se indichiamo con E_z e H_z rispettivamente i campi elettrici e magnetici trasversali, possiamo ottenere le equazioni di Helmholtz per l'onda elettrica trasversa (TE) e l'onda magnetica trasversa (TM), che descrivono la propagazione di onde scalari bidimensionali all'interno della guida d'onda:

$$\nabla_s^2 H_z = -k_s^2 H_z \quad (1.1)$$

per le onde TE

$$\nabla_s^2 E_z = -k_s^2 E_z \quad (1.2)$$

per le onde TM

dove:

- $k_s^2 = k^2 - k_z^2$;
- $k = (\omega^2 \mu \epsilon)^{\frac{1}{2}}$.

Inoltre, le onde TE e le onde TM, devono soddisfare precise condizioni di contorno all'interno della guida metallica:

- La componente E_z soddisfa la condizione al contorno di Dirichlet $E_z = 0$;
- La componente H_z soddisfa la condizione al contorno di Neumann $\hat{n} \cdot \nabla_s H_z = 0$ (con $\hat{n}$ che rappresenta un vettore unitario normale).

Tradizionalmente l'equazione di Helmholtz viene discretizzata e convertita in equazione matriciale e successivamente implementata su computers classici. Tuttavia, a differenza del calcolo classico in cui sono richiesti $O(n)$ bit per rappresentare un'equazione di matrice di dimensione N , nel calcolo quantistico sono necessari solo $\log_2 N$ qubit dimostrando una maggiore semplicità. Ne deriva che, l'approccio quantistico permette una maggiore efficienza e velocità di calcolo.

1.4 I MODI TE

Le onde trasverso elettriche (TE) sono un tipo di onde elettromagnetiche caratterizzate da un campo elettrico trasversale alla direzione di propagazione dell'onda e un campo magnetico parallelo alla direzione di propagazione. I modi TE, i quali rappresentano le onde trasversali elettromagnetiche all'interno di una guida d'onda rettangolare, sono identificati da una coppia di numeri che indicano le variazioni lungo la direzione x e la direzione y . Un'onda trasverso elettrica con m variazioni lungo la direzione x di mezza seno e n variazioni lungo la direzione y di mezza seno viene indicata come TE_{mn} [Ramo2002]. Le onde TE possono avere m o n uguali a zero ma non entrambi contemporaneamente.

Il modo TE_{10} (figura 1.1) è il modo fondamentale ed esso è di grande importanza in ambito ingegneristico in quanto:

- La frequenza di taglio non dipende da una delle dimensioni della sezione trasversa;
- La polarizzazione del campo è fissata;
- Per una data frequenza non presenta un'eccessiva attenuazione.

Ci sono altri infiniti modi TE possibili, ciascuno dei quali è rappresentato da determinate combinazioni di valori interi di m ed n .

1.5 I MODI TM

Le onde trasverso magnetiche (TM) sono un tipo di onde elettromagnetiche caratterizzate da un campo magnetico trasversale alla direzione di propagazione dell'onda e un campo elettrico parallelo alla direzione di propagazione. I modi TM, i quali rappresentano le onde trasversali elettromagnetiche all'interno di una guida d'onda rettangolare, sono identificati da una coppia di numeri che indicano

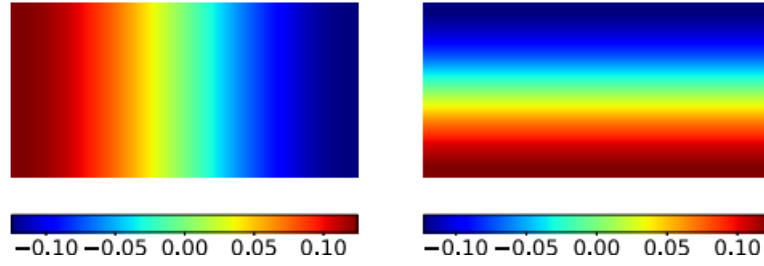


Figure 1.1: Rappresentazione scalare 2D del campo magnetico dei modi TE₁₀ e TE₀₁.

le variazioni lungo la direzione x e la direzione y .

Un'onda trasverso magnetica con m variazioni lungo la direzione x di mezza senoide e n variazioni lungo la direzione y di mezza senoide viene indicata come TM_{mn} (con n e m numeri interi) [Ramo2002]. Il modo TM_{11} è il modo fondamentale di propagazione in una guida d'onda rettangolare, ovvero il modo con la frequenza di taglio più bassa. In questo modo, la componente di campo magnetico è trasversale alla direzione di propagazione dell'onda, mentre il campo elettrico ha una componente solamente lungo la direzione di propagazione. La frequenza di risonanza del modo TM_{11} dipende dalle dimensioni della guida d'onda e dalle proprietà del materiale di cui è costituita. Poiché il modo TM_{11} è il modo con la frequenza di taglio più bassa, tutti i modi di propagazione successivi avranno frequenze di risonanza più alte e presenteranno un numero crescente di nodi di campo elettrico e magnetico lungo le due direzioni trasversali della guida d'onda.

Ci sono altri infiniti modi TM possibili, ciascuno dei quali è rappresentato da determinate combinazioni di valori interi di m ed n . Di seguito, nella figura 1.2, si riportano rispettivamente i modi TM_{11} e TM_{21} i quali si mostrerà successivamente che saranno ottenuti tramite l'implementazione del VQE.

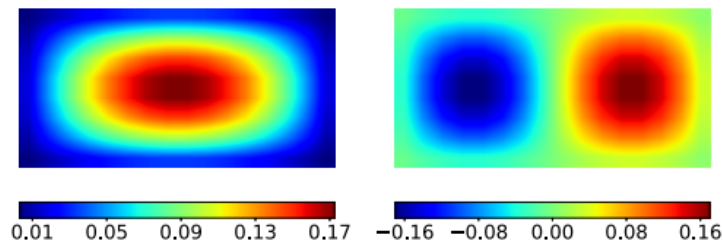


Figure 1.2: Rappresentazione scalare 2D del campo elettrico dei modi TM_{11} e TM_{21} .

A differenza dei modi TE, i modi TM richiedono la presenza di un campo elettrico lungo la direzione di propagazione, il che significa che non possono esistere in una guida d'onda priva di conduttori, infatti, m ed n non possono assumere il valore zero. Inoltre, i modi TM hanno una frequenza di taglio superiore rispetto ai modi TE, conseguente-

mente la frequenza più bassa a cui un dato modo TM può propagarsi è maggiore della frequenza più bassa per il corrispondente modo TE. La loro comprensione e la loro gestione sono fondamentali per garantire la trasmissione affidabile dei dati e delle informazioni in molte applicazioni tecnologiche. Tuttavia, come tutte le onde elettromagnetiche anche le TM possono essere soggette a perdite di energia a causa di effetti di dispersione e riflessione, che possono essere minimizzati attraverso l'uso di tecniche di progettazione avanzate. Per ottimizzare la propagazione di queste onde attraverso una guida metallica, si possono adottare diverse strategie, tra cui:

- Scegliere la giusta geometria della guida d'onda poichè essa influisce sulla propagazione delle onde. Ad esempio, una guida d'onda a microstriscia con un'ampiezza adeguata può minimizzare le perdite di propagazione;
- Utilizzare materiali con una bassa costante dielettrica, come il teflon o l'aria, poichè essi riducono le perdite di propagazione e aumentano la larghezza di banda della guida d'onda;
- Utilizzare materiali conduttori di alta qualità, come l'oro o l'argento, poichè riducono le perdite di propagazione per effetto Joule;
- Utilizzare tecniche di schermatura elettromagnetica come l'uso di gusci metallici o di materiali dielettrici, i quali riducono le interferenze elettromagnetiche esterne e migliorano la propagazione delle onde;
- Utilizzare tecniche di compensazione delle perdite come l'uso di materiali magnetici o di amplificatori di segnale, i quali possono compensare le perdite di propagazione e migliorare la qualità del segnale;
- Utilizzare tecniche di modulazione del segnale, come la modulazione di ampiezza o di fase, migliorando la qualità del segnale e aumentare la sua portata.

In generale, la scelta delle tecniche di ottimizzazione dipende dalle specifiche esigenze dell'applicazione e dalle caratteristiche della guida d'onda utilizzata. Prima proseguire con la trattazione è necessario fornire le basi teoriche di meccanica quantistica e quantum computing.

RICHIAMI DI MECCANICA QUANTISTICA

La meccanica quantistica è una teoria fisica che descrive il comportamento delle particelle a livello microscopico, come gli atomi, le molecole e i fotoni. Tale teoria ha introdotto concetti fondamentali come gli stati quantistici e le funzioni d'onda, che descrivono la probabilità di trovare una particella in una determinata posizione o con una determinata quantità di moto. Questi concetti sono stati formulati da fisici come Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg e Max Born. Quest'ultima inoltre ha portato ad una serie di risultati sorprendenti e controintuitivi, come ad esempio l'effetto tunnel, la non-località e l'entanglement quantistico. La meccanica quantistica si basa su postulati e principi fondamentali ed ha importanti applicazioni in molti campi della scienza e della tecnologia, come l'elettronica, la crittografia, la chimica, la biologia e la fisica delle particelle. Nonostante i suoi successi, rimane una teoria molto complessa e ancora oggi suscita dibattiti tra i fisici, soprattutto riguardo all'interpretazione dei suoi concetti fondamentali. Tuttavia, essa rappresenta una delle teorie scientifiche più importanti e influenti del XX secolo, e continua ad avere un ruolo centrale nella ricerca scientifica moderna.

2.1 PRINCIPI GENERALI

La meccanica quantistica si basa su 4 principi fondamentali. Essi sono:

- La dualità onda-particella;
- Il principio di indeterminazione di Heisenberg;
- La sovrapposizione quantistica;
- L'entanglement quantistico.

La dualità onda-particella descrive il comportamento sia corpuscolare sia ondulatorio delle particelle subatomiche, in cui la posizione e la velocità non possono essere determinate simultaneamente con precisione assoluta. In particolare, le particelle subatomiche hanno una natura ondulatoria che si manifesta quando si muovono attraverso lo spazio e interagiscono con altre particelle. Questa natura ondulatoria è descritta da una funzione d'onda, che rappresenta la probabilità di trovare la particella in un determinato punto nello spazio e in un determinato momento. Tuttavia, quando una particella subatomica viene osservata o misurata, il suo comportamento diventa particellare e la

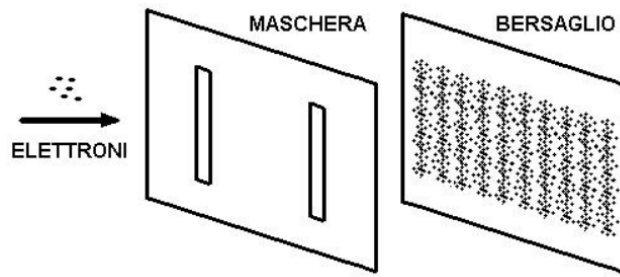


Figure 2.1: Esperimento della doppia fenditura proposto da Young per dimostrare la dualità onda-particella.

sua posizione e il suo momento diventano determinati con una certa precisione. L'esperimento della doppia fenditura (figura 2.1) spiega e dimostra in modo chiaro il dualismo.

L'esperimento, proposto da Young, consiste nel far passare un fascio di particelle (ad esempio, elettroni o fotoni) attraverso una lastra con due fenditure vicine. Dopo la lastra, le particelle si propagano come onde e interferiscono tra loro, generando un pattern di interferenza sullo schermo posto alla fine del percorso dimostrandone la doppia natura. Questo dualismo è noto come principio di indeterminazione di Heisenberg. Lo stesso stabilisce che la precisione con cui si può misurare la posizione di una particella è inversamente proporzionale alla precisione con cui si può misurare il suo momento.

Il principio di indeterminazione di Heisenberg è espresso dall'equazione:

$$\Delta x * \Delta p \geq (h/2\pi) \quad (2.1)$$

dove:

- x è la deviazione standard della posizione della particella;
- p è la deviazione standard del momento della particella;
- h è la costante di Planck.

Conseguentemente all'impossibilità di determinare contemporaneamente posizione e velocità della particella si arriva al concetto di sovrapposizione quantistica. Esso descrive lo stato di una particella subatomica quando esiste in più stati contemporaneamente. In altre parole, una particella subatomica può essere in uno stato di sovrapposizione quantistica quando la sua funzione d'onda descrive la probabilità di trovarla in più posizioni o stati di spin contemporaneamente. La sovrapposizione quantistica ha importanti implicazioni per la comprensione della realtà a livello microscopico. In particolare, essa implica che la natura delle particelle subatomiche è fondamentalmente probabilistica e che la misura di una proprietà fisica di una particella

può influenzare il suo stato. Quando due particelle subatomiche sono legate in modo tale che lo stato di una particella dipende dallo stato dell'altra particella, anche se queste particelle si trovano a distanze molto grandi l'una dall'altra sono dette entangled. L'entanglement quantistico è stato dimostrato sperimentalmente in numerosi esperimenti, come l'esperimento di Bell, che ha dimostrato che le proprietà fisiche di due particelle entangled sono strettamente correlate.

Esso ha importanti implicazioni per la fisica quantistica e la tecnologia quantistica (ad esempio nell'utilizzo di computer quantistici). Tuttavia, è ancora un argomento di ricerca attivo tra i fisici, che cercano di comprendere la natura fondamentale della realtà a livello microscopico. Un gruppo di ricercatori di Glasgow ha ottenuto per la prima volta le immagini dell'entanglement quantistico che, come sosteneva Einstein, rappresenta una "spaventosa azione a distanza".

La Meccanica Quantistica per descrivere lo stato di un sistema quantistico utilizza lo spazio di Hilbert.

Lo spazio di Hilbert, cosiddetto dal nome del fisico tedesco David Hilbert che lo teorizzò alla fine de XIX secolo, è uno spazio vettoriale utilizzato per descrivere gli stati quantistici di un sistema fisico tramite vettori detti ket che soddisfano le proprietà di completezza e di separabilità. In virtù di tali proprietà lo stato quantistico può essere espresso come una combinazione lineare di altri stati quantistici e lo spazio di Hilbert può essere decomposto in modo univoco in sottospazi di dimensione finita. Le trasformazioni unitarie sui vettori ket e bra (versione coniugata del ket), sono eseguite da operatori lineari i quali rappresentano le osservabili fisiche, come la posizione e il momento che, agendo su tali vettori, ne conservano le proprietà di normalizzazione. In sintesi, lo spazio di Hilbert è uno strumento fondamentale per la descrizione matematica della meccanica quantistica e del quantum computing, poiché permette di rappresentare in modo rigoroso gli stati quantistici e le osservabili fisiche, nonché di descrivere l'evoluzione temporale dei sistemi quantistici.

2.2 LA NOTAZIONE DI DIRAC

La notazione bracket (il nome deriva dal fatto che il prodotto scalare di due stati $|\psi\rangle$ e $|\gamma\rangle$ è denotato con un bracket letteralmente dall'inglese "parentesi"), anche conosciuta come notazione di Dirac, è una notazione matematica sviluppata dal fisico britannico Paul Dirac per descrivere gli stati quantistici in meccanica quantistica. Grazie a tale notazione, ancora oggi ampiamente utilizzata, è possibile rappresentare in modo semplice ed elegante gli stati quantistici, le osservabili fisiche e le loro relazioni matematiche, semplificando la formulazione di molti problemi quantistici. Inoltre, la notazione di Dirac ha consentito lo sviluppo di nuovi strumenti matematici, come la teoria degli operatori, la teoria delle distribuzioni e la teoria delle funzioni analitiche

complesse, che sono utili in molti campi della fisica e della matematica. Questa notazione è basata, come detto in precedenza, sulla rappresentazione degli stati quantistici come vettori nello spazio di Hilbert. In tale notazione, uno stato quantistico viene rappresentato da un ket, che è un vettore colonna normalizzato nello spazio di Hilbert. Il ket, ad esempio $|\psi\rangle$, viene scritto tra parentesi angolari e contiene tutte le informazioni che possono essere conosciute sul sistema in questione. Il coniugato del ket $|\psi\rangle$ è rappresentato dal bra $\langle\psi|$, che rappresenta il vettore riga complesso coniugato del ket. L'operatore di un'osservabile fisica viene rappresentato da un bra-ket, che è un prodotto scalare tra due kets. Il bra-ket viene scritto come $\langle\psi|A|\gamma\rangle$, dove ψ e γ sono i kets rappresentanti gli stati quantistici del sistema e A è l'operatore che rappresenta l'osservabile fisica. Il bra-ket rappresenta il valore medio dell'osservabile A nello stato quantistico $|\psi\rangle$, ovvero la media di tutte le misure possibili dell'osservabile A che possono essere effettuate sul sistema nello stato $|\psi\rangle$.

Ad esempio, se abbiamo un operatore lineare A e uno stato quantistico $|\psi\rangle$, l'azione di A su $|\psi\rangle$ viene rappresentata come: $A|\psi\rangle = |\gamma\rangle$ che può anche essere scritto come $|\gamma\rangle = \langle\psi|A^\dagger$ dove $A^\dagger$ rappresenta la trasposta coniugata di A . Questa scrittura ha alcune proprietà matematiche importanti che la rendono un utile strumento per la risoluzione di problemi quantistici. Una delle proprietà fondamentali è la linearità del prodotto scalare. In altre parole, la somma di due kets moltiplicata per un coefficiente scalare è uguale alla somma dei prodotti scalari dei due kets moltiplicati per lo stesso coefficiente scalare. Ad esempio, se $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sono due stati quantistici e α e β sono coefficienti scalari, allora:

$$\langle\alpha\psi_1 + \beta\psi_2| = \alpha\langle\psi_1| + \beta\langle\psi_2|.$$

Un'altra proprietà è la completezza degli autostati. Ogni stato quantistico può essere espresso come una combinazione lineare di autostati di un operatore hermitiano. Questa proprietà consente di esprimere un qualsiasi stato quantistico in termini di una base di autostati, semplificando la sua rappresentazione matematica. Infine, essa consente anche di esprimere le relazioni di commutazione tra gli operatori. In particolare, se due operatori A e B commutano, cioè $[A, B] = 0$, allora è possibile scrivere la seguente relazione:

$$AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle$$

dove $|\psi\rangle$ è uno stato quantistico arbitrario. Questa relazione è nota come relazione di commutazione di Heisenberg.

2.3 I POSTULATI DELLA MECCANICA QUANTISTICA

I postulati della meccanica quantistica sono un insieme di asseriti di base che rappresentano un punto di partenza nella formulazione della teoria quantistica in forma assiomatica [Schwabl2010] [Miller2008].

- Primo postulato

La conoscenza dello stato di un sistema quantistico è completamente contenuta in un vettore normalizzato nello spazio di Hilbert indicato come ket $|\psi\rangle$.

- Secondo postulato

Un'osservabile fisica è rappresentata matematicamente da un operatore A che agisce sui kets.

- Terzo postulato

L'unico possibile risultato di una misura di un'osservabile è uno degli autovalori a_n dell'operatore A corrispondente.

- Quarto postulato

La probabilità di ottenere l'autovalore a_n in una misura dell'osservabile A sul sistema nello stato $|\psi\rangle$ è:

$$P_{a_n} = |\langle a_n | \psi \rangle|^2$$

dove $|a_n\rangle$ è l'autovettore normalizzato di A corrispondente all'autovalore a_n .

- Quinto postulato

Dopo una misura di A che restituisce il risultato a_n , il sistema quantistico si trova in uno stato nuovo che è la proiezione normalizzata del ket originale del sistema sul ket corrispondente al risultato della misura:

$$|\psi'\rangle = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}.$$

In questo postulato per la prima volta appare l'Expectation Value, pertanto, occorre introdurlo anche se si tratterà più nel dettaglio nei successivi capitoli. In generale, l'Expectation Value è il valore atteso di un'osservabile su uno stato quantistico. Se consideriamo uno stato quantistico $|\psi\rangle$ e un'osservabile A , l'Expectation Value di A rispetto a $|\psi\rangle$ è dato da:

$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$. In altre parole, l'Expectation Value di A è il valore medio di tutte le misure che si ottengono quando si misura l'osservabile A su uno stato quantistico $|\psi\rangle$. L'osservabile di interesse del problema sarà l'Hamiltoniana del sistema quantistico, che rappresenta l'energia totale del sistema.

- Sesto postulato

L'evoluzione temporale di un sistema quantistico è determinata dall'operatore Hamiltoniano o dell'energia totale $H(t)$ attraverso l'equazione di Schrödinger:

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

dove

- $\hbar$ è la costante di Planck ridotta;
- H è l'operatore hamiltoniano del sistema;
- $|\psi\rangle$ è la funzione d'onda del sistema.

QUANTUM COMPUTING

Il quantum computing è una tecnologia emergente che sfrutta i principi della meccanica quantistica per eseguire operazioni su dati e informazioni. A differenza del classico calcolo binario, che utilizza bit che possono essere in uno stato di 0 o 1, il quantum computing utilizza qubit, che possono essere in uno stato di 0, 1 o in una sovrapposizione di entrambi gli stati. La computazione quantistica ha il potenziale per risolvere alcuni dei problemi più complessi e importanti della matematica, della fisica, della chimica e dell'informatica, tra cui l'ottimizzazione di grandi sistemi e molto altro. Attualmente, ci sono varie tecnologie in fase di sviluppo per la creazione di computer quantistici, tra cui le tecnologie a base di circuiti di superconduttori, ioni intrappolati, fotoni e topologia del plasma. Tuttavia, la creazione di un computer quantistico funzionante è ancora una sfida tecnologica e scientifica di estrema difficoltà.

3.1 COSA SONO I QUBITS

Un qubit utilizza i fenomeni quantomeccanici di sovrapposizione per ottenere una combinazione lineare di due stati. Un bit binario classico può rappresentare solo un singolo valore binario, come 0 o 1, il che significa che può trovarsi solo in uno dei due stati possibili. Un qubit, tuttavia, può rappresentare uno 0, un 1 o qualsiasi proporzione di 0 e 1 in sovrapposizione di entrambi gli stati, con una certa probabilità di essere uno 0 e una certa probabilità di essere un 1. La sovrapposizione consente agli algoritmi quantistici di utilizzare altri fenomeni quantomeccanici, come l'interferenza e l'entanglement. Insieme, la sovrapposizione, l'interferenza e l'entanglement creano una potenza di calcolo in grado di risolvere i problemi in modo esponenzialmente più rapido rispetto ai computer classici. Una conseguenza della sovrapposizione è l'interferenza. Gli stati dei qubit possono interferire tra loro perché ogni stato è descritto da un'ampiezza di probabilità che in base all'aumento o alla diminuzione dell'ampiezza da luogo ad una interferenza costruttiva o distruttiva.

Questi due tipi di interferenza sono utilizzati negli algoritmi di calcolo quantistico, che li rendono fondamentalmente diversi dagli algoritmi classici. L'interferenza viene utilizzata insieme all'entanglement per consentire l'accelerazione quantistica promessa dal calcolo quantistico. I qubit entangled sono sempre correlati tra loro per formare un unico sistema. Anche quando sono infinitamente distanti, misurare lo stato di uno dei qubit ci permette di conoscere lo stato dell'altro,

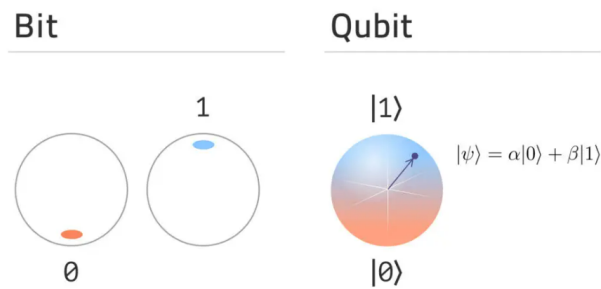


Figure 3.1: La differenza tra Bit e Qubit.

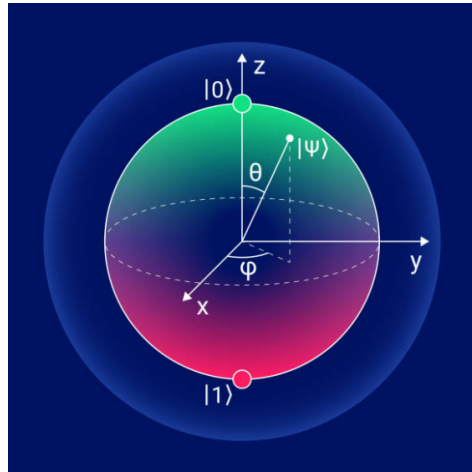


Figure 3.2: La sfera di Bloch.

senza bisogno di misurarlo direttamente. L'entanglement è necessario per qualsiasi calcolo quantistico e non può essere eseguito in modo efficiente su un computer classico. Le applicazioni includono la fattorizzazione di grandi numeri e la risoluzione di problemi di ricerca.

3.2 LA SFERA DI BLOCH

Lo stato di un qubit viene rappresentato graficamente tramite la sfera di Bloch (figura 3.2) che prende il nome dal fisico svizzero che la introdusse per la prima volta nel 1946. La sfera di Bloch rappresenta tutti gli stati quantistici di un qubit come punti sulla superficie di una sfera unitaria. In particolare, lo stato di un qubit può essere descritto in termini di un vettore tridimensionale, dove l'asse z rappresenta la probabilità di trovare il qubit nello stato 0 o 1, mentre gli assi x e y rappresentano le componenti di fase dello stato quantistico. La sfera di Bloch consente di rappresentare visivamente lo stato di un qubit e di comprendere come le operazioni sui qubit, tramite l'utilizzo dei gate quantistici, possono modificare lo stato del sistema. I termini ψ e ϕ si riferiscono alle coordinate sferiche del vettore del qubit. In particolare,

ϕ rappresenta il valore dell'angolo che il vettore forma rispetto all'asse z della sfera di Bloch, mentre ψ rappresenta l'angolo che il vettore forma rispetto al piano xy della sfera di Bloch. Tale rappresentazione, oltre ad essere uno strumento per la comprensione della meccanica quantistica, è di estrema importanza nella progettazione di circuiti quantistici e per la comprensione della meccanica quantistica dei qubit.

3.3 GATES QUANTISTICI

In questa sezione trattiamo i gates quantistici che sono elementi fondamentali della computazione quantistica e rappresentano le operazioni (rotazione attorno ad uno specifico asse, creazione di sovrapposizione e di entanglement) che possono essere eseguite su un singolo qubit o su più qubit per manipolare lo stato quantistico del sistema. Essi sono gli equivalenti quantistici delle porte logiche nei circuiti digitali classici. A differenza dei circuiti digitali classici, dove le porte logiche manipolano i bit in modo deterministico, i gates quantistici manipolano i qubit in modo non deterministico, sfruttando la sovrapposizione quantistica e l'entanglement quantistico. I gates quantistici eseguono specifiche operazioni sui qubit, e possono essere combinati in sequenze per eseguire calcoli più complessi. Inoltre, essi sono molto sensibili alle interferenze esterne e alle imperfezioni del sistema, il che rende la costruzione di circuiti quantistici una sfida tecnologica. In generale, le porte a qubit multiplo sono più potenti delle porte a qubit singolo (i qubit singoli individualmente non offrono alcun vantaggio computazionale) poiché consentono di eseguire operazioni più complesse e di creare stati di entanglement tra qubit e la scelta dei gates quantistici e la loro disposizione nel circuito sono fondamentali per ottenere un algoritmo quantistico efficiente e corretto. Di seguito si tratteranno i gates di maggiore rilevanza e applicazione [Qiskit].

- I GATES DI PAULI

L'X-gate, noto anche come gate di Pauli-X, è un gate quantistico a qubit singolo che prende il nome da Wolfgang Pauli, un fisico che ha dato un contributo significativo allo sviluppo della meccanica quantistica. L'X-gate è rappresentato dalla matrice di Pauli-X:

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

Per vedere l'effetto che un gate ha su un qubit, moltiplichiamo semplicemente il vettore di stato del qubit per il gate.

Possiamo vedere che l'X-gate commuta le ampiezze degli stati

$|0\rangle$ e $|1\rangle$:

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

Analogamente all'X-gate, anche le matrici Y e Z di Pauli agiscono come Y e Z gate nei nostri circuiti quantistici eseguendo le rotazioni rispettivamente ai loro assi.

- I GATES R_x , R_y e R_z

I gates R_x , R_y e R_z sono tre tipi di gates quantistici a singolo qubit che possono essere utilizzati all'interno di un circuito quantistico. Questi gate eseguono una rotazione rispettivamente intorno agli assi x , y e z del qubit. Il gate R_x esegue una rotazione intorno all'asse x del qubit di un angolo specifico θ , dove θ è un parametro del gate. Il gate R_x è rappresentato dalla seguente matrice:

$$R_X(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -i \sin(\frac{\theta}{2}) \\ -i \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix}$$

Il gate R_y esegue una rotazione intorno all'asse y del qubit di un angolo θ specifico.

Il gate R_y è rappresentato dalla seguente matrice unitaria:

$$R_Y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) & -\sin(\frac{\theta}{2}) \\ \sin(\frac{\theta}{2}) & \cos(\frac{\theta}{2}) \end{bmatrix}$$

Il gate R_z esegue una rotazione intorno all'asse z del qubit di un angolo specifico θ . Il gate R_z è rappresentato dalla seguente matrice unitaria:

$$R_Z(\theta) = \begin{bmatrix} e^{(-i\frac{\theta}{2})} & 0 \\ 0 & e^{(i\frac{\theta}{2})} \end{bmatrix}$$

Questi gate sono fondamentali per la realizzazione di algoritmi quantistici e per la costruzione di circuiti quantistici complessi.

- IL GATE DI HADAMARD

La porta Hadamard è una porta quantistica a qubit singolo che prende il nome da Jacques Hadamard, matematico francese che ha dato un contributo significativo allo sviluppo della teoria della probabilità e dell'analisi matematica. La porta di Hadamard esegue un'operazione di sovrapposizione trasformando il qubit

dagli stati di base $|0\rangle$ e $|1\rangle$ in uno stato che ha la stessa probabilità di essere misurato come uno di essi permettendo di allontanarsi dalla sfera di Bloch creando sovrapposizione.

La matrice è la seguente: $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$.

- IL GATE P DI FASE

Il P-gate (phase-gate) è una porta parametrizzata ed esegue una rotazione di ϕ attorno alla direzione dell'asse Z.

Ha la seguente forma matriciale:

$$P_\phi = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix}$$

dove ϕ è un numero reale.

- IL C-NOT GATE

Questo gate è una porta condizionale che esegue un X-gate sul secondo qubit (target), se lo stato del primo qubit (controllo) è $|1\rangle$. Agendo sul vettore di stato si ha una determinata matrice a seconda di quale qubit è il controllo e quale il target.

$$\text{C-NOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

- IL GATE DI TOFFOLI

Il Toffoli gate, noto come CCNOT gate (Controlled-Controlled NOT gate), agisce su tre qubit, chiamati qubit di controllo 1, qubit di controllo 2 e qubit target. I primi due qubit devono essere nello stato $|1\rangle$ o $|0\rangle$, mentre il qubit target può essere in qualsiasi stato quantistico.

Ad esempio, se entrambi i qubit di controllo sono nello stato $|1\rangle$, l'operazione Toffoli applica l'operazione NOT al qubit target. Se almeno uno dei qubit di controllo è nello stato $|0\rangle$, il target non viene modificato.

Il Toffoli gate è importante perché può essere utilizzato per implementare tutte le porte logiche classiche. In particolare, combinando il Toffoli gate con la porta NOT, è possibile implementare tutte le porte logiche booleane. La rappresentazione matriciale del gate di Toffoli è la seguente:

$$\text{Toffoli} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- GLI ALTRI GATES

Ovviamente ho trattato solo alcuni dei tantissimi gates che si possono utilizzare nel nostro circuito quantistico, tra i quali sono importanti (seppur li elencherò solamente) i seguenti:

- Gate identità (I-GATE);
- T-GATE;
- Gate di swap (SWAP-GATE);
- Gate controllo di rotazione (CROT-GATE);
- Gate di controllo di rotazione generale (U-GATE).

SIMULAZIONE VARIAZIONALE QUANTISTICA PER I MODI TM

4.1 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER (VQE)

Il Variational Quantum Eigensolver (VQE) è un algoritmo ibrido che utilizza un circuito quantistico parametrizzato e un algoritmo di ottimizzazione classico per approssimare l'energia di stato fondamentale di un sistema quantistico [Harrow2009] [Ewe2022]. Il VQE rappresenta un tipo specifico di Variational Quantum Algorithm (VQA), che utilizza un approccio variazionale per trovare la soluzione ottimale di un problema di ottimizzazione. Il VQA anzitutto definisce una funzione di prova (*Ansatz*) che viene eseguita su un computer quantistico per produrre una soluzione candidata. Successivamente, viene utilizzata una tecnica di ottimizzazione per migliorare gradualmente la soluzione fino a raggiungere l'ottimo globale o una soluzione sufficientemente vicina all'ottimo. Il VQE essendo un tipo specifico di VQA utilizza sempre un Ansatz quantistico ma descrive lo stato quantistico in termini di energia minima. Per ottenere la soluzione viene utilizzato sempre un approccio di tipo variazionale partendo da uno stato quantistico iniziale, ad esempio uno stato di superposizione di tutte le possibili configurazioni di spin degli elettroni nel sistema molecolare. Il circuito viene parametrizzato da un insieme di parametri variabili, che possono essere regolati per ottenere un'approssimazione migliore dell'energia di stato fondamentale dell'Hamiltoniana. A questo punto lo stato viene passato attraverso il circuito parametrizzato, che può essere descritto come una serie di porte quantistiche che manipolano lo stato. L'algoritmo di ottimizzazione classico invece viene utilizzato per trovare i valori di questi parametri che minimizzano l'energia del sistema. Il processo è iterativo, e può richiedere molte ripetizioni prima di raggiungere una soluzione soddisfacente. Il VQE rappresenta un esempio di come la computazione quantistica possa essere utilizzata per risolvere problemi di interesse pratico in ambito scientifico e tecnologico, in particolare per la chimica quantistica, la fisica della materia condensata e la teoria dei giochi quantistici. A tal proposito il VQE è uno degli algoritmi di quantum computing più studiati e sviluppati, con numerose varianti e miglioramenti proposti dalla comunità scientifica. Ad esempio, sono stati proposti algoritmi con ansatz più efficienti, che richiedono un minor numero di qubit e di gate quantistici. Tuttavia, una delle sfide maggiori nel VQE è trovare un circuito quantistico che possa approssimare l'energia di stato fondamentale del sistema con un'alta precisione poiché esso può essere sensibile ai

rumori e agli errori quantistici, che possono influenzare la precisione dei risultati. Ciò richiede la scelta di un circuito quantistico adeguato e l'ottimizzazione dei suoi parametri. Inoltre, la natura stocastica del comportamento quantistico richiede una grande quantità di dati per ottenere risultati affidabili, il che può rendere l'acquisizione dei dati un'operazione molto costosa dal punto di vista computazionale. Il *VQE* è stato proposto per la prima volta nel 2014 da un gruppo di ricercatori di *IBM* e successivamente è stato oggetto di numerosi studi e miglioramenti da parte della comunità scientifica. Nonostante le sfide che il *VQE* presenta, questo algoritmo di quantum computing ha dimostrato di essere promettente nella risoluzione di problemi di dimensioni moderate, in cui la simulazione classica diventa troppo onerosa a livello computazionale. In particolare, il *VQE* ha un interesse pratico in ambiti come la progettazione di nuovi farmaci e la scoperta di nuovi materiali, che potrebbero avere un impatto significativo sulla nostra vita.

4.2 FORMULAZIONE DELL'HAMILTONIANA

Riprendiamo la trattazione dall'equazione di Helmholtz per le onde TM (1.2).

Tale equazione, per essere risolta, va discretizzata e trasformata in una matrice Hamiltoniana. Prima di illustrare la procedura che permette di ottenere tale matrice, occorre precisare che il nostro interesse è volto a mostrare come, l'approccio quantistico, per implementare un *VQE* che porta a risolvere il problema delle guide d'onda, possa utilizzare $\log_2 N$ bit a fronte di $O(n)$ bit richiesti in un computer classico. Per ottenere l'Hamiltoniana per le onde TM si opera nel seguente modo di seguito illustrato.

Anzitutto, la griglia mesh viene spostata di $X/2$ rispetto ai confini metallici portandola a non coincidere con essi, come è riportato nella figura sottostante (figura 4.1):

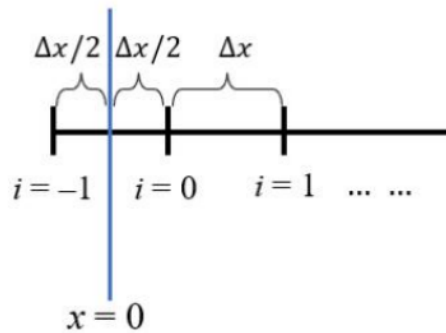


Figure 4.1: La mesh grid rappresenta il bordo della griglia a differenze finite unidimensionale basata su una griglia uniforme spostata.

Nei punti della mesh che non si trovano sul confine, la derivata di

secondo ordine può essere approssimata utilizzando il metodo delle differenze finite centrali:

$$\frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (4.1)$$

Per le modalità TM, la condizione al contorno di Neumann è:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i=0} \approx \frac{f_0 - f_{-1}}{\Delta x} = 0 \quad (4.2)$$

dando come risultato:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=0} \approx \left. \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2} \right|_{i=0} = \frac{f_1 - f_0}{\Delta x^2}. \quad (4.3)$$

Le condizioni al contorno all'altra estremità possono essere ottenute tramite lo stesso procedimento ottenendo la seguente matrice hamiltoniana 8×8 $M(x, D)$, per il problema a 3 qubit:

$$M(x, D) = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

Per semplicità di calcolo e di trattazione si è assunto che la dimensione della griglia sia unitaria.

4.3 LA DECOMPOSIZIONE DELL'HAMILTONIANA

A seguito della definizione della matrice Hamiltoniana essa deve essere trasformata in un operatore. La decomposizione dell'Hamiltoniana in termini di prodotti di Pauli permette di semplificare i calcoli quando si esegue la simulazione del sistema quantistico. Quest'ultima consente di esprimere la matrice come una combinazione lineare di prodotti tensoriali di operatori di Pauli consentendo di rappresentare il sistema quantistico e di stimare il valore dell'energia associata al sistema. Considerando una matrice quadrata di dimensione $n \times n$, la decomposizione di Pauli consiste nel cercare i coefficienti che moltiplicano ciascun prodotto tensoriale di operatori di Pauli, in modo

tale che la somma di quest'ultimi restituisca la matrice originale. Nell'applicazione pratica, tale decomposizione permette di rappresentare una matrice in modo compatto ed efficiente, utilizzando solo operatori di Pauli, che sono operatori semplici e ben noti che possono essere facilmente implementati su un simulatore quantistico per studiare le proprietà di questo sistema tramite i suoi autovalori e autovettori.

Questa operazione di semplificazione, inoltre, è utile per identificare le porte logiche quantistiche necessarie per implementare l'Ansatz utilizzato durante la simulazione poiché, consente di identificare i termini di interazione tra i qubit, che a loro volta possono essere utilizzati per progettare le porte logiche adatte per l'Ansatz. Infine, tramite questa procedura, è possibile identificare eventuali simmetrie del sistema, le quali possono essere utilizzate per semplificare ulteriormente la rappresentazione e ridurre il numero di parametri necessari per l'Ansatz, migliorando la convergenza e l'efficienza dell'algoritmo.

4.4 LA TRASFORMAZIONE IN BASE PAULI Z

Nei simulatori quantistici si utilizza la base Pauli-Z poiché essi eseguono i calcoli esclusivamente in questa direzione. Al fine di costruire circuiti quantistici che realizzano operazioni di fase, è quindi necessario effettuare cambiamenti di base per poter lavorare con la base Z. Utilizzando tre qubits, le basi vengono orientate in Z-Z-Z. Successivamente, per eseguire le misure del sistema quantistico, si aggiunge una sequenza di porte di misura a tutti i qubits del circuito. Inoltre, si crea una lista per memorizzare tutti i circuiti ottenuti e aggiungendo le porte di misura alle osservabili convertite nella base comune. Viene utilizzato un ciclo *for* che, al variare di "*i*", scorre tutti gli elementi della lista contenente le osservabili del sistema quantistico. Ciò significa che, ad ogni iterazione del ciclo, viene creata una nuova sequenza di porte quantistiche corrispondente all'osservabile corrente e viene aggiunta una sequenza di porte di misura a tutti i qubits del circuito quantistico. In questo modo, al termine del ciclo *for*, si otterranno le misure di tutte le osservabili del sistema quantistico. Si ottiene pertanto un output come quello mostrato nella figura 4.2.

4.5 LA FUNZIONE DI COSTO

Il VQE è un algoritmo quantistico utilizzato per trovare l'energia degli stati quantistici di un sistema chimico o fisico. L'energia viene calcolata minimizzando una funzione di costo associata all'Hamiltoniana del sistema. La funzione di costo relativa al VQE è definita come la differenza tra l'energia del sistema calcolata utilizzando lo stato quantistico ottenuto dall'Ansatz (ovvero la funzione d'onda approssimata) e l'energia del sistema calcolata utilizzando lo stato quantistico

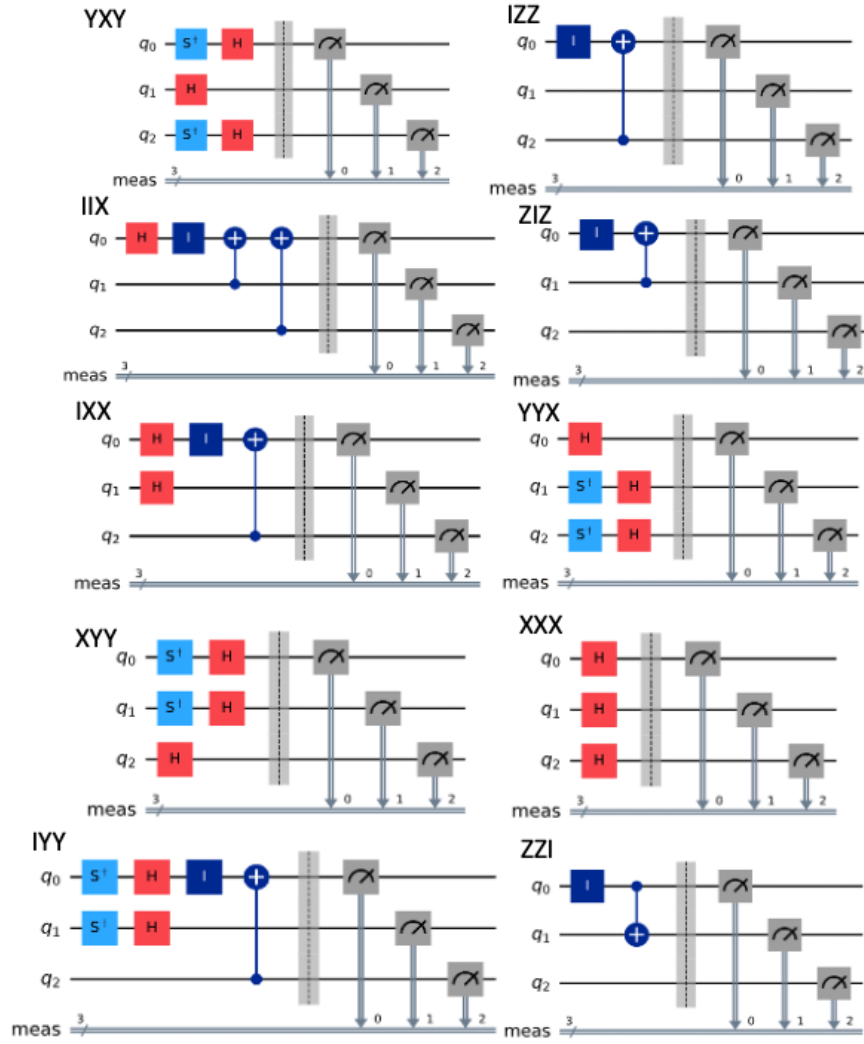


Figure 4.2: Sequenza di circuiti formati dai gate quantistici al variare di “i”.

esatto (ovvero la funzione d’onda reale). Lo scopo del VQE, come già accennato precedentemente, è trovare i parametri dell’Ansatz di prova che minimizzano la funzione di costo quindi l’energia del sistema quantistico considerato. Per calcolare l’energia del ground state e della k -esima energia E_k dello stato di interesse si ricorre dunque alla seguente formulazione:

$$F_k(\theta) = \langle \psi(\theta) | M | \psi(\theta) \rangle + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i |\langle \psi(\theta) | \psi(\theta^i) \rangle|^2 \quad (4.4)$$

dove:

- $|\psi(\theta)\rangle \in A$ è definito come “Ansatz” scelto da una famiglia di “Ansatzes” parametrizzati da θ .

L’Ansatz è un’ipotesi iniziale che semplifica la soluzione di un problema complesso, consentendo di trovare una soluzione

approssimata o esatta in modo più efficiente. In ogni iterazione, l'Ansatz viene modificato in modo da avvicinarsi sempre di più allo stato quantistico di interesse, fino a quando l'energia del sistema non converge a un valore stabile.

- $\forall i \in (0, \dots, k-1)$ β_i è scelto per essere una qualsiasi costante che soddisfi $\beta_i > E_k - E_i$
- $\theta(i)$ è definito come l'angolo che minimizza la "cost function"
 $E_i(\theta_i) \approx \min_{\theta} (E_i(\theta))$.

La modalità di propagazione più bassa della guida d'onda a microonde è rappresentata dal primo addendo mentre il secondo addendo è utilizzato per calcolare gli autovalori di ordine superiore. Le minimizzazioni della funzione di costo vengono eseguite iterativamente, partendo da $k = 0$ e aumentando k di uno in ogni iterazione fino a ottenere tutti gli autovalori desiderati di ordine superiore.

Nel dettaglio, consideriamo un sistema quantistico descritto da una Hamiltoniana H e il ground state associato a H come $|\psi\rangle$. L'energia del ground state può essere calcolata come: $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$.

Possiamo esprimere l'Hamiltoniana H come una combinazione lineare di operatori di Pauli:

$H = \sum c_i p_i$ dove c_i sono i coefficienti associati a ciascun operatore di Pauli p_i .

Ogni operatore di Pauli può essere espresso come il prodotto tensoriale di Pauli lungo le direzioni x , y e z .

Quindi, l'energia del ground state approssimato può essere calcolata come:

$$\begin{aligned}
 H = & 2.25 III - 1.0 IIX - 0.5 IXX - 0.5 IYY + 0.25 IZZ - 0.25 XXX \\
 & + 0.25 XYY - 0.25 YXY - 0.25 YYX + 0.25 ZIZ + 0.25 ZZI.
 \end{aligned}
 \tag{4.5}$$

IMPLEMENTAZIONE DEL VQE SU UN SIMULATORE QUANTISTICO

5.1 AMBIENTE DI SVILUPPO

L'algoritmo è stato implementato utilizzando *Jupyter*, un ambiente di programmazione interattivo open-source che consente di creare documenti contenenti codice, testo descrittivo, equazioni e grafici. *Jupyter* prende il nome dai tre principali linguaggi di programmazione supportati, ovvero Julia, Python e R ed è utilizzato in molteplici campi, tra cui la meccanica quantistica. Grazie alla sua natura interattiva, il suddetto è utile per esplorare dati, testare algoritmi e sviluppare prototipi di codice. Inoltre, il suo utilizzo permette di creare notebook, i quali sono particolarmente adatti per registrare e condividere l'analisi dei dati, l'apprendimento automatico, la simulazione e molti altri tipi di lavoro. I notebook possono altresì essere eseguiti su server cloud, rendendo pertanto non necessario installare alcun software sul proprio computer.

Per l'implementazione dell'algoritmo è stato utilizzato il linguaggio *Python*, un linguaggio di alto livello, versatile e ampiamente utilizzato in meccanica quantistica. Lo stesso, infatti, viene utilizzato in vari software di simulazione e di calcolo quantistico, come ad esempio IBM, Google Quantum Computing Playground e Microsoft Quantum Development Kit. Avendo una sintassi pulita e leggibile, che lo rende facile da apprendere e utilizzare, lo stesso è disponibile in una vasta gamma di sistemi operativi e piattaforme.

Per le simulazioni quantistiche effettuate, è stato utilizzato un "HP Pavilion Laptop 15-egoxxx" con le seguenti specifiche:

- Processore 11th Gen Intel(R) Core(TM) i7-1165G7 2.80 GHz;
- 16,0 GB di RAM installata;
- Sistema operativo a 64 bit con processore basato su x64.

5.2 IMPLEMENTAZIONE DEL VQE

Per effettuare l'implementazione anzitutto sono state importate le seguenti librerie: *Qiskit*, *Numpy*, *Matplotlib* e *Scipy*.

Quest'ultime sono librerie di *Python* fondamentali per la computazione scientifica e la simulazione quantistica. Si procederà ora ad una breve descrizione delle singole caratteristiche delle librerie.

Qiskit è una libreria per la programmazione, la simulazione e l'esecuzione di calcoli su computer quantistici. Essa permette di creare, manipolare

e misurare circuiti quantistici, consentendo di effettuare simulazioni e di eseguire calcoli su hardware quantistico effettivo.

Numpy è una libreria che offre un'ampia gamma di funzioni matematiche per l'elaborazione dei dati. Essa fornisce un potente oggetto di array multidimensionale e funzioni per eseguire operazioni matematiche complesse.

Matplotlib è una libreria di visualizzazione dati che permette di creare grafici, istogrammi e altri tipi di plot in *Python*. Essa offre un'ampia gamma di funzionalità di personalizzazione per creare visualizzazioni di dati ad alta qualità.

Scipy è una libreria che fornisce molteplici algoritmi e strumenti per la computazione scientifica. Tra le sue funzionalità, esso offre svariati strumenti per l'ottimizzazione, l'interpolazione, l'integrazione e molte altre operazioni matematiche avanzate. In particolare, l'area di ottimizzazione di quest'ultimo include numerosi algoritmi di ottimizzazione, sia per la minimizzazione che per la massimizzazione di funzioni. Insieme queste librerie formano un potente set di strumenti per il calcolo scientifico, la simulazione e la visualizzazione dei dati in *Python* permettendo di lavorare su simulatori quantistici.

Dopo aver importato tutte le librerie necessarie per le simulazioni è stato introdotto un particolare Ansatz detto "*EfficientSu2*". L'Ansatz *EfficientSu2* (HEA) è un tipo di circuito quantistico utilizzato comunemente per costruire circuiti variazionali efficienti. Questo Ansatz utilizza rotazioni su y tramite gate R_y per creare un circuito con entanglement lineare, in cui ogni qubit è connesso solo al qubit successivo come mostrato nella figura 5.1:

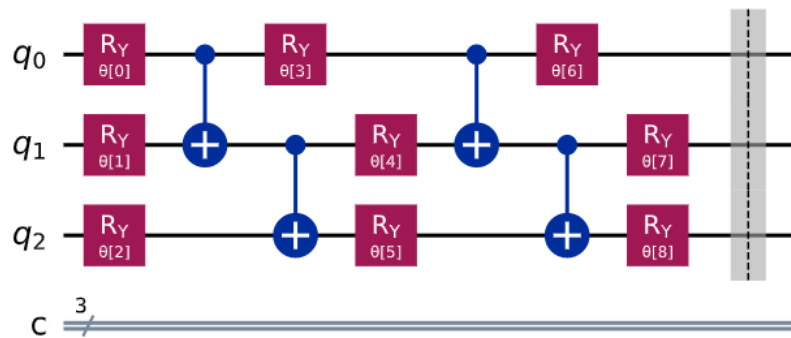


Figure 5.1: La struttura dell'Ansatz EfficientSu2.

La struttura sopra riportata semplifica il circuito e lo rende più facile da ottimizzare. L'*EfficientSu2* ha due parametri principali: il numero di ripetizioni ($n-1$) e il numero di qubit, in questo caso 3. In generale, è spesso utilizzato per la simulazione in Qiskit, poiché ha dimensione ridotta e può essere facilmente adattato per risolvere una vasta gamma di problemi di ottimizzazione. Tuttavia, la scelta dell'Ansatz dipende dal problema specifico che si sta cercando di risolvere e può richiedere un'ulteriore ottimizzazione per raggiungere la soluzione

migliore. L'utilizzo di questo particolare Ansatz è un esempio di come la scelta di esso possa influire sulla qualità dei risultati ottenuti dalla *VQE*. La decisione relativamente a quale Ansatz scegliere dipende dal problema specifico e dalla sua complessità rappresentando una parte critica del processo di progettazione dell'algoritmo *VQE*, in quanto, un Ansatz non adeguato può richiedere un numero elevato di parametri e tempi di esecuzione più lunghi, compromettendo l'efficienza dell'algoritmo. È necessario, ai fini dell'esecuzione dell'algoritmo, introdurre un ambiente di simulazione quantistica utilizzando il simulatore *qasm simulator* fornito da *aer backend simulator* e specificare il numero di volte che il circuito quantistico deve essere eseguito tramite il comando `shots`. La simulazione ha inizio tramite la definizione di un punto iniziale che parte da uno stato random casuale. Scelto uno stato iniziale si introduce la funzione di costo che implementa l'algoritmo *VQE*. La funzione prende in input tre argomenti: '

- *k* che è il numero di autovalori e autovettori che si vogliono trovare;
- *initial point* o *punto iniziale* utilizzato per l'ottimizzazione della funzione costo;
- *method* che indica il metodo di ottimizzazione da utilizzare per minimizzare la funzione costo.

All'interno della funzione, vengono definiti alcuni parametri e array necessari per memorizzare i risultati intermedi dell'algoritmo. La variabile `shots` rappresenta il numero di misure statistiche da eseguire sul simulatore quantistico (in questo caso 2^{13}). Gli array `eigenvalues`, `eigenkets` e `parameters` vengono inizializzati per contenere rispettivamente gli autovalori approssimati, gli autovettori corrispondenti e i punti di ottimizzazione trovati durante l'esecuzione dell'algoritmo. All'interno della funzione precedente viene definita un'altra funzione per calcolare la funzione di costo che prende come argomenti i parametri inizializzati precedentemente. Questa funzione calcola l'energia totale associata a quel parametro utilizzando un insieme di circuiti quantistici e misure statistiche e per ogni circuito di misura, vengono eseguiti calcoli quantistici tramite il simulatore. I risultati delle misure vengono conteggiati e poi normalizzati per ottenere le probabilità di osservare determinati output. Successivamente, si calcolano i valori degli Expectation Value corrispondenti a ciascun circuito di misura. Le probabilità associate ai risultati di una misurazione nel circuito quantistico vengono calcolate eseguendo il circuito e misurando i risultati. Di conseguenza, sono determinate le probabilità di ottenere diversi stati quantistici. Ogni termine nella somma del calcolo del valore atteso rappresenta la differenza tra le probabilità di due stati quantistici distinti. Ad esempio, `"probs[000]` -

$\text{probs}[001]$ " indica la differenza tra la probabilità di ottenere lo stato quantistico "000" e la probabilità di ottenere lo stato quantistico "001". Il segno positivo o negativo dei termini dipende dalla specifica combinazione che si sta calcolando. In questo caso, il termine $\text{probs}[000]$ ha un segno positivo perché lo 0 è associato al valore +1, mentre il termine $\text{probs}[001]$ ha un segno negativo perché lo 1 è associato al valore -1. L'energia totale viene calcolata utilizzando i coefficienti dell'operatore H e i valori di aspettativa ottenuti. Viene anche calcolato un termine di correlazione che tiene conto delle relazioni tra i coefficienti di base dell'operatore H e il vettore associato agli autovettori. L'energia totale viene aggiunta alla lista per monitorare la convergenza dell'algoritmo e viene restituita come risultato della funzione. In seguito, viene eseguito un loop da 0 a $k+1$. All'interno del loop, viene chiamata una funzione di ottimizzazione per minimizzare la funzione di costo. A questo punto si utilizza il punto iniziale definito e il metodo di ottimizzazione specificato che in questo caso è l'algoritmo di *Powell*.

Il metodo di *Powell* è un algoritmo di ottimizzazione di discesa multidimensionale senza vincoli che si adatta perfettamente ai problemi di ottimizzazione non lineari in cui non è possibile utilizzare i gradienti o le derivate della funzione obiettivo. Nel contesto del *VQE*, esso è particolarmente utile per trovare il minimo di una funzione costituita da un'energia quantistica calcolata tramite un computer quantistico, dove le derivate possono essere estremamente complesse o addirittura impossibili da calcolare a causa della natura non lineare della funzione.

Tale algoritmo utilizza una sequenza di vettori di direzione per individuare una direzione di discesa più efficiente rispetto alla discesa lungo il gradiente. In ogni iterazione, viene eseguita una ricerca lineare per determinare la dimensione del passo lungo la direzione corrente. Dopo ogni iterazione, l'algoritmo aggiorna la base delle direzioni utilizzando i nuovi punti calcolati, in modo che la prossima direzione di discesa sia ortogonale alle direzioni precedenti. L'algoritmo di *Powell* termina quando viene raggiunto un criterio di convergenza predefinito, ad esempio quando il cambiamento tra due iterazioni consecutive è inferiore a una soglia specificata. Il risultato della minimizzazione viene memorizzato e l'energia minima ottenuta dalla minimizzazione viene assegnata all'array *eigenvalues*, gli autovettori corrispondenti vengono assegnati a *eigenkets*, e i punti di ottimizzazione vengono assegnati a *parameters*.

Infine, la funzione *VQE* restituisce gli array *eigenvalues*, *eigenkets* e *parameters*, che rappresentano le approssimazioni agli autovalori, gli autovettori corrispondenti e i punti di ottimizzazione ottenuti dall'algoritmo *VQE*.

In sintesi, la funzione *VQE* implementa l'algoritmo per trovare gli autovalori e gli autovettori di un determinato operatore Hamiltoni-

ano. La funzione di costo viene calcolata utilizzando un insieme di circuiti quantistici e misure statistiche, e viene minimizzata attraverso il metodo *Powell*. Il risultato dell'algoritmo *VQE* è rappresentato da tre array che contengono le approssimazioni agli autovalori, gli autovettori corrispondenti e i punti di ottimizzazione trovati durante l'esecuzione dell'algoritmo. La scelta dell'initial point e del metodo di ottimizzazione possono influire sulla qualità dei risultati ottenuti dall'algoritmo, e dipendono dal problema specifico che si sta cercando di risolvere.

L'ottimizzazione e i calcoli eseguiti dal *VQE* possono essere riassunti e illustrati in modo esemplificativo tramite lo schema riportato nella figura 5.2:

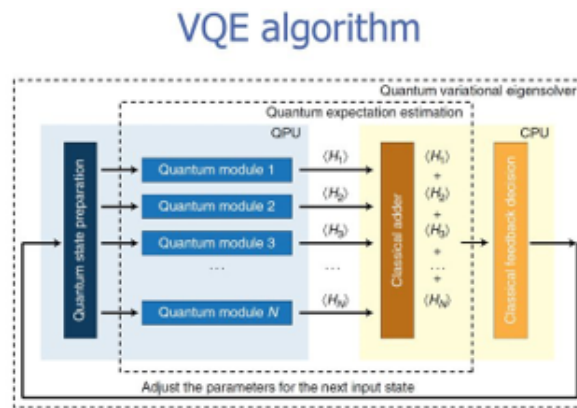


Figure 5.2: Lo schema della costruzione del VQE.

RISULTATI

Arrivati alla conclusione dell'esposizione non resta che mostrare i risultati ottenuti dall'implementazione, con l'obiettivo finale di illustrare graficamente i modi di propagazione TM_{11} e TM_{21} per le guide d'onda rettangolari tramite una rappresentazione scalare 2D.

I tempi per eseguire l'ottimizzazione per i due stati presi in esame sono stati relativamente lunghi, impiegando in media per il ground state e il primo stato eccitato, i seguenti tempi di esecuzione:

- Ground state: 15 minuti e 23 secondi;
- Primo stato eccitato: 21 minuti e 38 secondi.

Implementando opportunamente il VQE come sovraesposto si ottengono i seguenti eigenvalues:

- Eigenvalue ground state = 0.1554938;
- Eigenvalue primo stato eccitato = 0.581234.

Come strumento di analisi si plotta il grafico della convergenza (figura 6.1) per osservare come il VQE arriva a convergenza per i due stati presi in esame. L'asse delle ascisse rappresenta il numero di iterazioni mentre l'asse delle ordinate rappresenta il valore di convergenza dello stato quantistico.

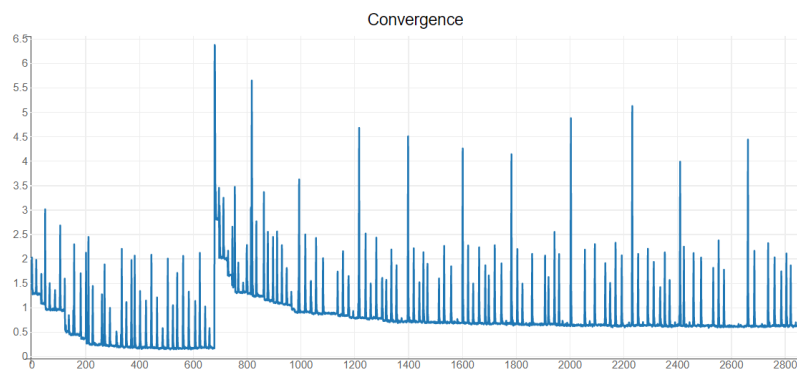


Figure 6.1: La convergenza del VQE per lo stato base e il primo stato eccitato rappresentata sul numero di iterazioni (asse x) e sul valore di convergenza (asse y).

Come si può notare dal grafico la convergenza per il ground state si ottiene con circa 700 iterazioni convergendo al valore di 0.1554 a fronte di un valore esatto di 0.1522 mentre quella per il primo stato eccitato si ottiene dopo circa 2800 iterazioni anche se il valore inizia a

stabilizzarsi già a circa 1000 iterazioni ad un valore di 0.5812 a fronte di un valore esatto di 0.5857.

Successivamente si costruisce il circuito ottimo e vengono plottate le rispettive eigenfunction (figure 6.2 e 6.3) che mostrano la parte reale della funzione corrispondente allo stato eccitato più basso del circuito quantistico definito dall'Ansatz.

La parte immaginaria viene ignorata poiché l'energia dipende solo dal quadrato dell'ampiezza, che è una quantità reale.

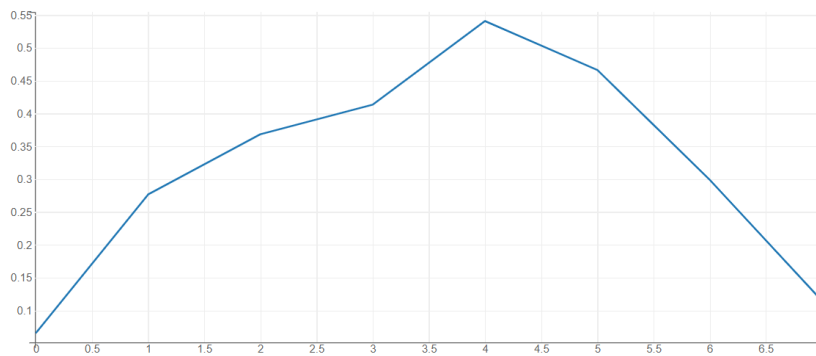


Figure 6.2: Rappresentazione della funzione d'onda per il ground state al variare della posizione spaziale lungo la direzione della guida d'onda.

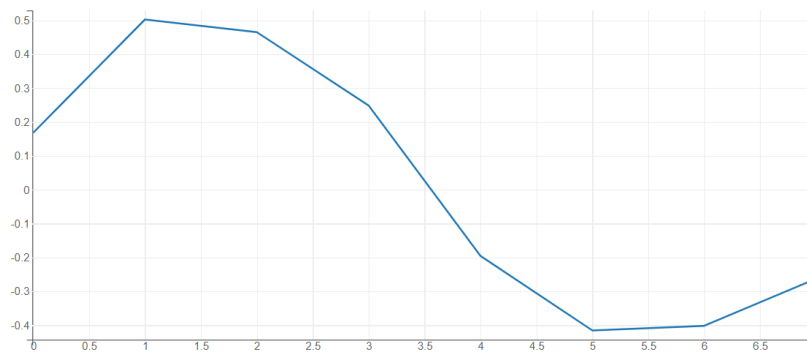


Figure 6.3: Rappresentazione della funzione d'onda per il primo stato eccitato al variare della posizione spaziale lungo la direzione della guida d'onda.

Come si evince dalle figure seguenti si ottengono andamenti sinusoidali suggerendo che l'implementazione è corretta: essi si avvicinano

ai rispettivi andamenti ideali (figure 6.4 e 6.5).

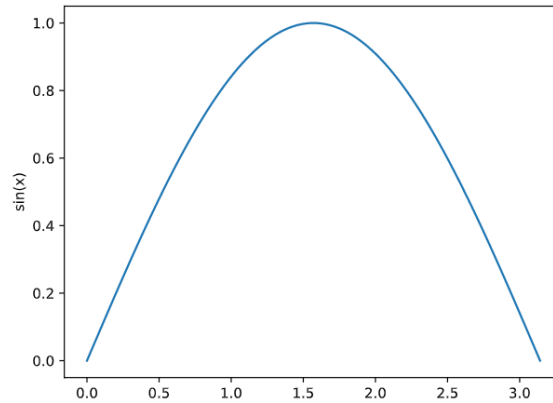


Figure 6.4: Andamento ideale ground state rappresentato dalla funzione $\sin(x)$.

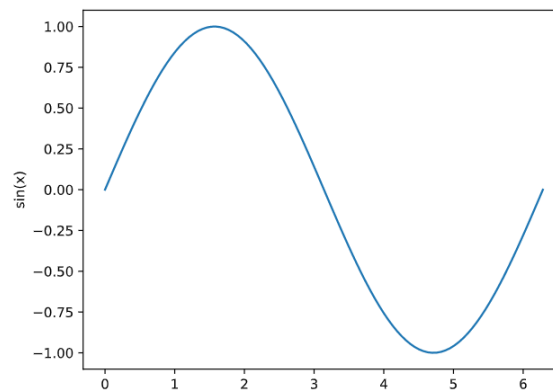


Figure 6.5: Andamento ideale primo stato eccitato rappresentato dalla funzione $\sin(x)$.

Una forma comune dell'eigenfunction in relazione ad un algoritmo variazionale, infatti, è quella di una funzione d'onda sinusoidale, in cui gli angoli di rotazione dei qubits sono parametri che vengono ottimizzati durante l'algoritmo. Questa forma è preferibile perché le funzioni d'onda sinusoidali sono continue, differenziabili e consentono di approssimare qualsiasi funzione continua su un intervallo finito. Inoltre, le funzioni d'onda sinusoidali possono rappresentare un'ampia gamma di stati quantistici fondamentali per la descrizione di sistemi quantistici complessi.

Dall'implementazioni, inoltre, si ottengono le seguenti distribuzioni di probabilità (figure 6.6 e 6.7):

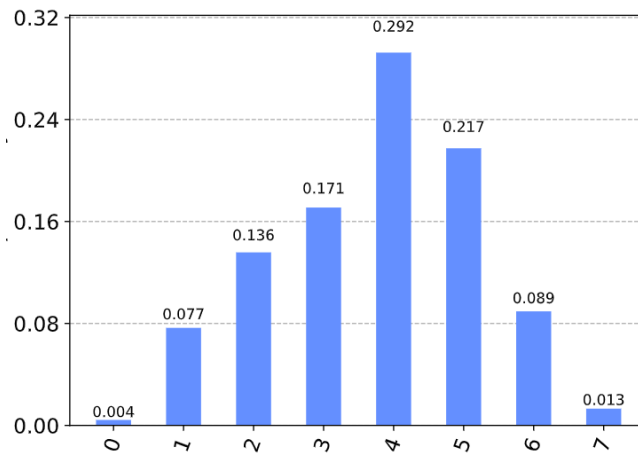


Figure 6.6: Bar Plot 1D stato base in cui l'asse orizzontale rappresenta il qubit e l'asse verticale la relativa probabilità.

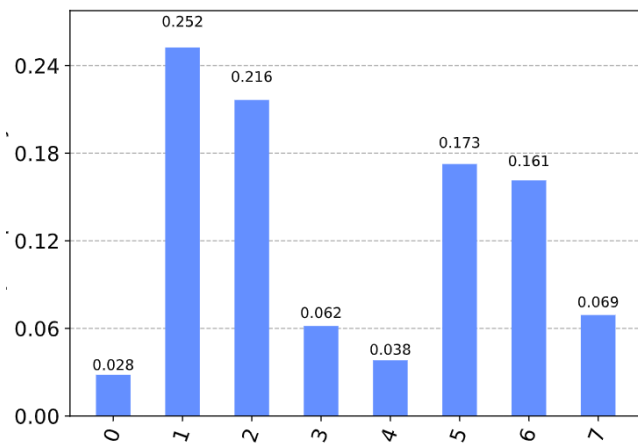


Figure 6.7: Bar Plot 1D primo stato eccitato in cui l'asse orizzontale rappresenta il qubit e l'asse verticale la relativa probabilità.

Gli istogrammi rappresentano la distribuzione di probabilità dei risultati possibili e l'Expectation Value dell'Hamiltoniana può essere calcolato come la media ponderata di tali risultati, dove la ponderazione è data dalla probabilità di ogni risultato. In particolare, si ottengono distribuzioni Gaussiane caratterizzate da una media e una deviazione standard. La Gaussiana descrive la distribuzione di probabilità di misure di grandezze fisiche in molti contesti, compreso il campo della fisica quantistica, poiché ha proprietà utili come la simmetria e la concentrazione della probabilità intorno alla media. Nel caso del

Variational Quantum Eigensolver, questa permette di descrivere la distribuzione di probabilità delle misure di un'osservabile su uno stato quantistico approssimato costruito con un Ansatz parametrico. Per una maggiore chiarezza espositiva si mostrano anche i bar-plot 2D (figure 6.8 e 6.9) ottenuti tramite il comando “plot state city” utilizzato per visualizzare la funzione d'onda in modo intuitivo fornendo una rappresentazione grafica della distribuzione di probabilità degli stati quantistici che compongono la funzione d'onda.

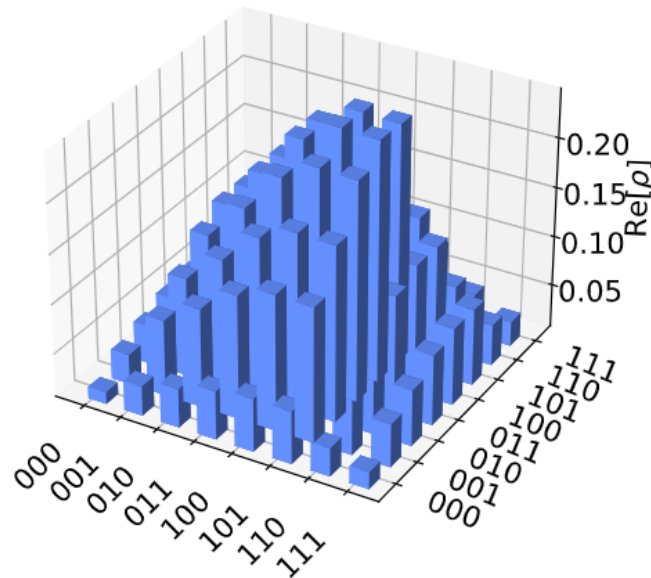


Figure 6.8: Bar Plot 2D stato base.

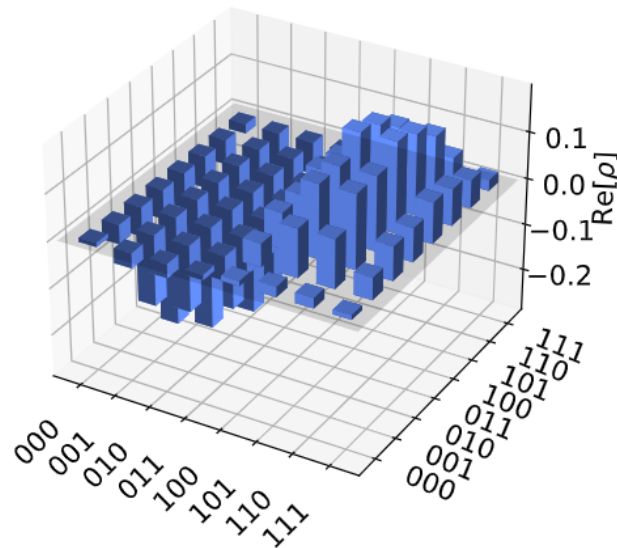


Figure 6.9: Bar Plot 2D primo stato eccitato.

La trattazione si conclude attraverso la rappresentazione scalare del primo modo TM_{11} associato allo stato di base e il secondo modo TM_{21} associato al primo stato eccitato, fornendo così la soluzione alla questione oggetto di questo studio.

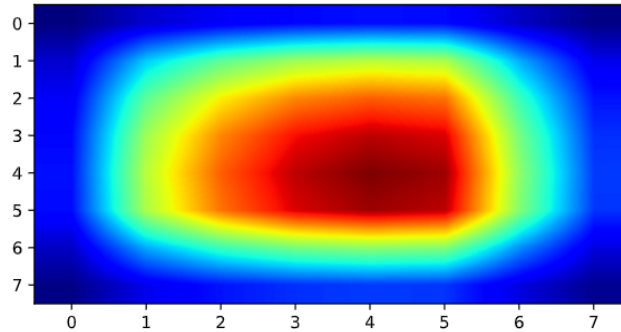


Figure 6.10: Rappresentazione scalare 2D del campo elettrico del modo TM_{11} ottenuto dall'implementazione.

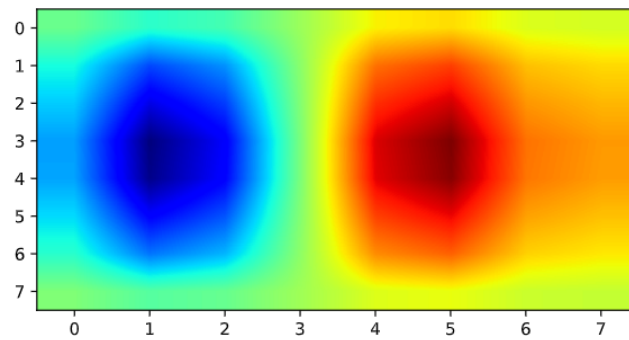


Figure 6.11: Rappresentazione scalare 2D del campo elettrico del modo TM_{11} ottenuto dall'implementazione.

Le due immagini (figura 6.10 e 6.11) corrispondono, seppur con qualche variazione dovuta ai disturbi, alle rappresentazioni mostrate nel paragrafo nella figura 1.2 suggerendo che la simulazione è stata effettuata correttamente.

CONSIDERAZIONI FINALI

La trattazione esposta fornisce una base solida, attraverso l'applicazione della meccanica quantistica e del quantum computing, per la risoluzione di problemi estremamente complessi tra cui la comprensione delle proprietà delle onde trasverso magnetiche all'interno di guide metalliche rettangolari dimostrando l'efficacia dell'algoritmo variazionale nell'analisi di tali sistemi.

Si è utilizzato infatti un algoritmo quantistico variazionale, il *Variational Quantum Eigensolver*, il quale sfrutta la potenza di calcolo delle macchine quantistiche per risolvere problemi che sarebbero altrimenti impossibili da affrontare con i tradizionali algoritmi classici. L'utilizzo di tale algoritmo nel problema delle guide d'onda prova concretamente come questa tecnica possa essere applicata anche ad ambiti di natura ingegneristica. Infatti, l'efficacia dell'approccio variazionale nel contesto gestionale dimostra come questa metodologia sia destinata a rivoluzionare molti settori dell'industria e della ricerca, consentendo di risolvere problemi che altrimenti sarebbero estremamente complessi in maniera estremamente efficiente anche sul piano energetico, rappresentando così una vera e propria sfida per il futuro tecnologico. Le implicazioni di questa ricerca sono quindi particolarmente significative nell'ambito dell'ingegneria gestionale e possono rivestire un ruolo fondamentale nel migliorare la progettazione e l'ottimizzazione dei dispositivi elettronici e delle reti di comunicazione come, ad esempio, la conoscenza delle proprietà delle onde, può aiutare a minimizzare le perdite di segnale e a massimizzare la potenza trasmessa attraverso le guide metalliche.

BIBLIOGRAPHY

- [1] Halliday, D., Resnick, R., & Walker, J. (2004). *Fisica 2*.
- [2] Miller, D. (2008). *Quantum mechanics for scientists and engineers*.
- [3] Busch, P., Lahti, P. J., & Mittelstaedt, P. (1995). *Operational Quantum Physics*.
- [4] Qiskit. (n.d.). *Qiskit Textbook*. Retrieved from <https://qiskit.org/learn/>
- [5] Ramo, S., Whinnery, J. R., & van Duzer, T. (2002). *Campi e onde nell'elettronica per le comunicazioni*.
- [6] Schwabl, F. (2010). *Quantum Mechanics*.
- [7] Ewe, W., Kwapiński, D., & Słowiński, K. (2022). *Variational Quantum-Based Simulation of Waveguide Modes*.
- [8] National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. (2019). *Quantum Computing: Progress and Prospects*. Washington, DC, USA: National Academies Press. Available: <https://www.nap.edu/catalog/25196/quantum-computing-progress-and-prospects>
- [9] Harrow, A. W., Hassidim, A., & Lloyd, S. (2009). Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, 103(15), Oct.
- [10] Cao, Y., Daskin, A., Frankel, S., & Kais, S. (2012). Quantum circuit design for solving linear systems of equations. *Molecular Physics*, 110(15), 1675-1680, Aug.
- [11] Clader, B. D., Jacobs, B. C., & Sprouse, C. R. (2013). Preconditioned quantum linear system algorithm. *Physical Review Letters*, 110(25), Jun.
- [12] Steijl, R., & Barakos, G. N. (2018). Parallel evaluation of quantum algorithms for computational fluid dynamics. *Computers & Fluids*, 173, 22-28, Sep.
- [13] Steijl, R. (2020). Quantum algorithms for fluid simulations. In *Advances in Quantum Communication and Information* (pp. 1-18). Rijeka, Croatia: IntechOpen.
- [14] Zhang, J., Feng, F., & Zhang, Q. J. (2021). Quantum method for finite element simulation of electromagnetic problems. In *IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest* (pp. 120-123), Jun.

- [15] Morrell, H. J., & Wong, H. Y. (2021). Study of using quantum computer to solve Poisson equation in gate insulators. In *Proceedings of the International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)* (pp. 69-72), Sep.
- [16] Wang, S., Wang, Z., Li, W., Fan, L., Wei, Z., & Gu, Y. (2020). Quantum fast Poisson solver: The algorithm and complete and modular circuit design. *Quantum Information Processing*, 19(6), 1-25, Apr.
- [17] Liu, J.-P., Kolden, H. Ø., Krovi, H. K., Loureiro, N. F., Trivisa, K., & Childs, A. M. (2021). Efficient quantum algorithm for dissipative nonlinear differential equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 118(35), Aug.
- [18] Lloyd, S., et al. (2020). Quantum algorithm for nonlinear differential equations. *arXiv preprint arXiv:2011.06571*.
- [19] IBM Quantum. (2021). Available: <https://quantum-computing.ibm.com/>
- [20] Rigetti Computing. (2021). Available: <https://www.rigetti.com/>
- [21] Cerezo, M., et al. (2021). Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 3(9), 625-644.
- [22] Endo, S., Cai, Z., Benjamin, S. C., & Yuan, X. (2021). Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 90(3), Mar.
- [23] Bharti, K. (2021). Towards quantum advantage and certification with noisy intermediate-scale quantum devices. Available: <https://scholarbank.nus.edu.sg/handle/10635/195568>
- [24] Bharti, K., et al. (2022). Noisy intermediate-scale quantum algorithms. *Reviews of Modern Physics*, 94(1), Feb.
- [25] Peruzzo, A., et al. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, 5(1), 1-7.
- [26] McClean, J. R., Romero, J., Babbush, R., & Aspuru-Guzik, A. (2016). The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. *New Journal of Physics*, 18(2), Feb.
- [27] Farhi, E., Goldstone, J., & Gutmann, S. (2014). A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv:1411.4028*.
- [28] Bravo-Prieto, C., et al. (2019). Variational quantum linear solver. *arXiv preprint arXiv:1909.05820*.
- [29] Huang, H.-Y., Bharti, K., & Rebentrost, P. (2019). Near-term quantum algorithms for linear systems of equations. *arXiv preprint arXiv:1909.07344*.

- [30] Xu, X., et al. (2021). Variational algorithms for linear algebra. *Science Bulletin*, 66(21), 2181-2188, Nov.
- [31] Lubasch, M., et al. (2020). Variational quantum algorithms for nonlinear problems. *Physical Review A*, 101(1), Jan.
- [32] García-Molina, P., Rodríguez-Mediavilla, J., & García-Ripoll, J. J. (2022). Quantum Fourier analysis for multivariate functions and applications to a class of Schrödinger-type partial differential equations. *Physical Review A*, 105, Jan.
- [33] Liu, H.-L., et al. (2021). Variational quantum algorithm for the Poisson equation. *Physical Review A*, 104(2), Aug.
- [34] Sato, Y., et al. (2021). Variational quantum algorithm based on the minimum potential energy for solving the Poisson equation. *Physical Review A*, 104(5), Nov.
- [35] Joo, J., & Moon, H. (2021). Quantum variational PDE solver with machine learning. *arXiv preprint arXiv:2109.09216*.
- [36] Higgott, O., Wang, D., & Brierley, S. (2019). Variational quantum computation of excited states. *Quantum*, 3, 156, Jul.
- [37] Qiskit. (2019). Available: <https://qiskit.org/>
- [38] Chew, W. C. (2021). Lectures on theory of microwave and optical waveguides. *arXiv preprint arXiv:2107.09672*.
- [39] Sarkar, T. K., et al. (1989). Computation of the propagation characteristics of TE and TM modes in arbitrarily shaped hollow waveguides utilizing the conjugate gradient method. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 3(2), 143-165, Jan.
- [40] Fischer, P. (2016). Computational Mechanics. Available: http://fischerp.cs.illinois.edu/tam470/refs/poisson2d_notes.pdf
- [41] Dirac, P. A. M. (1939). A new notation for quantum mechanics. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 35, 416-418.
- [42] Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2010). Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge, U.K.: Cambridge University Press.
- [43] Zhang, Y., Lu, K., & Gao, Y. (2015). QSobel: A novel quantum image edge extraction algorithm. *Science China Information Sciences*, 58(1), 1-13, Jan.
- [44] Maslov, D. (2016). Advantages of using relative-phase Toffoli gates with an application to multiple control Toffoli optimization. *Physical Review A*, 93(2), Feb.

- [45] Broyden, C. G. (1970). The convergence of a class of double-rank minimization algorithms: 2. The new algorithm. *Journal of Applied Mathematics*, 6(3), 222-231.