



UNIVERSITÀ POLITECNICA DELLE MARCHE

FACOLTÀ DI INGEGNERIA

Corso di Laurea triennale in
INGEGNERIA GESTIONALE

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

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

Relatore:

Prof. Franco Moglie

Correlatore:

Prof. Valter Mariani Primiani

Tesi di Laurea di:

Giacomo Zappi

Anno accademico:

2022/2023

"Siate affamati. Siate folli."
-Steve Jobs

ABSTRACT

Gli algoritmi quantistici variazionali (VQA) rappresentano uno dei metodi più promettenti che possono essere implementati su macchine quantistiche di scala intermedia rumorose per ottenere un vantaggio quantistico rispetto ai computer classici. Questo articolo descrive l'uso di un VQA in combinazione con il metodo delle differenze finite per il calcolo delle modalità di propagazione di un'onda elettromagnetica (TE) in una guida d'onda metallica cava. Il problema della guida d'onda bidimensionale (2-D), descritto dall'equazione di Helmholtz, è approssimato da un sistema di equazioni lineari, le cui soluzioni sono espresse in termini di semplici valori di aspettazione quantistica che possono essere valutati efficientemente sull'hardware quantistico. Sono presentati esempi numerici per convalidare il metodo proposto per la soluzione dei problemi di guida d'onda 2-D.

CONTENTS

1	Richiami di elettromagnetismo	1
1.1	Introduzione	1
1.2	Onde elettromagnetiche	1
1.3	Guide d'onda	3
1.4	Equazione di Helmholtz	4
1.5	Modi TE e TM	5
2	Richiami di meccanica quantistica	8
2.1	Introduzione	8
2.2	Principi Generali	9
2.3	Postulati della meccanica quantistica	10
2.4	Spazio di Hilbert	11
2.5	Dualismo onda-particella	12
2.6	Dirac Notation	13
2.7	Entanglement Quantistico	14
3	Quantum Computing	16
3.1	Introduzione	16
3.2	Principi Generali	17
3.3	Cosa sono i qubits	18
3.4	La sfera di Bloch	19
3.5	I gates quantistici	20
4	Simulazione variazionale quantistica per i modi TE	27
4.1	Introduzione	27
4.2	Variational Quantum Eigensolver (VQE)	27
4.3	La formulazione dell'Hamiltoniana	28
4.4	Decomposizione della Hamiltoniana	29
4.5	Trasformazione in base Pauli-Z	30
4.6	La funzione di costo	30
5	Implementazione del VQE su un simulatore quantistico	33
5.1	Introduzione	33
5.2	Ambiente di sviluppo	34
5.3	Implementazione del VQE	34
6	Risultati finali	39
7	Discussioni e conclusioni finali	43

INTRODUZIONE

L'evoluzione rapida della tecnologia dell'informazione e delle telecomunicazioni ha portato a un aumento esponenziale nella generazione, elaborazione e trasmissione di dati. Questa crescente quantità di informazioni richiede algoritmi avanzati in grado di gestire complessità sempre maggiori e di fornire soluzioni efficienti. In questo contesto, la meccanica quantistica e il calcolo quantistico si sono affermati come campi di ricerca promettenti, capaci di superare le limitazioni dei computer classici e di offrire nuovi paradigmi per la computazione. Il calcolo quantistico si basa sui principi fondamentali della meccanica quantistica, una teoria che descrive il comportamento delle particelle subatomiche. A differenza dei classici bit, che possono assumere solo due stati (0 o 1), i qubit quantistici possono esistere contemporaneamente in una sovrapposizione di stati, grazie al concetto di sovrapposizione quantistica. Questo permette ai computer quantistici di esplorare simultaneamente molteplici soluzioni e di affrontare problemi complessi in modo più efficiente rispetto ai computer classici. Tra i vari paradigmi di calcolo quantistico, i variational quantum algorithms (VQA) si sono rivelati particolarmente promettenti. I VQA combinano i principi della meccanica quantistica con la teoria dell'ottimizzazione per risolvere problemi complessi, sfruttando la flessibilità dei circuiti quantistici a qubit. Utilizzando una combinazione di gate quantistici e misure, i VQA adattano iterativamente i parametri di un circuito quantistico per minimizzare una funzione di costo associata al problema in esame. In questa tesi, ci concentriamo sull'applicazione di un VQE per il trattamento delle onde elettromagnetiche. Le onde elettromagnetiche svolgono un ruolo cruciale in numerosi settori, come le telecomunicazioni, l'ottica e l'ingegneria delle microonde. La comprensione e la manipolazione delle caratteristiche delle onde elettromagnetiche sono fondamentali per lo sviluppo di tecnologie avanzate, come reti di comunicazione ad alta velocità, sensori ottici e dispositivi di trasmissione wireless. L'obiettivo principale di questa tesi è studiare come il VQE è utilizzato per simulare e ottimizzare il comportamento delle onde elettromagnetiche. In particolare, esploreremo l'applicazione di VQE per i modi transverse electric (TE), che sono modi di propagazione delle onde elettromagnetiche in cui il campo elettrico è perpendicolare alla direzione di propagazione. Studiare e manipolare questi modi TE può fornire informazioni preziose per progettare guide d'onda e dispositivi ottici avanzati. In seguito, forniremo una panoramica dettagliata dei concetti chiave relativi alle onde elettromagnetiche, alla meccanica quantistica e al calcolo quantistico. Successivamente, illustreremo l'implementazione di un VQE con 3 qubit per i modi

TE delle onde elettromagnetiche su un simulatore quantistico. Infine, discuteremo i risultati ottenuti e forniremo conclusioni sulle potenziali applicazioni e sviluppi futuri di questa metodologia. Il primo capitolo fornisce una panoramica sulle onde elettromagnetiche, concentrandosi sulle guide d'onda. Vengono descritte le guide d'onda rettangolari e viene introdotta l'equazione di Helmholtz, che governa il comportamento delle onde elettromagnetiche. Il secondo capitolo si richiama alla meccanica quantistica, e fornisce i principi fondamentali e la notazione Bra-Ket. Questa sezione introduce inoltre lo spazio di Hilbert e l'entanglement quantistico, concetti essenziali per comprendere il calcolo quantistico. Il terzo capitolo delinea i concetti di base del calcolo quantistico; I qubit, unità di base dell'informazione quantistica, e la sfera di Bloch per visualizzare lo stato quantistico. Vengono inoltre illustrati i principali gate quantistici, tra cui i gate di Pauli, i gate Rx, Ry e Rz, l'Hadamard gate e i gate di controllo. Il quarto capitolo si concentra sulla simulazione variazionale quantistica (VQE) per i modi TE (transverse electric) delle onde elettromagnetiche. Viene descritta l'Hamiltoniana del sistema e viene introdotta la funzione di costo utilizzata nel VQE per ottenere una soluzione approssimata. Il quinto capitolo illustra l'implementazione del VQE su un simulatore quantistico. Vengono fornite informazioni sul software utilizzato, come Jupyter, e vengono descritte le fasi principali dell'implementazione. Il sesto capitolo presenta i risultati finali ottenuti dall'implementazione del VQE per i modi TE delle onde elettromagnetiche. Nel settimo capitolo si riassumono le discussioni e le conclusioni finali raggiunte nell'ambito di questa tesi. Infine, nell'ultima sezione, vengono forniti i riferimenti bibliografici e le fonti online consultate per approfondire gli argomenti trattati nella tesi.

RICHIAMI DI ELETTROMAGNETISMO

1.1 INTRODUZIONE

La propagazione delle onde elettromagnetiche e le guide d'onda sono concetti fondamentali nello studio delle telecomunicazioni e delle comunicazioni ottiche. Questo capitolo si propone di esplorare e analizzare l'interazione tra le onde elettromagnetiche e le guide d'onda, concentrandosi sui modi TE (Transverse Electric) e TM (Transverse Magnetic) e sull'applicazione dell'equazione di Helmholtz. La prima sezione, 1.2, esamina le onde elettromagnetiche, che sono una forma di energia che si propaga attraverso lo spazio sotto forma di campi elettrici e magnetici. Saranno discussi i principi di base delle onde elettromagnetiche, come la loro natura oscillante e la relazione tra campo elettrico e campo magnetico. Nella sezione successiva, 1.3, verranno introdotte le guide d'onda, che sono strutture fisiche in cui le onde elettromagnetiche possono essere confinate e guidate lungo un percorso specifico. Saranno esaminate le caratteristiche delle guide d'onda, come la loro forma, i materiali di cui sono composte e le proprietà di propagazione delle onde all'interno di esse. Nella sezione 1.4, si affronterà l'equazione di Helmholtz, che è un'equazione differenziale parziale che descrive il comportamento delle onde elettromagnetiche all'interno delle guide d'onda. Saranno presentati i concetti chiave dell'equazione di Helmholtz e la sua importanza nello studio dei modi TE e TM. Infine, nella sezione 1.5, verranno approfonditi i modi TE e TM, che rappresentano le diverse configurazioni di campo elettrico e campo magnetico all'interno delle guide d'onda. Saranno analizzate le caratteristiche distintive di questi modi, come il numero di nodi e le loro applicazioni pratiche.

1.2 ONDE ELETTROMAGNETICHE

Le onde elettromagnetiche sono fenomeni fondamentali che permeano il nostro universo. Sono responsabili di una vasta gamma di processi fisici e svolgono un ruolo cruciale in numerose applicazioni pratiche, dalle comunicazioni wireless all'ottica, dall'energia solare alla spettroscopia. Per comprenderne appieno le caratteristiche e l'importanza, è necessario analizzare le loro proprietà generali e il loro comportamento specifico. Le onde elettromagnetiche sono una forma di radiazione, ovvero un modo in cui l'energia si propaga nello spazio. Queste onde sono generate dalla variazione di un campo elettrico e di un campo magnetico nel tempo e nello spazio. Ciò significa che sono

caratterizzate da una natura ondulatoria e da una dualità tra campo elettrico e campo magnetico. Un aspetto fondamentale delle onde elettromagnetiche è la loro capacità di propagarsi nel vuoto a una velocità costante, nota come velocità della luce nel vuoto (circa 299.792.458 metri al secondo). Questa velocità è una delle costanti fondamentali dell'universo e rappresenta un limite superiore per la velocità di qualsiasi oggetto fisico. Inoltre, le onde elettromagnetiche si propagano in linea retta, a meno che non vengano deviate o modificate dalle interazioni con la materia. Le onde elettromagnetiche si distinguono per la loro frequenza e lunghezza d'onda. La frequenza è il numero di cicli completi che l'onda compie in un secondo ed è misurata in unità di Hertz (Hz), mentre la lunghezza d'onda rappresenta la distanza tra due punti equivalenti sull'onda ed è misurata in unità di lunghezza, come metri o nanometri. Esiste una relazione inversa tra la frequenza e la lunghezza d'onda: onde con frequenza più alta hanno lunghezza d'onda più corta e viceversa. Questa relazione è descritta dall'equazione della velocità di propagazione delle onde elettromagnetiche, che afferma che la velocità della luce è uguale al prodotto della frequenza per la lunghezza d'onda. Lo spettro delle onde elettromagnetiche è vasto e copre una gamma di frequenze estremamente ampia, chiamata spettro elettromagnetico. Questo spettro è suddiviso in diverse regioni, ognuna delle quali corrisponde a una specifica gamma di frequenze e presenta caratteristiche e applicazioni uniche. Le regioni dello spettro elettromagnetico includono onde radio, microonde, infrarossi, luce visibile, ultravioletti, raggi X e raggi gamma. Le onde elettromagnetiche sono caratterizzate anche da proprietà di polarizzazione e direzione di propagazione. La polarizzazione si riferisce all'orientamento del campo elettrico dell'onda rispetto alla direzione di propagazione. L'onda può essere polarizzata linearmente, circolarmente o in modo ellittico, a seconda dell'orientamento e della forma del campo elettrico. La direzione di propagazione indica il percorso seguito dall'onda nel suo spostamento attraverso lo spazio. Oltre alle proprietà generali, le onde elettromagnetiche possono manifestarsi in diverse forme e strutture, come ad esempio le guide d'onda. Le guide d'onda sono strutture fisiche che consentono il confinamento e la guida delle onde elettromagnetiche lungo un percorso definito. Esistono diversi tipi di guide d'onda, tra cui le guide d'onda rettangolari che sono ampiamente utilizzate nelle telecomunicazioni e nell'ottica. Le guide d'onda rettangolari sono costituite da una struttura rettangolare, spesso realizzata con materiali dielettrici o conduttori. Queste guide d'onda consentono la propagazione delle onde elettromagnetiche attraverso riflessioni interne totali, in cui l'onda rimbalza sulle pareti della guida d'onda. Le dimensioni della guida d'onda rettangolare determinano le modalità di propagazione delle onde elettromagnetiche all'interno della guida stessa. In particolare, l'equazione di Helmholtz viene utilizzata per descrivere le modalità di

propagazione elettromagnetiche in una guida d'onda rettangolare. Le modalità di propagazione all'interno di una guida d'onda rettangolare possono essere classificate come modi transverse electric (TE) e modi transverse magnetic (TM). I modi TE sono caratterizzati da un campo elettrico che è perpendicolare alla direzione di propagazione, mentre i modi TM presentano un campo magnetico perpendicolare alla direzione di propagazione. Lo studio e la comprensione dei modi TE e TM sono di grande importanza per la progettazione e l'ottimizzazione delle guide d'onda rettangolari e dei dispositivi ottici associati.

1.3 GUIDE D'ONDA

Le guide d'onda sono dispositivi utilizzati per guidare le onde elettromagnetiche lungo un percorso specifico, come un cavo o una fibra ottica. È un mezzo di trasmissione di un segnale utilizzato in molti campi, tra cui le telecomunicazioni, l'elettronica e la fisica delle particelle. Le guide d'onda possono essere realizzate in diversi materiali, ma generalmente sono costituite da un conduttore circondato da un dielettrico. Il conduttore interno viene utilizzato per guidare l'onda elettromagnetica lungo il percorso desiderato, mentre il dielettrico circostante viene utilizzato per proteggere l'onda elettromagnetica dall'ambiente circostante e per ridurre le perdite di energia. Le guide d'onda hanno una sezione trasversale di forma ad esempio rettangolare, circolare ed ellittica. Quest'ultime determinano le proprietà di propagazione delle onde all'interno delle guide. Le onde vengono generate da una sorgente e vengono introdotte nella guida d'onda attraverso un'antenna di alimentazione. Le onde si propagano all'interno della sezione attraverso le riflessioni continue dalle pareti della guida stessa. Le guide d'onda rettangolari sono un tipo di guida d'onda utilizzata per trasmettere e guidare le onde elettromagnetiche in un percorso rettangolare. Le onde elettromagnetiche viaggiano all'interno delle guide d'onda attraverso quattro pareti metalliche parallele, che formano un percorso rettangolare. Le pareti metalliche sono generalmente realizzate in materiali conduttori come l'ottone, l'alluminio o l'argento, mentre lo spazio all'interno delle pareti è riempito con un dielettrico, come l'aria o un materiale plastico. Le onde elettromagnetiche si propagano lungo il percorso rettangolare all'interno della guida d'onda, rimbalzando tra le pareti metalliche e perdendo energia solo attraverso l'assorbimento del dielettrico. Le guide d'onda rettangolari sono utilizzate per trasmettere segnali a frequenze elevate e vengono utilizzate in molti campi, tra cui le telecomunicazioni, l'elettronica e la fisica delle particelle. In particolare, le guide d'onda rettangolari sono progettate in modo da avere una larghezza e un'altezza specifiche, che determinano la frequenza di risonanza. Quando l'onda elettromagnetica ha una frequenza che è uguale alla frequenza di risonanza della guida d'onda, l'onda viene

amplificata e può viaggiare per lunghe distanze senza perdite di energia significative. In sintesi, le guide d'onda rettangolari sono un importante tipo di guida d'onda utilizzata per trasmettere e guidare le onde elettromagnetiche lungo un percorso rettangolare con perdite di energia ridotte.

1.4 EQUAZIONE DI HELMHOLTZ

In questa sezione parlerò della legge di conservazione dell'energia meccanica di Helmholtz e della sua applicazione all'equazione di Helmholtz per le guide d'onda rettangolari. La legge di conservazione dell'energia meccanica afferma che l'energia meccanica totale di un sistema isolato rimane costante nel tempo, a meno che non ci sia un'interazione con un sistema esterno. Questo principio fondamentale della fisica è alla base della comprensione di molti fenomeni fisici, come il movimento dei corpi celesti, l'energia cinetica e potenziale dei corpi in movimento e i processi termodinamici. L'equazione di Helmholtz per le guide d'onda rettangolari è una delle applicazioni di questa legge. Questa equazione descrive l'onda elettromagnetica che si propaga lungo una guida d'onda rettangolare, in cui il campo elettrico e il campo magnetico sono interconnessi e si propagano insieme. L'indice di rifrazione locale del mezzo può variare lungo la guida d'onda, il che significa che la velocità di propagazione dell'onda può variare e può essere influenzata dalle proprietà del mezzo. L'equazione di Helmholtz per le guide d'onda rettangolari è importante nella progettazione di dispositivi ottici e di comunicazione, come i cavi in fibra ottica. Questa equazione consente di modellare e prevedere il comportamento delle onde elettromagnetiche che si propagano lungo la guida d'onda e di progettare guide d'onda con proprietà specifiche per applicazioni specifiche. Inoltre, l'applicazione della legge di conservazione dell'energia meccanica di Helmholtz alle guide d'onda rettangolari consente di comprendere come l'energia elettromagnetica si propaga lungo la guida d'onda e come l'energia viene trasmessa da un punto all'altro. Questo è importante nella progettazione di dispositivi di comunicazione ad alta velocità, in cui l'energia deve essere trasmessa in modo efficiente e senza perdite. Considera una guida d'onda metallica cava rettangolare il cui asse di guida coincide con l'asse z e che è riempita con un materiale omogeneo con permeabilità μ e permittività ϵ . Il campo elettrico E e il campo magnetico H che si propagano nella guida d'onda possono essere decomposti in componenti lungo l'asse z e componenti trasversali all'asse z . Indicando rispettivamente i campi elettrici e magnetici trasversali come E_z e H_z , si possono ottenere le equazioni scalari bidimensionali per l'onda elettrica trasversale (TE) e l'onda magnetica trasversale (TM), rispettivamente:

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

per le onde TE,

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

per le onde TM,

dove il pedice s rappresenta lo spazio sottostante trasversale alla direzione z , e $k_s^2 = k^2 - k_z^2$, dove $k = (\omega^2 \mu \epsilon)^{\frac{1}{2}}$ è il numero d'onda all'interno della guida d'onda, ω rappresenta la frequenza angolare mentre k_z è la componente di k nella direzione z . Le onde di modo TE e TM, che si propagano nella guida d'onda metallica, soddisfano determinate condizioni al contorno sulla parete dell'oggetto. In particolare, la componente E_z del campo elettrico deve soddisfare la condizione al contorno di Dirichlet, ovvero deve essere uguale a zero sulla parete della guida d'onda. D'altra parte, la componente H_z del campo magnetico deve soddisfare la condizione al contorno di Neumann, che richiede $\nabla_s H_z = 0$ (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 qubit dimostrando una maggiore semplicità. Ne deriva che l'approccio quantistico permette una maggiore efficienza e velocità di calcolo. Tradizionalmente l'equazione di Helmholtz viene discretizzata e convertita in equazione matriciale e successivamente implementata su computer classici.

1.5 MODI TE E TM

Le onde TE (Transverse Electric) e TM (Transverse Magnetic) sono due tipi di onde elettromagnetiche che si propagano lungo le guide d'onda rettangolari. Le onde TE si caratterizzano per avere solo componenti del campo elettrico che sono perpendicolari alla direzione di propagazione dell'onda elettromagnetica. In altre parole, il campo elettrico è parallelo alle pareti della guida d'onda rettangolare e non ha componenti lungo la direzione di propagazione dell'onda. Le onde TE sono quindi dette onde "elettriche" perché il campo elettrico è l'unico campo che ha una componente non nulla. Le onde TM, invece, sono caratterizzate dall'aver solo componenti del campo magnetico che sono perpendicolari alla direzione di propagazione dell'onda elettromagnetica. In altre parole, il campo magnetico è parallelo alle pareti della guida d'onda rettangolare e non ha componenti lungo la direzione di propagazione dell'onda. Le onde TM sono quindi dette onde "magnetiche" perché il campo magnetico è l'unico campo che ha una componente non nulla. Entrambi i tipi di onde possono essere utilizzati per trasmettere segnali lungo le guide d'onda rettangolari, ma la scelta tra TE e TM dipende dalle specifiche esigenze

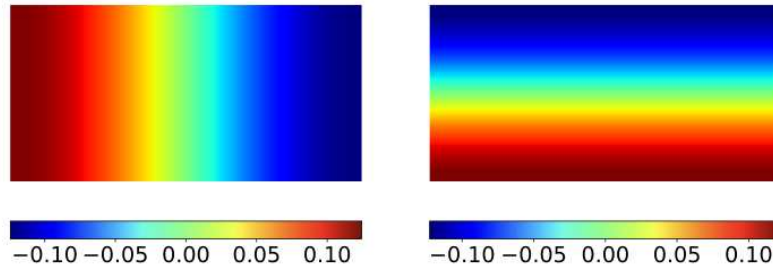


Figure 1.1: Plot a colori bidimensionale della H_z dei modi TE della guida d'onda: TE_{10} e TE_{01} .

dell'applicazione. Le onde TE sono importanti per la trasmissione di segnali lungo le guide d'onda rettangolari, in particolare per le frequenze basse. Grazie alla loro proprietà di avere solo il campo elettrico perpendicolare alla direzione di propagazione dell'onda, le onde TE sono meno suscettibili alle perdite di energia rispetto alle onde TM (Transverse Magnetic), che hanno solo il campo magnetico perpendicolare alla direzione di propagazione dell'onda. Tuttavia, le onde TE possono avere alcuni svantaggi in alcune applicazioni. Ad esempio, a frequenze elevate, le onde TE possono causare problemi di dispersione, che possono portare a una riduzione della qualità del segnale trasmesso. Inoltre, le onde TE possono essere più difficili da generare rispetto alle onde TM, poiché richiedono un campo elettrico perpendicolare alle pareti della guida d'onda. Entrambi i modi TE e TM possono essere caratterizzati da diversi modi di propagazione, ciascuno con una specifica distribuzione di campo e frequenza di taglio associata. Questi modi possono essere calcolati risolvendo le equazioni di Helmholtz per i campi trasversali all'interno della guida d'onda. I modi TE sono caratterizzati dal fatto che il campo elettrico è completamente trasversale all'asse di propagazione z . Ciò significa che non vi è alcuna componente del campo elettrico lungo l'asse z . In questi modi, il campo magnetico ha sia una componente trasversale all'asse z che una componente lungo l'asse z . I modi TE sono spesso indicati come TE_{mn} , dove m e n sono gli indici dei modi che rappresentano il numero di nodi lungo le direzioni x e y rispettivamente. Ad esempio, il modo TE_{10} ha un nodo lungo l'asse x e nessun nodo lungo l'asse y (vedi Figura 1.1). D'altra parte, i modi TM sono caratterizzati dal fatto che il campo magnetico è completamente trasversale all'asse z , mentre il campo elettrico ha sia una componente trasversale che una componente lungo l'asse z . In questi modi, non vi è alcuna componente del campo magnetico lungo l'asse di propagazione. I modi TM sono spesso indicati come TM_{mn} , dove m e n rappresentano gli indici dei modi che rappresentano il numero di nodi lungo le direzioni x e y rispettivamente. Ad esempio, il modo TM_{21} ha due nodi lungo l'asse x e un nodo lungo l'asse y (vedi Figura 1.2).

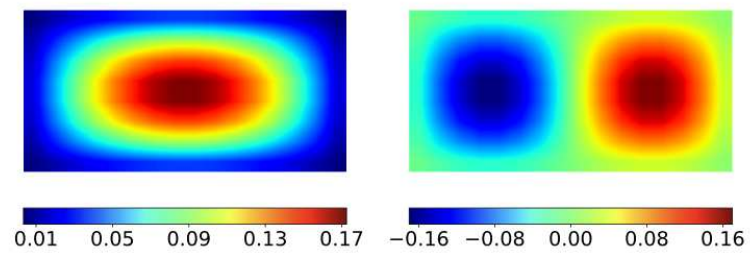


Figure 1.2: Plot a colori bidimensionale della E_z dei modi TM della guida d'onda: TM_{11} e TM_{21} .

2.1 INTRODUZIONE

La meccanica quantistica è la teoria fisica che descrive il comportamento delle particelle subatomiche, come gli elettroni e i fotoni. Questa teoria è fondamentale per la comprensione del quantum computing, un tipo di computer che sfrutta le proprietà della meccanica quantistica per elaborare informazioni. Questo capitolo si propone di fornire una panoramica degli elementi essenziali della meccanica quantistica, concentrandosi su principi generali, postulati, spazio di Hilbert, dualismo onda-particella, notazione di Dirac e l'entanglement quantistico. Nella sezione 2.2 esamineremo i principi generali della meccanica quantistica. Questi principi includono concetti fondamentali come l'indeterminazione di Heisenberg, il principio di sovrapposizione degli stati e la natura probabilistica delle misure quantistiche. Sarà sottolineata l'importanza di questi principi nel comprendere il comportamento delle particelle subatomiche e il loro ruolo nella formulazione dei postulati della meccanica quantistica. Successivamente, nella sezione 2.3, esploreremo i postulati della meccanica quantistica che stabiliscono le regole di base per la descrizione matematica e la predizione del comportamento delle particelle quantistiche. Saranno discussi i concetti di stato quantistico, operatore di osservabile, evoluzione temporale e il ruolo della funzione d'onda nello spazio di Hilbert. Nella sezione 2.4 approfondiremo le proprietà e le caratteristiche dello spazio di Hilbert che raffigura lo spazio matematico in cui sono rappresentati gli stati quantistici. Il dualismo onda-particella, oggetto della sezione 2.5, è un concetto centrale nella meccanica quantistica. Esploreremo come la teoria quantistica descrive sia il comportamento ondulatorio che quello corpuscolare delle particelle subatomiche. Saranno presentati gli esperimenti chiave che hanno dimostrato questa dualità e le implicazioni concettuali che essa comporta. Nella sezione 2.6 introdurremo la notazione di Dirac, un linguaggio matematico elegante ed efficiente per descrivere gli stati quantistici e gli operatori. Questa notazione, basata su vettori e ket, semplifica notevolmente i calcoli e la rappresentazione delle relazioni tra gli stati quantistici. Infine, nella sezione 2.7, esploreremo l'entanglement quantistico, un fenomeno fondamentale della meccanica quantistica, in cui due o più particelle diventano correlati in modo indissolubile. Saranno presentati concetti come la sovrapposizione quantistica, la misurazione dei sistemi correlati e le applicazioni dell'entanglement quantistico in ambito di informazione quantistica e telecomunicazioni.

2.2 PRINCIPI GENERALI

I principi generali degli stati e degli autostati quantistici sono fondamentali nella teoria quantistica e nella descrizione dei sistemi fisici a livello microscopico. Essi forniscono le basi per comprendere le proprietà delle particelle subatomiche e delle interazioni quantistiche.

- Stati quantistici: descrivono il sistema fisico nel contesto della meccanica quantistica. Un sistema quantistico può esistere in diversi stati quantici, e ogni stato rappresenta una descrizione completa delle proprietà fisiche del sistema in quel momento. Gli stati quantistici sono rappresentati da vettori nel cosiddetto spazio di Hilbert, che è uno spazio vettoriale complesso.
- Principio di sovrapposizione: aspetto fondamentale della meccanica quantistica secondo cui uno stato quantico può esistere in una combinazione lineare di altri stati. Ad esempio, una particella può essere in uno stato che è una sovrapposizione di più posizioni o di più stati di spin. La sovrapposizione quantistica è rappresentata da un vettore nello spazio di Hilbert.
- Principio di indeterminazione di Heisenberg: secondo cui non è possibile misurare simultaneamente con precisione illimitata alcune coppie di grandezze fisiche, come ad esempio posizione e momento o energia e tempo. Esiste quindi un limite intrinseco alla precisione con cui possiamo conoscere le proprietà di un sistema quantistico.
- Autostati quantistici: noti anche come stati stazionari, sono gli stati che corrispondono a valori ben definiti di una grandezza fisica misurabile. Ad esempio, l'energia di un sistema quantistico può essere descritta da una serie di autostati quantici corrispondenti a livelli di energia specifici. Gli autostati quantici sono rappresentati da vettori che sono soluzioni delle equazioni di Schrödinger o di altre equazioni quantistiche.
- Principio di sovrapposizione degli autostati: stabilisce che, se un sistema quantistico è in uno stato di sovrapposizione, la misurazione di una grandezza fisica associata a un autostato collassa il sistema in uno degli autostati corrispondenti alla sovrapposizione, con una probabilità determinata dalle ampiezze di probabilità.

Questi principi generali sono fondamentali per comprendere il comportamento e le proprietà dei sistemi quantistici. Essi forniscono le basi per la descrizione matematica dei fenomeni quantistici e per l'interpretazione dei risultati delle misurazioni in termini di probabilità.

2.3 POSTULATI DELLA MECCANICA QUANTISTICA

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 sarà trattato 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:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle,$$

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. Nel contesto del quantum computing e del VQE (Variational Quantum Eigensolver), l'expectation value (valore di aspettazione) è un concetto fondamentale. Rappresenta la previsione statistica del valore medio di un'osservabile, ovvero di una grandezza fisica misurabile, all'interno di un sistema quantistico. Nel VQE, l'osservabile di interesse è l'hamiltoniana del sistema, che rappresenta l'energia totale. L'expectation value di un'osservabile viene calcolato utilizzando il formalismo matematico della meccanica quantistica. In generale, l'expectation value dell'operatore H , rappresentato come $\langle H \rangle$, è calcolato come il valore medio delle misure dell'osservabile H su uno stato quantistico.

Matematicamente, si utilizza l'equazione:

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle,$$

Dove $|\psi\rangle$ rappresenta lo stato quantistico su cui viene effettuata la misura e H è l'operatore corrispondente all'osservabile di interesse. L'hamiltoniana viene rappresentata come un operatore, e calcolando l'expectation value dell'hamiltoniana sullo stato quantistico ottenuto, si ottiene un valore che corrisponde a un'approssimazione dell'energia di ground state del sistema. L'expectation value è quindi un concetto cruciale nel VQE, in quanto fornisce una misura dell'energia di ground state del sistema quantistico in esame e guida l'ottimizzazione dei parametri dell'ansatz per raggiungere una soluzione approssimata ottimale.

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 e ψ è la funzione d'onda del sistema.

2.4 SPAZIO DI HILBERT

Lo spazio di Hilbert è un concetto fondamentale nella teoria quantistica e rappresenta lo spazio matematico in cui sono descritti gli stati quantistici dei sistemi fisici. Prende il nome dal matematico David

Hilbert, che ha contribuito in modo significativo allo sviluppo della teoria degli spazi vettoriali. Lo spazio di Hilbert è uno spazio vettoriale complesso, gli elementi dello spazio sono vettori che possono essere combinati linearmente e moltiplicati per scalari complessi. Ogni vettore nello spazio di Hilbert rappresenta uno stato quantistico. La dimensione dello spazio di Hilbert dipende dal sistema fisico considerato. Ad esempio, se stiamo descrivendo una particella in una dimensione, lo spazio di Hilbert sarà un insieme infinito di vettori, uno per ogni possibile posizione della particella. Se stiamo invece descrivendo una particella in tre dimensioni, lo spazio di Hilbert sarà un insieme di vettori infinito-dimensionale. Gli stati quantistici nello spazio di Hilbert sono rappresentati da vettori a cui è associata una norma, che rappresenta la loro lunghezza. La norma del vettore di stato è solitamente normalizzata a 1, il che significa che la somma dei quadrati dei moduli dei coefficienti del vettore è uguale a 1. Inoltre, gli stati quantistici nello spazio di Hilbert sono soggetti al principio di sovrapposizione, il che significa che possono esistere in una combinazione lineare di altri stati. Questo consente di descrivere lo stato di un sistema quantistico come una sovrapposizione di più stati, con coefficienti complessi che rappresentano le ampiezze di probabilità associate a ciascuno stato. Gli operatori quantistici, che rappresentano le grandezze fisiche misurabili, agiscono sui vettori nello spazio di Hilbert. Questi operatori possono essere rappresentati come matrici o come operatori lineari nello spazio di Hilbert. Le misurazioni delle grandezze fisiche sono rappresentate da operatori di misura, i quali, applicati a uno stato quantistico, restituiscono un valore che rappresenta il risultato della misurazione.

2.5 DUALISMO ONDA-PARTICELLA

Il dualismo onda-particella è uno dei concetti fondamentali della meccanica quantistica, e si riferisce al fatto che le particelle subatomiche, come gli elettroni e i fotoni, possono comportarsi sia come particelle sia come onde. Questo concetto, introdotto da Louis de Broglie nel 1924, indica che le particelle subatomiche possano essere descritte da onde. In particolare, de Broglie ha proposto che ad ogni particella subatomica sia associata una lunghezza d'onda, la cui relazione con l'energia della particella è data da:

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

dove λ è la lunghezza d'onda, h è la costante di Planck e p è la quantità di moto della particella. La funzione d'onda descrive la distribuzione di probabilità di trovare la particella in una determinata posizione o con una determinata energia. Questa idea è stata successivamente confermata da esperimenti, come la diffrazione di elettroni attraverso

un reticolo cristallino, che hanno dimostrato che gli elettroni possono comportarsi come onde. Inoltre, la meccanica quantistica descrive le particelle subatomiche attraverso funzioni d'onda, che indicano la probabilità di trovare la particella in una determinata posizione o con una determinata energia. Tuttavia, le particelle subatomiche possono anche comportarsi come particelle, in quanto possono essere rivelate attraverso la loro interazione con altri oggetti. Ad esempio, gli elettroni possono essere individuati attraverso la loro interazione con uno schermo di rilevazione, che registra la loro posizione. In sintesi, il dualismo onda-particella è un concetto fondamentale della meccanica quantistica, che si riferisce al fatto che le particelle subatomiche possono comportarsi sia come particelle sia come onde.

2.6 DIRAC NOTATION

La notazione Bra-Ket, anche conosciuta come notazione di Dirac, è un sistema di notazione matematica ampiamente utilizzato nella teoria quantistica per rappresentare gli stati quantistici, gli operatori e le grandezze fisiche. È stata introdotta da Paul Dirac e offre un modo conciso ed elegante per descrivere i concetti quantistici. La notazione Bra-Ket utilizza i simboli " $|$ " e " \rangle " (chiamata "ket") per rappresentare gli stati quantistici, mentre i simboli " \langle " e " $|$ " (chiamata "bra") rappresentano i loro stati duali, noti come "bra". Pertanto, uno stato quantistico viene rappresentato come un ket " $|\psi\rangle$ ", dove " ψ " è un simbolo che indica lo stato quantistico. Gli stati duali, rappresentati come bra, sono elementi dello spazio duale dello spazio di Hilbert in cui sono definiti gli stati ket. Un bra " $\langle\psi|$ " rappresenta un elemento dello spazio duale corrispondente all'elemento ket " $|\psi\rangle$ " nello spazio di Hilbert. La notazione Bra-Ket permette di definire una serie di operazioni comuni all'interno della teoria quantistica. Alcune delle operazioni più comuni sono:

- Prodotto Scalare: tra due stati quantistici $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$ viene indicato come $\langle\psi|\phi\rangle$. Rappresenta la proiezione di un vettore su un altro nello spazio di Hilbert e restituisce un numero complesso. Il modulo quadro di questo numero complesso rappresenta la probabilità di trovare lo stato $|\psi\rangle$ quando si misura nello stato $|\phi\rangle$.
- Operatore Hermitiano: gli operatori quantistici possono essere rappresentati utilizzando la notazione Bra-Ket come matrici. Un operatore Hermitiano, che rappresenta una grandezza fisica misurabile, soddisfa la proprietà $\langle\psi|A|\phi\rangle = \langle\phi|A^\dagger|\psi\rangle^*$, dove " A^\dagger " indica l'aggiunto dell'operatore A. Questa proprietà assicura che il valore di aspettazione misurato con l'operatore A sia un numero reale.

- Operatore Unitario: rappresenta una trasformazione conservativa della teoria quantistica, è caratterizzato dalla proprietà $\langle \psi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$, dove "U†" indica l'aggiunto dell'operatore U. Questa proprietà garantisce che la probabilità totale di uno stato rimanga invariata dopo l'applicazione di un operatore unitario.

La notazione Bra-Ket rende possibile esprimere le equazioni della meccanica quantistica in modo conciso ed elegante. Ad esempio, l'equazione di Schrödinger può essere scritta come:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

dove H è l'operatore hamiltoniano che rappresenta l'energia totale del sistema e $|\psi\rangle$ è lo stato quantistico associato a quell'energia E.

2.7 ENTANGLEMENT QUANTISTICO

L'entanglement quantistico è un fenomeno fondamentale della meccanica quantistica che coinvolge la correlazione intrinseca tra particelle subatomiche. Quando due o più particelle vengono messe in uno stato quantistico entangled, le loro proprietà diventano interdipendenti e non possono essere descritte indipendentemente l'una dall'altra. Per comprendere l'entanglement quantistico, è necessario avere familiarità con il concetto di stato quantistico. In meccanica quantistica, lo stato di una particella è rappresentato da una funzione d'onda, che può essere una combinazione lineare di diverse configurazioni possibili. Quando due o più particelle sono entangled, lo stato complessivo del sistema non può essere espresso come una semplice combinazione dei singoli stati delle particelle componenti. Invece, lo stato del sistema deve essere descritto da una funzione d'onda congiunta che tiene conto di tutte le possibili configurazioni delle particelle coinvolte. Un aspetto cruciale dell'entanglement quantistico è che le proprietà misurabili di una particella entangled sono correlate con quelle di un'altra particella entangled, anche se le due particelle sono separate da distanze enormi. Questa correlazione è istantanea, indipendentemente dalla distanza, e sembra violare il principio della causalità, secondo il quale un evento può influenzare solo eventi futuri nel suo cono di luce. Un esperimento comune per dimostrare l'entanglement quantistico è il fenomeno della correlazione spin. Si considerino due particelle subatomiche, ad esempio due elettroni, che sono state preparate in uno stato di spin entangled. Lo spin è una proprietà intrinseca delle particelle subatomiche che può essere orientato in una direzione specifica. Quando le due particelle sono misurate, si scopre che i loro spin sono correlati in un modo preciso, indipendentemente dalla distanza tra di loro. Se la misurazione di uno degli elettroni rivela che il suo spin è orientato verso l'alto, allora si sa immediatamente che lo spin dell'altro elettrone sarà orientato verso il basso, e viceversa. Questa

correlazione persiste anche se le due particelle vengono separate da distanze enormi. L'entanglement quantistico è alla base di numerose applicazioni. Ad esempio, nell'ambito della computazione quantistica, l'entanglement consente di creare qubit entangled, che possono essere sfruttati per eseguire calcoli paralleli più efficienti rispetto ai calcolatori classici.

3.1 INTRODUZIONE

Il computing quantistico è un campo emergente dell'informatica che promette di rivoluzionare radicalmente la capacità di elaborazione dei calcolatori tradizionali. Mentre i computer classici utilizzano bit come unità fondamentali di informazione, i computer quantistici sfruttano i qubit, dotati di proprietà quantistiche come la sovrapposizione e l'entanglement per manipolare e rappresentare l'informazione. Questa nuova prospettiva apre la strada a calcoli più potenti e complessi che potrebbero risolvere problemi al di là delle possibilità dei computer tradizionali. Nella sezione 3.2, esploreremo gli aspetti generali del quantum computing. Cominceremo con una panoramica delle differenze chiave tra i computer classici e quelli quantistici. I computer classici rappresentano l'informazione mediante bit che possono essere in uno stato di 0 o 1. I qubit, d'altra parte, possono esistere in uno stato di sovrapposizione che combina 0 e 1 contemporaneamente. Questa sovrapposizione consente ai qubit di eseguire calcoli simultanei su un'ampia gamma di possibili combinazioni di bit, fornendo un'enorme potenza di calcolo parallelo. La sezione 3.3 si concentra sui qubit, le unità di informazione fondamentali nei computer quantistici. A differenza dei bit classici, che possono essere in uno stato di 0 o 1, i qubit possono esistere in uno stato di sovrapposizione, rappresentato da una combinazione lineare degli stati di base 0 e 1. Questo significa che un qubit può essere simultaneamente in uno stato di 0 e 1 con una certa probabilità associata a ciascun stato. La sovrapposizione dei qubit consente loro di elaborare l'informazione in parallelo, eseguendo calcoli su tutte le possibili combinazioni di bit contemporaneamente. Tuttavia, per sfruttare appieno il potenziale dei qubit, è necessario poter misurare il loro stato. La misurazione di un qubit determina il suo stato finale, proiettandolo in uno dei due stati di base 0 o 1 con una certa probabilità. Questa misurazione introduce una componente probabilistica nel computing quantistico. Nella sezione 3.4, esploreremo la sfera di Bloch, una rappresentazione geometrica che ci permette di visualizzare lo stato di un singolo qubit. La sfera di Bloch è uno strumento intuitivo che ci consente di comprendere meglio le proprietà quantistiche dei qubit, come la sovrapposizione e la fase. Ogni punto sulla sfera di Bloch rappresenta uno stato quantistico possibile per un qubit, mentre i poli nord e sud corrispondono agli stati di base 0 e 1. Attraverso la rappresentazione grafica della sfera di Bloch, possiamo comprendere meglio come i gate quantistici agis-

cano sui qubit, manipolando il loro stato e creando trasformazioni nell'informazione rappresentata. Nella sezione 3.5, ci concentreremo sui gate quantistici, che sono le operazioni fondamentali che agiscono sui qubit nel quantum computing. I gate quantistici consentono di manipolare lo stato dei qubit e di eseguire calcoli specifici. Essi corrispondono ai circuiti logici presenti nei computer classici e possono essere combinati per creare algoritmi quantistici complessi. I gate quantistici sfruttano le proprietà quantistiche dei qubit, come la sovrapposizione e l'entanglement, per eseguire operazioni su più qubit simultaneamente. I gate più comuni includono il gate di Pauli-X, che applica un'inversione logica allo stato del qubit, il gate di Hadamard, che crea sovrapposizione, e il gate di CNOT, che esegue operazioni controllate su due qubit intrecciati. Attraverso l'uso dei gate quantistici, i computer quantistici possono risolvere problemi complessi in modo più efficiente rispetto ai computer classici. Tuttavia, lo sviluppo di algoritmi quantistici efficaci e la realizzazione di qubit stabili rimangono ancora sfide significative da affrontare nel campo del quantum computing.

3.2 PRINCIPI GENERALI

Il quantum computing è una disciplina interdisciplinare che combina la meccanica quantistica, la teoria dell'informazione e la computer science. Si basa sui principi fondamentali della meccanica quantistica per manipolare e elaborare le informazioni in modo radicalmente diverso rispetto ai computer classici. Ecco alcuni aspetti generali del quantum computing:

- **Qubit:** sono la base del quantum computing, l'equivalente quantistico dei bit nei computer classici. A differenza dei bit, che possono assumere solo i valori "0" o "1", i qubit possono esistere in uno stato di sovrapposizione, in cui possono rappresentare simultaneamente "0" e "1". Ciò è possibile grazie al concetto di sovrapposizione quantistica, che consente ai qubit di esistere in molteplici stati contemporaneamente.
- **Entanglement:** un aspetto chiave del quantum computing che si verifica quando due o più qubit diventano correlati in modo intrinseco, indipendentemente dalla loro distanza fisica. Questo significa che la manipolazione di un qubit influirà istantaneamente sullo stato degli altri qubit entangled. L'entanglement consente il parallelismo quantistico e può essere sfruttato per eseguire calcoli più rapidamente rispetto ai computer classici.
- **Porte logiche quantistiche:** nella teoria dei computer classici, sono gli elementi di base che consentono di manipolare i bit e svolgere operazioni logiche. Nel quantum computing esse sono l'equivalente quantistico delle porte logiche classiche. Queste

porte quantistiche operano sui qubit e consentono di manipolare gli stati di sovrapposizione e l'entanglement per eseguire calcoli quantistici.

- Algoritmi quantistici: il quantum computing offre nuovi algoritmi che possono risolvere determinati problemi in modo più efficiente rispetto ai computer classici. Ad esempio, l'algoritmo di Shor può fattorizzare numeri molto grandi in tempi molto più brevi rispetto agli algoritmi classici, il che potrebbe mettere in discussione la sicurezza dei sistemi crittografici basati sulla fattorizzazione.

3.3 COSA SONO I QUBITS

I qubit, abbreviazione di "quantum bit", sono l'unità di informazione fondamentale nei calcolatori quantistici. A differenza dei bit classici nella computazione classica, che possono assumere solo uno dei due valori (0 o 1) in un dato momento, i qubit sfruttano i principi della meccanica quantistica per rappresentare e manipolare l'informazione in modo più complesso. Un qubit è un sistema quantistico che può esistere in una sovrapposizione lineare di più stati simultaneamente. Ciò significa che, a differenza dei bit classici che sono in uno stato definito (0 o 1), un qubit può rappresentare una combinazione di 0 e 1 contemporaneamente. In termini matematici, uno stato di qubit può essere espresso come una combinazione lineare degli stati di base $|0\rangle$ e $|1\rangle$:

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

Dove α e β sono numeri complessi che rappresentano le ampiezze di probabilità del qubit di essere nello stato $|0\rangle$ e $|1\rangle$ rispettivamente. La somma dei quadrati dei moduli delle ampiezze di probabilità deve essere uguale a 1, quindi $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Questa condizione garantisce che la probabilità totale di trovare il qubit in uno degli stati di base sia 1. Una caratteristica chiave dei qubit è la capacità di sfruttare l'entanglement quantistico. L'entanglement si verifica quando due o più qubit diventano correlati in modo intricato, in modo che lo stato di uno sia immediatamente correlato allo stato degli altri, indipendentemente dalla distanza che li separa. Questo fenomeno consente ai qubit di rappresentare e manipolare informazioni in modo altamente parallelo e potenzialmente ottenere vantaggi computazionali rispetto ai sistemi classici. Per manipolare i qubit, vengono utilizzate le porte quantistiche, come le porte di rotazione (R_x , R_y , R_z) che esamineremo in seguito, e altre porte di base come l'Hadamard gate (H) e il Pauli-X gate (NOT). Queste porte consentono di eseguire operazioni sullo stato dei qubit, come rotazioni, inversioni e creazione di sovrapposizioni. I qubit rappresentano il fondamento della computazione quantistica

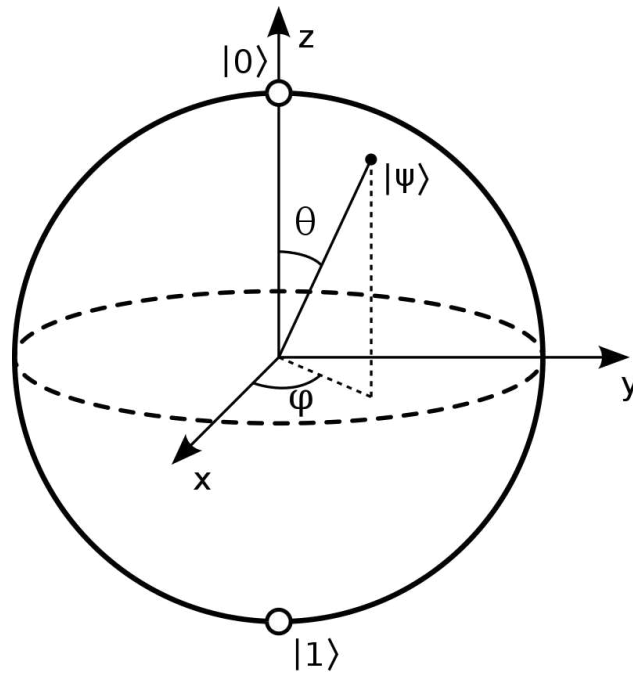


Figure 3.1: Sfera di Bloch

e offrono il potenziale per risolvere problemi computazionalmente complessi in modo più efficiente rispetto ai sistemi classici. La loro natura quantistica apre nuove prospettive per una vasta gamma di applicazioni.

3.4 LA SFERA DI BLOCH

La sfera di Bloch è una rappresentazione geometrica utilizzata nel quantum computing per visualizzare lo stato di un singolo qubit. È chiamata così in onore del fisico svizzero Felix Bloch, che ha introdotto questa rappresentazione nel 1946. La sfera di Bloch fornisce una rappresentazione intuitiva e compatta di tutti gli stati quantistici possibili di un qubit. La sfera di Bloch è una sfera immaginaria (Figura 3.1) con un raggio di 1 unità, il cui centro rappresenta lo stato di base $|0\rangle$ e la superficie rappresenta lo stato di base $|1\rangle$. Ogni punto sulla superficie della sfera rappresenta uno stato quantistico diverso del qubit. L'asse z della sfera rappresenta lo stato di base $|0\rangle$, mentre l'asse opposto ($-z$) rappresenta lo stato di base $|1\rangle$.

Per comprendere come funziona la sfera di Bloch, consideriamo un qubit generico descritto da uno stato puro $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, dove α e β sono ampiezze complesse che soddisfano $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ (per normalizzazione). Per rappresentare graficamente questo stato sulla sfera di Bloch, si traccia un vettore dal centro della sfera al punto corrispondente sulla superficie. La direzione di questo vettore è definita da due angoli: l'angolo θ (theta) rispetto all'asse z e l'angolo ϕ (phi) nel piano xy . L'angolo θ è dato da:

$$\theta = 2 \arcsin(|\alpha|)$$

Questo angolo rappresenta l'inclinazione del vettore rispetto all'asse z . Quando $\theta = 0$, il vettore punta lungo l'asse z e lo stato quantistico è $|0\rangle$. Quando $\theta = \pi$, il vettore punta lungo l'asse $-z$ e lo stato quantistico è $|1\rangle$.

L'angolo ϕ , invece, rappresenta la rotazione del vettore nel piano xy attorno all'asse z ed è dato da:

$$\phi = \arg \frac{\beta}{\alpha}$$

Questo angolo rappresenta la fase relativa tra le ampiezze α e β . In altre parole, determina la posizione del vettore lungo la circonferenza del piano xy . Ogni punto sulla superficie della sfera di Bloch rappresenta uno stato quantistico possibile del qubit. Gli stati puri si trovano sulla superficie della sfera, mentre gli stati misti (combinazioni probabilistiche di stati puri) si trovano all'interno della sfera. La sfera di Bloch fornisce una rappresentazione visiva intuitiva dello spazio degli stati di un singolo qubit. È utile per comprendere concetti come sovrapposizione, entanglement, rotazioni quantistiche e misure. Inoltre, può essere esteso per rappresentare lo spazio degli stati di più qubit, noto come spazio di Hilbert multi-qubit.

3.5 I GATES QUANTISTICI

I gate quantistici sono operatori matematici utilizzati per manipolare e trasformare lo stato di un sistema quantistico. Sono l'equivalente dei circuiti logici utilizzati nei computer classici, ma sono progettati per lavorare con qubit, che sono le unità fondamentali di informazione quantistica. I gate quantistici consentono di eseguire operazioni fondamentali sui qubit, come rotazioni, inversioni e trasferimenti di informazione quantistica da un qubit all'altro. Queste operazioni sono essenziali per l'implementazione di algoritmi quantistici e per sfruttare la potenza di calcolo dei computer quantistici. I gate quantistici possono essere rappresentati come matrici unitarie che agiscono sullo stato quantistico di un sistema. Lo stato di un sistema quantistico può essere rappresentato da un vettore di ampiezze di probabilità, in cui ogni elemento rappresenta la probabilità di trovare il sistema in uno specifico stato. I gate quantistici agiscono su questi vettori di ampiezze di probabilità per trasformare lo stato del sistema.

I gate di Pauli

I gate di Pauli sono un insieme di operatori matematici utilizzati nella teoria quantistica dell'informazione e nei calcoli quantistici. Prendono il nome dal fisico teorico Wolfgang Pauli, che ha contribuito significativamente allo sviluppo della meccanica quantistica.

Ci sono tre gate di Pauli fondamentali: il gate X, il gate Y e il gate Z. Ognuno di essi agisce su un qubit.

GATE X:

Questo gate è noto anche come "bit-flip gate" perché inverte lo stato di un qubit. Se il qubit è nello stato $|0\rangle$, il gate X lo trasforma nello stato $|1\rangle$ e viceversa. Può essere espresso come una matrice 2x2:

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

GATE Y:

Il gate Y è noto come "bit and phase-flip gate". Agisce su un qubit cambiando il suo stato e introducendo una fase complessa. Il gate Y trasforma lo stato $|0\rangle$ in $i|1\rangle$ e lo stato $|1\rangle$ in $-i|0\rangle$. La sua rappresentazione matriciale è:

$$Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

Gate Z:

Il gate Z, chiamato anche "phase-flip gate", agisce solo sulla fase del qubit senza cambiare il suo stato. Applica una fase di -1 allo stato $|1\rangle$, lasciando lo stato $|0\rangle$ invariato. La sua rappresentazione matriciale è:

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Oltre a questi tre gate di Pauli, esiste anche un quarto gate chiamato gate di identità, rappresentato dalla matrice identità 2x2:

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

Il gate di identità non fa nulla al qubit su cui agisce e viene spesso

utilizzato per allineare le operazioni.

I gate Rx, Ry e Rz

I gate Rx, Ry e Rz sono tre tipi di porte quantistiche utilizzate nelle operazioni di singolo qubit nel campo dei calcolatori quantistici. Sono comunemente chiamate porte di rotazione, poiché introducono una rotazione nello spazio di stato del qubit. Ogni porta è parametrizzata da un angolo di rotazione specifico e l'effetto della porta dipende da questo angolo.

La porta RX (Rotazione attorno all'asse X) esegue una rotazione dello stato del qubit attorno all'asse X nel piano di Bloch. L'angolo di rotazione specifica quanto lontano dallo stato iniziale viene ruotato il qubit attorno a quell'asse.

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

La porta RY (Rotazione attorno all'asse Y) esegue una rotazione dello stato del qubit attorno all'asse Y nel piano di Bloch. Anche qui, l'angolo di rotazione determina la quantità di rotazione applicata

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

Infine, la porta RZ (Rotazione attorno all'asse Z) esegue una rotazione dello stato del qubit attorno all'asse Z nel piano di Bloch. Anche in questo caso, l'angolo di rotazione specifica la quantità di rotazione.

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

dove theta è l'angolo di rotazione.

Per applicare uno di questi gate a uno stato di un qubit, è sufficiente moltiplicare la matrice corrispondente per il vettore di stato del qubit. Ad esempio, per applicare il gate $RX(\theta)$ a uno stato $|\psi\rangle$, si calcola:

$$R_x(\theta)|\psi\rangle$$

Hadamard Gate

L'Hadamard gate è una porta logica quantistica fondamentale utilizzata nel quantum computing. Prende il nome dal matematico francese Jacques Hadamard, che ha introdotto l'operatore nel 1892. L'Hadamard gate è rappresentato dalla matrice:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

L'Hadamard gate agisce su un singolo qubit, applicando una trasformazione che crea una sovrapposizione di stati. In altre parole, converte uno stato di base ($|0\rangle$ o $|1\rangle$) in una sovrapposizione quantistica, in cui il qubit può esistere simultaneamente in entrambi gli stati di base con una certa probabilità. Ad esempio, se applichiamo l'Hadamard gate a un qubit nello stato $|0\rangle$, otteniamo:

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

Questo significa che il qubit è ora in uno stato di sovrapposizione, dove la probabilità di misurare "0" o "1" è la stessa.

Matematicamente, possiamo rappresentare lo stato del qubit come:

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

In modo simile, se applichiamo l'Hadamard gate a un qubit nello stato $|1\rangle$, otteniamo:

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

Lo stato del qubit è ancora in sovrapposizione, ma con una fase negativa nel secondo termine. Possiamo rappresentare lo stato del qubit come:

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

L'Hadamard gate è particolarmente utile perché consente di creare uno stato uniforme di sovrapposizione e di esplorare contemporaneamente gli stati di base. Questo è un passaggio fondamentale per sfruttare il potere dei computer quantistici per l'esecuzione parallela dei calcoli. Inoltre, l'Hadamard gate è una porta logica unitaria e autoreversibile. Applicando l'Hadamard gate due volte a un qubit, si ottiene lo stato di partenza originale. Questa proprietà è importante per la reversibilità delle operazioni quantistiche e per la possibilità di annullare gli effetti delle trasformazioni.

P-GATE

Il gate di fase P è un'operazione fondamentale nel campo della computazione quantistica. È un tipo di porta logica che agisce sulla fase di uno stato quantistico. La sua matrice di fase è definita come:

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{(i\phi)} \end{bmatrix}$$

dove ϕ è un parametro che determina la fase applicata allo stato quantistico. Il gate di fase P è una porta a singolo qubit e agisce solo sulla fase dello stato senza alterarne l'ampiezza. In altre parole, moltiplica lo stato di ingresso per un fattore di fase complesso. Quando ϕ è zero, il gate di fase P non fa nulla. Quando ϕ è diverso da zero, l'effetto del gate di fase P è introdurre una rotazione di fase di ϕ nell'ampiezza dello stato di ingresso.

È importante notare che il gate di fase P è solo uno degli infiniti tipi di porte a fase che possono essere utilizzate nella computazione quantistica. Esistono altre porte a fase più complesse come il gate di fase T e il gate di fase S, che sono estensioni del gate di fase P. Questi gate aggiungono rotazioni di fase di $\frac{\pi}{4}$ e $\frac{\pi}{2}$, rispettivamente, e possono essere utilizzati in combinazione con il gate di fase P per eseguire operazioni più complesse sui qubit.

C-NOT Gate

Il C-NOT (Controlled-NOT) gate è una porta logica quantistica fondamentale utilizzata nel quantum computing. È una porta a due qubit che agisce come un'inversione condizionale sul secondo qubit (target) a seconda dello stato del primo qubit (controllo).

La rappresentazione matriciale del C-NOT gate è la seguente:

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

La porta C-NOT prende in input due qubit, il qubit di controllo (C) e il qubit target (T). Il qubit di controllo viene posto nello stato $|0\rangle$ o $|1\rangle$, mentre il qubit target viene inizializzato in uno stato arbitrario. L'azione del C-NOT gate dipende dallo stato del qubit di controllo:

- Se il qubit di controllo è nello stato $|0\rangle$, il qubit target rimane invariato.

- Se il qubit di controllo è nello stato $|1\rangle$, il qubit target viene invertito, passando da $|0\rangle$ a $|1\rangle$ e viceversa.

In termini di rappresentazione degli stati, il C-NOT gate agisce come segue:

- $|0,0\rangle \rightarrow |0,0\rangle$ (nessuna inversione)
- $|0,1\rangle \rightarrow |0,1\rangle$ (nessuna inversione)
- $|1,0\rangle \rightarrow |1,1\rangle$ (inversione del qubit target)
- $|1,1\rangle \rightarrow |1,0\rangle$ (inversione del qubit target)

Il C-NOT gate è ampiamente utilizzato negli algoritmi quantistici, in particolare nell'implementazione dei circuiti logici quantistici e nella creazione di entanglement. È un componente chiave per costruire porte logiche più complesse e circuiti quantistici. In combinazione con altre porte logiche, il C-NOT gate permette di eseguire operazioni aritmetiche, creare entanglement tra qubit e realizzare trasformazioni complesse.

Toffoli Gate

Il Toffoli gate, anche noto come porta di controllo CCNOT o porta di controllo Toffoli, è una porta logica quantistica a tre qubit. Prende il nome dal fisico Tommaso Toffoli, che ha introdotto questa porta nel 1980. Il Toffoli gate è noto per essere una porta universale nel quantum computing, il che significa che può essere utilizzata per realizzare qualsiasi altra porta quantistica.

La rappresentazione matriciale del Toffoli gate è la seguente:

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

Il Toffoli gate agisce su tre qubit: due qubit di controllo (C_1 e C_2) e un qubit target (T).

L'azione del Toffoli gate dipende dagli stati dei due qubit di controllo:

- Se entrambi i qubit di controllo sono nello stato $|1\rangle$, allora il qubit target viene invertito.

- Altrimenti, il qubit target rimane invariato

In termini di rappresentazione degli stati, il Toffoli gate agisce come segue:

- $|0,0,0\rangle \rightarrow |0,0,0\rangle$ (nessuna inversione)
- $|0,0,1\rangle \rightarrow |0,0,1\rangle$ (nessuna inversione)
- $|0,1,0\rangle \rightarrow |0,1,0\rangle$ (nessuna inversione)
- $|0,1,1\rangle \rightarrow |0,1,1\rangle$ (nessuna inversione)
- $|1,0,0\rangle \rightarrow |1,0,0\rangle$ (nessuna inversione)
- $|1,0,1\rangle \rightarrow |1,0,1\rangle$ (nessuna inversione)
- $|1,1,0\rangle \rightarrow |1,1,1\rangle$ (inversione del qubit target)
- $|1,1,1\rangle \rightarrow |1,1,0\rangle$ (inversione del qubit target)

Il Toffoli gate è noto per la sua capacità di implementare la logica booleana classica, rendendolo uno strumento potente nella costruzione di circuiti quantistici. Può essere utilizzato per realizzare porte logiche come AND, OR, NAND, NOR, XOR e XNOR, aprendo la strada all'elaborazione di informazioni classiche su un computer quantistico.

SIMULAZIONE VARIAZIONALE QUANTISTICA PER I MODI TE

4.1 INTRODUZIONE

La simulazione variazionale quantistica è un approccio innovativo nel campo del quantum computing che mira a risolvere problemi complessi nel campo dei modi trasversali elettrici (TE). Utilizzando le potenzialità dei computer quantistici, la VQE (Sezione 4.2) offre un metodo promettente per simulare e comprendere i sistemi quantistici, consentendo di affrontare sfide che vanno al di là delle capacità dei tradizionali metodi di simulazione. Nella sezione 4.3, esploreremo la formulazione dell'Hamiltoniana nel contesto della simulazione variazionale quantistica per i modi T.E. L'Hamiltoniana rappresenta la descrizione matematica di un sistema quantistico e definisce le energie possibili del sistema e gli operatori che descrivono la sua evoluzione nel tempo. Nella sezione 4.4 si tratterà la decomposizione dell'Hamiltoniana, aspetto importante nella simulazione variazionale, processo che implica la scomposizione dell'Hamiltoniana complessa in termini di operatori quantistici più semplici. La decomposizione facilita la manipolazione e la gestione dei calcoli quantistici durante la simulazione variazionale. Nella sezione 4.5 concerna la trasformazione della Hamiltoniana nella base Pauli-Z, passo cruciale nella simulazione variazionale. La base Pauli-Z è una rappresentazione alternativa dei qubit, in cui gli operatori di Pauli-Z sono utilizzati per rappresentare gli stati quantistici. La trasformazione in questa base semplifica l'implementazione delle operazioni quantistiche richieste nella simulazione variazionale. Nella sezione 4.6, ci concentreremo sulla funzione di costo, un elemento fondamentale nella simulazione variazionale quantistica per i modi TE. La funzione di costo rappresenta una metrica che valuta la bontà della simulazione e consente di ottimizzare il circuito quantistico per approssimare il sistema target in modo accurato. La funzione di costo è costruita sulla base delle misurazioni effettuate sul circuito quantistico e può includere diverse quantità fisiche rilevanti per il sistema in esame, come l'energia, la correlazione tra i qubit o altre grandezze che descrivono le caratteristiche del sistema.

4.2 VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER (VQE)

Il Variational Quantum Eigensolver (VQE) è un algoritmo quantistico variazionale utilizzato per calcolare approssimazioni del ground state

e degli stati eccitati di un sistema quantistico. L'obiettivo principale del VQE è trovare gli autovalori e gli autovettori di un'hamiltoniana quantistica, che rappresenta l'energia e le proprietà del sistema. La hamiltoniana è una rappresentazione matematica dell'energia totale del sistema, che tiene conto dell'interazione tra le sue particelle costituenti. Il VQE utilizza un approccio ibrido, combinando la potenza di calcolo dei computer quantistici per eseguire calcoli su un numero limitato di qubit e algoritmi classici di ottimizzazione per adattare i parametri di un circuito quantistico variazionale. Questo circuito variazionale rappresenta uno stato quantistico approssimato, parametrizzato da una serie di angoli o parametri. Durante l'esecuzione del VQE, i parametri del circuito variazionale vengono iterativamente adattati attraverso algoritmi di ottimizzazione classica per minimizzare l'energia dell'hamiltoniana. In altre parole, il VQE cerca i parametri che forniscono l'energia più bassa, approssimando così il ground state del sistema. Il VQE sfrutta la natura parallela dei computer quantistici per calcolare l'energia della hamiltoniana per diversi set di parametri del circuito variazionale. Questa parallelizzazione permette una più efficiente esplorazione dello spazio dei parametri e una maggiore probabilità di convergere verso il ground state desiderato.

4.3 LA FORMULAZIONE DELL'HAMILTONIANA

Per risolvere le equazioni 1.1 e 1.2 si potrebbero utilizzare metodi numerici per discretizzare le equazioni e convertirle in equazioni matriciali, che potrebbero poi essere risolte su un computer classico. Noi andremo ad usare un approccio diverso, che consente di risolvere il problema su computer quantistici. A differenza del calcolo classico, in cui sono necessari $O(N)$ bit per rappresentare un'equazione di matrice di dimensione N , qui sono richiesti solo $\log_2 N$ qubit. Ricordiamo di aver utilizzato uno schema di griglia uniforme spostata, in cui la griglia utilizzata ha una dimensione di passo di Δx e non coincide con i confini metallici; invece, rispetto ai confini, la griglia è spostata di $\Delta x/2$ come mostrato in figura 4.1.

Nei punti della griglia che non sono sul confine, la derivata di secondo ordine può essere approssimata utilizzando il metodo della differenza finita centrale come:

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

dove f_i è il valore della funzione f nel punto i .

Per i modi TE, la condizione al contorno di Dirichlet è :

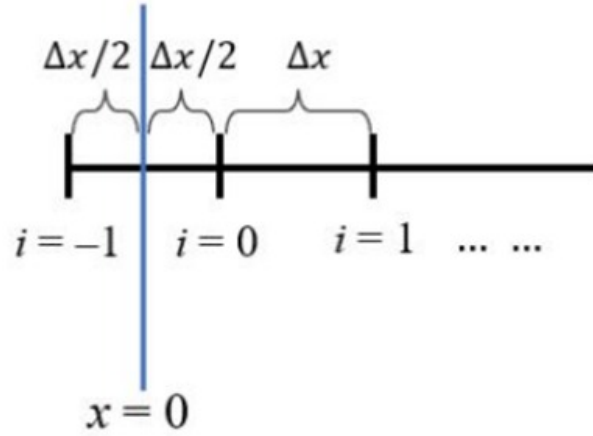


Figure 4.1: Bordo della griglia a differenze finite unidimensionale basata su una griglia uniforme spostata.

$$f_0 = f_{-1}$$

che implica:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=0} \approx \left. \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2} \right|_{i=0} = \frac{f_1 - 3f_0}{\Delta x^2}. \tag{4.2}$$

Le diverse condizioni al contorno producono una matrice 8x8, dato che stiamo lavorando a 3 qubit (2^3):

$$M_{x,N} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

4.4 DECOMPOSIZIONE DELLA HAMILTONIANA

Definiamo come Hamiltoniano la matrice ricavata dalle trattazioni precedenti. Hamiltoniana è un operatore definito nello spazio degli stati di un sistema quantistico. Viene indicato con "H" e agisce su uno stato quantistico per fornire il valore dell'energia associata a tale stato. Successivamente Hamiltoniana viene decomposta in base di Pauli. La

scomposizione di una matrice in una base di operatori di Pauli può essere effettuata utilizzando la cosiddetta "decomposizione di Pauli". Questo è un metodo per esprimere una matrice come combinazione lineare di prodotti tensoriali di operatori di Pauli. La decomposizione di Pauli può essere ottenuta utilizzando gli operatori di Pauli (X, Y, Z) e l'operatore identità (I). Considerando una matrice quadrata $n \times n$, la decomposizione di Pauli prevede di trovare i coefficienti che moltiplicano ciascun prodotto tensoriale di operatori di Pauli in modo tale che la combinazione lineare di questi prodotti tensoriali restituisca la matrice originale.

4.5 TRASFORMAZIONE IN BASE PAULI-Z

La Hamiltoniana da noi ottenuta, viene successivamente rappresentata in base di Pauli con ognuno il proprio coefficiente. Una volta ottenute dobbiamo fare in modo che le nostre basi siano orientate in un certo modo, in particolare dobbiamo convertire le nostre basi orientandole in Z in quanto utilizzata per la rappresentazione dei qubit nei computer quantistici. Di seguito sono riportate l'immagini di ogni conversione per ogni base. Non viene riportata la rotazione di III e ZZZ in quanto per definizione, sono orientate in modo corretto (vedere Figura 4.2).

4.6 LA FUNZIONE DI COSTO

Consideriamo la funzione costo:

$$F_k(\theta) = \langle \psi(\theta) | M | \psi(\theta) \rangle + \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i |\langle \psi(\theta) | \psi(\theta^{(i)}) \rangle|^2 \quad (4.3)$$

Dove $|\psi(\theta) \in A$ è un ansatz scelto da una famiglia A di ansatz parametrizzati da θ . β_i è una costante scelta che soddisfi $\beta_i > E_k - E_i$ per $i \in [0, \dots, k-1]$. Il primo addendo è l'energia dello stato fondamentale (groundstate) E_0 di M. Nel dettaglio, consideriamo un sistema quantistico descritto da un'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 la Hamiltoniana H come una combinazione lineare di operatori di Pauli:

$$H = \sum c_i P_i$$

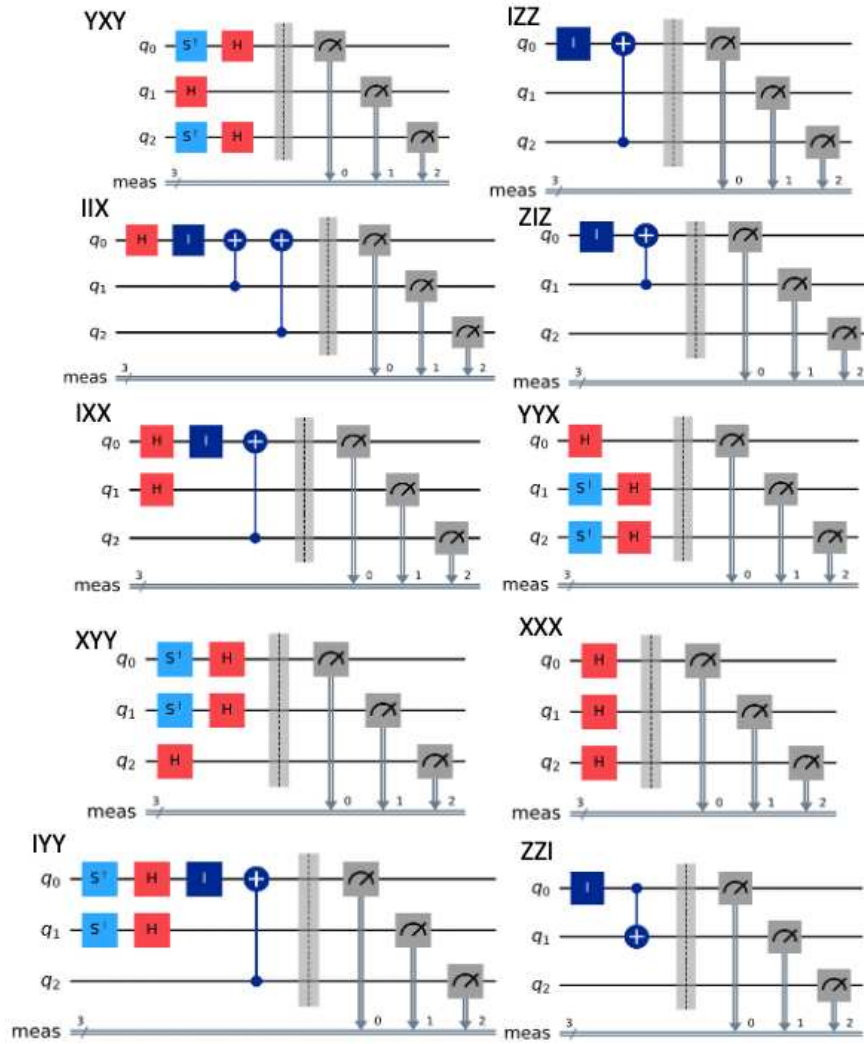


Figure 4.2: Rotazioni qubits per ogni base di Pauli

dove ci sono i coefficienti associati a ciascun operatore di Pauli P_i . Ogni operatore di Pauli può essere espresso come il prodotto di tensori di Pauli x , y e z . Quindi, l'energia del ground state approssimato può essere calcolata come:

$$H = 1.75III - 1.0IIX - 0.5IXX - 0.5IYY - 0.25IZZ - 0.25XXX + 0.25XYY - 0.25YXY - 0.25YYX - 0.25ZIZ - 0.25ZZI$$

Oltre al calcolo della modalità di propagazione più bassa della guida d'onda a microonde, l'approccio variazionale è utilizzato anche per calcolare gli autovalori di ordine superiore al fine di determinare le frequenze di taglio e garantire un funzionamento in un ambiente a singola modalità. Per calcolare l'energia dello stato eccitato di ordine k , E_k , della matrice M , dobbiamo fare riferimento al secondo addendo. Il processo di minimizzazione della funzione di costo viene eseguito in modo iterativo, iniziando con $k = 0$ e aumentando k di uno ad ogni iterazione, fino a quando non vengono ottenuti tutti gli autovalori desiderati di ordine superiore.

IMPLEMENTAZIONE DEL VQE SU UN SIMULATORE QUANTISTICO

5.1 INTRODUZIONE

L'implementazione del Variational Quantum Eigensolver (VQE) su un simulatore quantistico comporta diversi passaggi. Il VQE è un algoritmo utilizzato per stimare l'energia di uno stato quantistico, noto come stato fondamentale, associato a un determinato sistema fisico. Di seguito sono riportati i principali passaggi per implementare il VQE su un simulatore quantistico:

- **Definizione del problema:** specificare il sistema fisico di interesse e il suo Hamiltoniano. L'Hamiltoniano rappresenta l'energia totale del sistema e può essere espresso come una combinazione di operatori che agiscono sui qubit.
- **Codifica del problema:** convertire l'Hamiltoniano del sistema in una rappresentazione quantistica utilizzando una tecnica chiamata "quantum encoding". Questo coinvolge la mappatura degli operatori dell'Hamiltoniano ai gate quantistici. Ad esempio, gli operatori Pauli possono essere mappati ai relativi gate di Pauli.
- **Costruzione del circuito variazionale:** creare un circuito quantistico che dipende da uno o più parametri variabili. Questo circuito viene chiamato "circuito variazionale" perché la variazione dei parametri influisce sullo stato quantistico risultante. Il circuito variazionale può essere composto da una combinazione di gate quantistici, inclusi i gate di Pauli, e può essere ripetuto più volte per aumentare la complessità del circuito.
- **Preparazione dello stato iniziale:** nel simulatore quantistico lo stato iniziale può essere scelto in base a considerazioni specifiche del problema, ad esempio come approssimazione dello stato fondamentale o come stato completamente casuale.
- **Esecuzione del circuito variazionale sul simulatore quantistico :** l'utilizzo di parametri variabili comporta l'applicazione dei gate quantistici definiti nel circuito e la manipolazione degli stati quantistici in base alle operazioni specificate.
- **Misurazione dell'energia del sistema quantistico risultante dall'esecuzione del circuito variazionale:** questa misurazione può essere ottenuta misurando specifici osservabili o operatori associati all'Hamiltoniano

del sistema. La misurazione può essere ripetuta più volte per ottenere una stima statistica dell'energia.

- Aggiornamento dei parametri: utilizzare un algoritmo di ottimizzazione classico per aggiornare i parametri del circuito variazionale. L'obiettivo è trovare la configurazione dei parametri che minimizza l'energia stimata attraverso tecniche di ottimizzazione.

5.2 AMBIENTE DI SVILUPPO

L'ambiente di lavoro è Jupyter, che abbiamo utilizzato per condurre le nostre attività di sviluppo. Jupyter è un ambiente interattivo molto popolare nel campo della scienza dei dati, dell'apprendimento automatico e dell'informatica scientifica. Jupyter offre un'interfaccia basata sul web che permette di creare e condividere documenti chiamati "notebook". Questi notebook consentono di integrare testo, codice, grafici e altri elementi multimediali in un'unica piattaforma, rendendo più agevole l'esplorazione e la comunicazione delle idee. Ciò che rende Jupyter particolarmente potente è la sua capacità di eseguire codice interattivamente, passo dopo passo. In particolare, abbiamo utilizzato i notebook Jupyter per lavorare con algoritmi e simulazioni quantistiche. All'interno dei notebook Jupyter, ho potuto scrivere, eseguire e visualizzare codice Python, insieme a una vasta gamma di librerie e strumenti che supportano l'elaborazione dati e il calcolo scientifico. Questo mi ha consentito di implementare e sperimentare con facilità soluzioni per problemi complessi nel campo del quantum computing. Un altro grande vantaggio di Jupyter è la sua natura collaborativa. Ho potuto condividere facilmente i notebook con i collaboratori, consentendo loro di esplorare e riprodurre i risultati. Le simulazioni quantistiche sono state effettuate su una macchina Apple precisamente su un Mac che monta 8 GB di RAM e un processore M1.

5.3 IMPLEMENTAZIONE DEL VQE

Librerie

Le librerie a cui ho fatto riferimento durante le simulazioni quantistiche sono state: Qiskit, NumPy, Matplotlib e Scipy. Qiskit è stata utilizzata per programmare, eseguire e eseguire calcoli simulati su computer quantistici. Grazie a Qiskit e alle sue funzionalità, ho potuto creare, manipolare e misurare circuiti quantistici. NumPy invece è una libreria fondamentale per la programmazione scientifica in Python. Mi ha fornito supporto perché offre una vasta gamma di funzioni matematiche per l'elaborazione dei dati. Matplotlib è una libreria di visualizzazione dati che offre una'ampia gamma di funzionalità

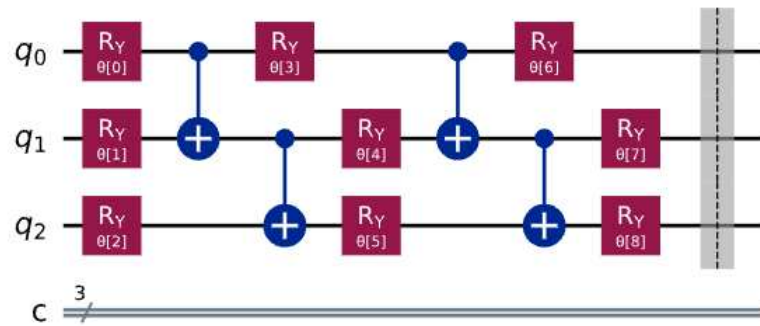


Figure 5.1: Ansatz

per la creazione di grafici, istogrammi e altri tipi di plot. Matplotlib consente di personalizzare i grafici in maniera dettagliata, in modo da creare visualizzazioni di dati ad alta qualità. Infine, Scipy è una libreria che fornisce un'ampia gamma di algoritmi e strumenti per la computazione scientifica. In particolare, ho utilizzato l'area di ottimizzazione che offre numerosi algoritmi di ottimizzazione, sia per la minimizzazione che per la massimizzazione di funzioni. Utilizzando queste librerie insieme, è possibile sviluppare programmi che coinvolgono la computazione quantistica con Qiskit, il calcolo numerico con NumPy e la visualizzazione dei dati con Matplotlib. Queste librerie offrono un'ampia gamma di strumenti e funzionalità che consentono agli sviluppatori di esplorare, analizzare e visualizzare dati complessi in modo efficace.

Ansatz

Prima di tutto, è necessario definire un ansatz di circuito quantistico (Figura 5.1) che rappresenti la soluzione del problema delle guide d'onda. Viene in aiuto il metodo "EfficientSU2" di Qiskit che permette di creare un circuito quantistico efficiente per il VQE. Abbiamo utilizzato solo le rotazioni su Y per costruire il circuito con entanglement lineare in cui ogni qubit è connesso solo al qubit successivo, creando una catena di qubit che si estende lungo il circuito. Oltre al tipo di gate e il tipo di entanglement da utilizzare, l'EfficientSU2 ha come parametri il numero di qubit (in questo caso 3) e il numero di volte che vengono ripetute la sequenza di rotazioni.

Backend

Per l'esecuzione del VQE dobbiamo utilizzare un simulatore quantistico. In queste simulazioni abbiamo utilizzato il simulatore 'qasm_simulator' fornito da Qiskit Aer. Successivamente viene creato un oggetto che rappresenta un'istanza di esecuzione quantistica. Questo oggetto viene utilizzato per eseguire i circuiti quantistici su un determinato backend. I parametri passati al costruttore precedentemente creato sono il backend e il numero di ripetizioni delle misure statistiche, indicato da shots.

VQE

VQE è un algoritmo di ottimizzazione (Figura 5.2) che sfrutta un computer quantistico per eseguire calcoli quantistici e approssimare le soluzioni di problemi complessi. Viene implementata una funzione che prende tre argomenti: k (un numero intero) che indica a quale stato vogliamo convergere, `initialpoint` (un vettore di numeri), ovvero uno stato iniziale random e `method` (una stringa che rappresenta il metodo di ottimizzazione da utilizzare). 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 su un computer quantistico. 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 si introduce 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. Per ogni circuito di misura, vengono eseguiti calcoli quantistici utilizzando il simulatore quantistico. I risultati delle misure vengono conteggiati e poi normalizzati per ottenere le probabilità di osservare determinati output. Successivamente, vengono calcolati i valori di aspettazione `expectvalue` 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'] - probs['001']"` rappresenta 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 `"probs['000']"` ha un segno positivo perché

lo 0 è associato al valore +1, mentre il termine "probs['001']" ha un segno negativo perché l' 1 è associato al valore -1. L'energia totale viene calcolata utilizzando i coefficienti dell'operatore 'H' e i valori di aspettazione ottenuti. Viene anche calcolato un termine di correlazione cfr che tiene conto delle correlazioni tra i coefficienti di base dell'operatore 'H' e il vettore degli autovettori. Infine, l'energia totale viene aggiunta alla lista convergence per monitorare la convergenza dell'algoritmo e viene restituita come risultato della funzione. Successivamente, viene eseguito un loop da 0 a k+1. All'interno del loop, viene chiamata la funzione di ottimizzazione minimize per minimizzare la funzione di costo. Viene utilizzato il punto iniziale initialpoint e il metodo di ottimizzazione specificato da method. Quello usato è il metodo Powell, un algoritmo di ottimizzazione senza vincoli utilizzato per trovare il minimo di una funzione di più variabili. È particolarmente adatto per problemi di ottimizzazione non lineari in cui non sono disponibili i gradienti o le derivate della funzione obiettivo. L'algoritmo di Powell è un metodo iterativo che cerca di individuare la direzione di massima discesa nella funzione obiettivo esplorando diverse direzioni nello spazio delle variabili. L'idea di base è quella di utilizzare una sequenza di vettori di direzione per individuare una direzione di discesa più efficiente rispetto alla discesa lungo il gradiente. Vengono inizializzati il punto di partenza e una matrice identità che rappresenta la base iniziale per le direzioni di discesa. L'algoritmo esegue una serie di iterazioni. 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. Questo viene fatto in modo che la prossima direzione di discesa sia ortogonale alle direzioni precedenti. L'algoritmo termina quando viene raggiunto un criterio di convergenza predefinito, ad esempio quando il cambio tra due iterazioni consecutive è inferiore a una soglia specificata. L'algoritmo di Powell può essere efficace per problemi di ottimizzazione non lineari senza vincoli, soprattutto quando le funzioni obiettivo sono complesse e non è disponibile l'informazione sui gradienti. Tuttavia, l'algoritmo potrebbe richiedere un numero elevato di iterazioni per raggiungere la convergenza e potrebbe essere sensibile alla scelta del punto di partenza. Il risultato della minimizzazione viene memorizzato nell'oggetto out. L'energia minima ottenuta dalla minimizzazione viene assegnata all'array eigenvalues[i], il vettore degli autovettori corrispondenti viene assegnato a eigenkets[:,i], e i punti di ottimizzazione vengono assegnati a parameters[:,i]. Infine, la funzione 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.

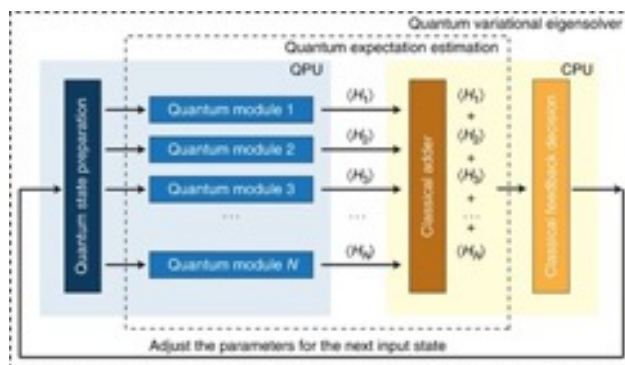


Figure 5.2: Schema VQE

RISULTATI FINALI

I grafici riportati mostrano i risultati raggiunti dopo aver eseguito l'algoritmo VQE. Andremo ad analizzare tutti i risultati per quanto riguarda il primo stato eccitato e il ground state. Le tempistiche per raggiungere i risultati sono state di 2 minuti per il ground state e 5 minuti per il primo stato eccitato.

Convergenza

Il grafico implementato attraverso il comando plot mostra la convergenza del valore della funzione di costo minimizzata. Possiamo notare che dopo circa 2200 iterazioni il valore della funzione di costo si assesta a 0.15 per il valore del primo stato eccitato rispetto ad un valore esatto di 0.15224.

Eigenkets

I plot 6.2 e 6.3 mostrano l'andamento dello stato parametrico ψ utilizzato per approssimare gli stati del sistema.

Bar Plot

Una volta ottenuto il set di parametri ottimizzati per l'ansatz, è possibile esaminare la distribuzione di probabilità 1D (Figure 6.4 e 6.4)

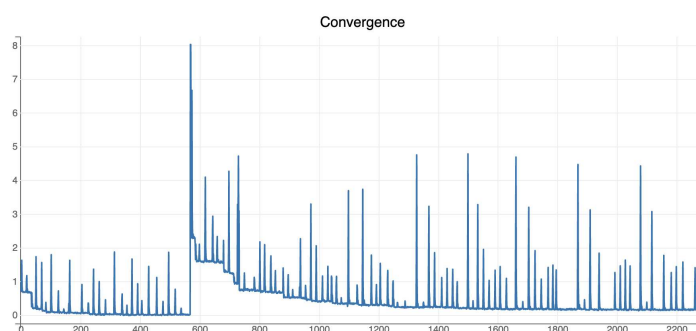


Figure 6.1: Grafico della convergenza rappresentato sul numero di iterazioni e sul valore di convergenza

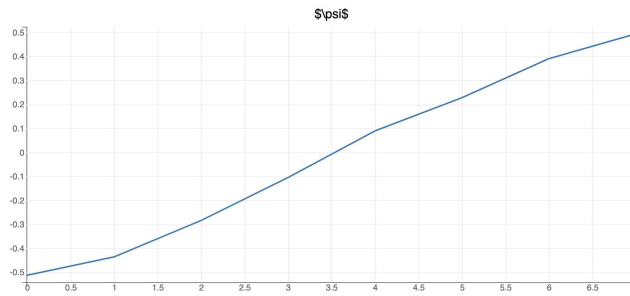


Figure 6.2: Rappresentazione della funzione d'onda per il primo stato eccitato al variare della posizione spaziale lungo la direzione della guida d'onda.

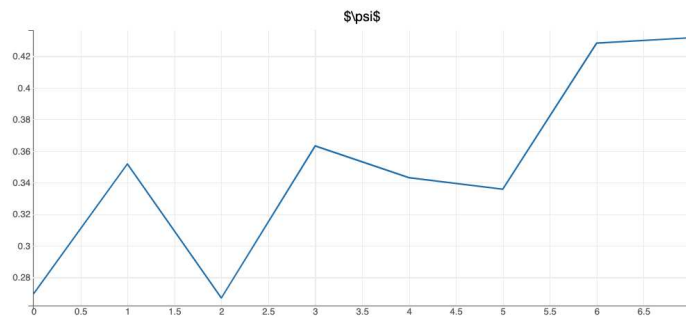


Figure 6.3: Rappresentazione della funzione d'onda per il ground state al variare della posizione spaziale lungo la direzione della guida d'onda.

e 2D (Figure 6.6 e 6.7) associata al sistema. Questa distribuzione descrive la probabilità di trovare il sistema in differenti stati quantistici, che nel contesto delle guide d'onda può essere interpretato come la distribuzione di probabilità per la propagazione ottimale del segnale.

Scalar Bar

Il plot dei modi TE (Figura 6.8) è una visualizzazione comune utilizzata nel contesto delle guide d'onda per rappresentare i modi di propagazione trasversali elettromagnetici (TE) supportati dalla guida d'onda. I modi TE rappresentano le configurazioni di campo elettromagnetico all'interno della guida d'onda in cui il campo elettrico è orientato solo lungo le direzioni trasversali rispetto alla direzione di propagazione. Questi modi sono caratterizzati dai valori discreti di frequenza (o lunghezza d'onda) e presentano profili di campo distinti.

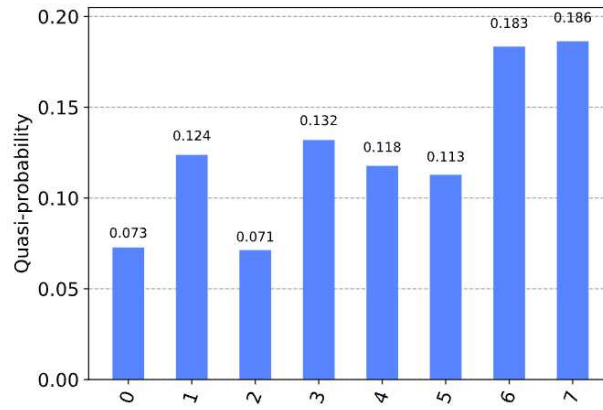


Figure 6.4: Distribuzione di probabilità 1D Ground State

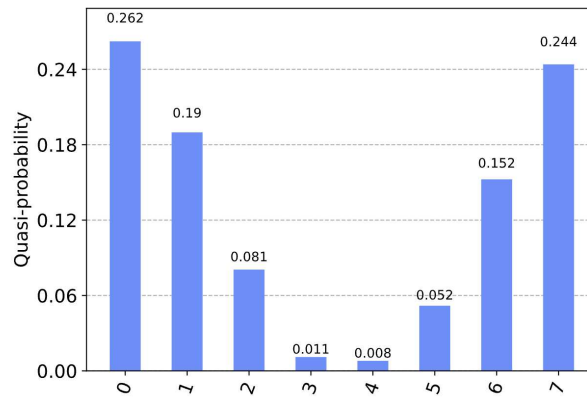


Figure 6.5: Distribuzione di probabilità 1D Primo Stato Eccitato

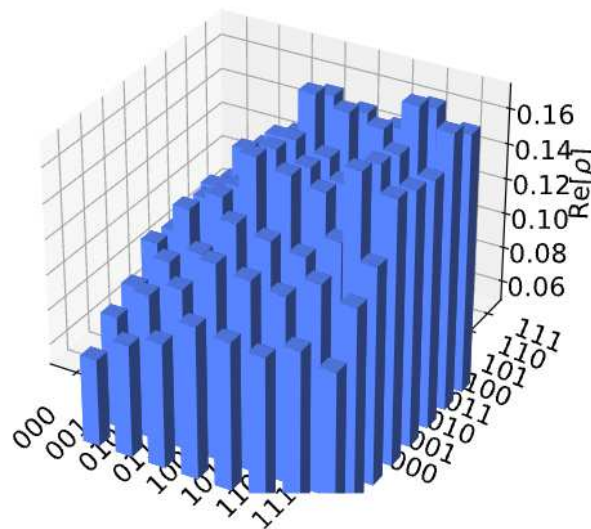


Figure 6.6: Distribuzione di probabilità 2D Ground State

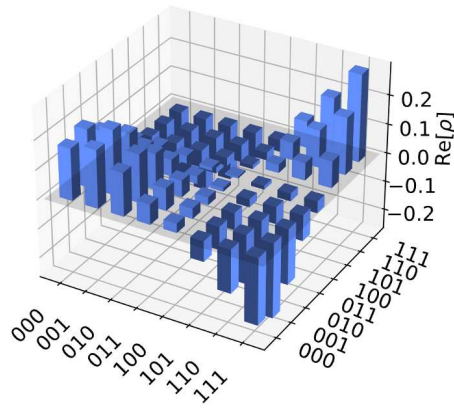
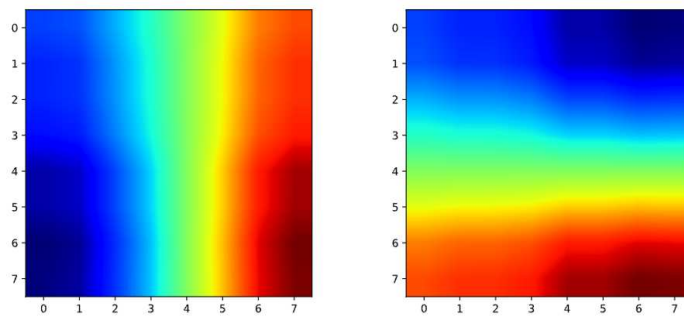


Figure 6.7: Distribuzione di probabilità 2D Primo Stato Eccitato

Figure 6.8: Plot a colori bidimensionale della H_z dei modi TE della guida d'onda ottenuti tramite simulazione: TE_{10} e TE_{01} .

Un plot dei modi TE può fornire una panoramica visiva immediata dei modi di propagazione supportati dalla guida d'onda e delle loro caratteristiche distintive. Può aiutare a identificare i modi con le frequenze più basse o le strutture di campo più complesse, nonché a comprendere come varia il campo elettromagnetico in diversi punti all'interno della guida d'onda. Questo tipo di visualizzazione è spesso utilizzato nella progettazione delle guide d'onda per selezionare modi specifici che soddisfano determinati requisiti di propagazione, come un basso tasso di attenuazione o un'alta efficienza di accoppiamento con altri componenti ottici. Inoltre, il plot dei modi TE può essere utilizzato per analizzare l'interazione tra più modi TE e ottimizzare la propagazione ottica nella guida d'onda.

DISCUSSIONI E CONCLUSIONI FINALI

Nella presente tesi, abbiamo esaminato l'applicazione del quantum computing all'ambito delle guide d'onda con onde TE, concentrandoci sull'utilizzo dell'algoritmo VQE (Variational Quantum Eigensolver) per risolvere il problema associato. L'obiettivo principale era sviluppare una metodologia che potesse sfruttare le potenzialità del quantum computing per ottenere soluzioni accurate e efficienti anche dal punto di vista energetico per i modi di propagazione di queste onde. Attraverso la simulazione di un computer quantistico, abbiamo formulato l'equazione agli autovalori che descrive il problema dei modi di propagazione delle onde TE in guide d'onda e l'abbiamo tradotto in una serie di operazioni quantistiche. Abbiamo utilizzato uno stato ansatz parametrico come approssimazione per lo stato fondamentale del sistema e abbiamo ottimizzato i parametri di questo stato ansatz al fine di minimizzare l'energia totale del sistema. Le nostre simulazioni numeriche e le analisi dei risultati ottenuti hanno dimostrato che l'approccio del quantum computing basato sull'algoritmo VQE, anche se implementato tramite simulazioni, può offrire significativi miglioramenti in termini di precisione e efficienza rispetto ai metodi classici tradizionali per risolvere il problema delle guide d'onda con onde TE. Siamo riusciti ad ottenere soluzioni più accurate aumentando solo leggermente il numero di qubit utilizzati, dimostrando così il potenziale di questa metodologia anche in una simulazione di un computer quantistico. Tuttavia, è importante sottolineare che le simulazioni sono basate su un modello ideale di computer quantistico, che non tiene conto dei rumori e degli errori tipici delle macchine reali. Pertanto, l'effetto del rumore sulle prestazioni dell'algoritmo VQE e le tecniche di mitigazione degli errori rappresentano ancora questioni aperte che richiedono ulteriori ricerche e indagini. In conclusione, i nostri risultati indicano che l'approccio del quantum computing basato sull'algoritmo VQE, anche se implementato tramite simulazioni, può essere promettente per risolvere il problema delle guide d'onda con onde TE, offrendo soluzioni più accurate ed efficienti. Questo apre la strada a future ricerche per affrontare sfide come il rumore e la scalabilità, al fine di realizzare applicazioni pratiche che sfruttino appieno il potenziale del quantum computing nel campo delle guide d'onda e degli studi correlati.

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.