



Uma Ontologia para Computação Quântica

José Carlos Puiati Pires, Juliana Kaizer Vizzotto

¹ Programa de Pós Graduação em Informática
Universidade Federal de Santa Maria (UFSM)
RS – Brazil

{jpires, juvizzotto}@inf.ufsm.br

Abstract. *Quantum computing is currently presented as a new computational paradigm in relation to traditional computing proposal. In quantum computing the information representation and evolution of a computing system are different. Although there are several studies on it, a knowledge model describing quantum computation has not yet been proposed. In order to do this, the following work presents an ontology in OWL, this one is modeled to include the main characteristics of the quantum computation, providing a version of knowledge for that specific domain.*

Resumo. *A computação quântica se apresenta atualmente como um novo paradigma computacional em relação à proposta de computação tradicional. Na computação quântica a representação de informação e evolução de um sistema computacional são diferentes. Apesar de haver vários estudos sobre ela, ainda não foi proposto um modelo de conhecimento que descreva a computação quântica. Em busca disso, o seguinte trabalho apresenta uma ontologia em OWL, esta é modelada para incluir as principais características da computação quântica, fornecendo uma versão de conhecimento para esse domínio específico.*

1. Introdução

Atualmente, a computação quântica é uma área amplamente estudada devido ao poder de execução frente aos computadores tradicionais. Considerando um ponto de vista puramente algorítmico, a computação quântica apresenta um novo modelo de computação, o qual incorpora novas maneiras de projetar e estruturar algoritmos. Conceitos-chaves para esse modelo são o *emaranhamento quântico*, o *princípio da superposição* e o *princípio da não-clonagem*. Entretanto, uma das maiores dificuldades da computação quântica é a interpretação da informação quântica em um pensamento clássico computacional. Embora exista um amplo estudo das características e aplicações da computação quântica, ainda não foi proposto um modelo ou sistema quântico que a definisse ou estruturasse seus conceitos e suas relações.

A Web Semântica surge como um novo conceito na organização de dados, tendo como objetivo a busca de um padrão para informação garantindo seu sentido semântico. Além da padronização dos dados é necessário um vocabulário de dados para cada domínio da aplicação. Essas definições são atingidas a partir do conceito de ontologia, um modelo a fim de representar, compartilhar, definir e reutilizar conhecimento [Borst 1997, Gruber 2009].

Dessa forma, o objetivo desse trabalho é definir uma ontologia em OWL (*Ontology Web Language*) que represente o domínio específico da computação quântica, suas

principais características e ligações entre os conceitos, a fim de representar o conhecimento acerca desse contexto. Dessa forma, será possível fornecer uma visão mais clara e de mais fácil compreensão desse modelo para demais pesquisadores que venham a utilizar desse domínio.

Este artigo está estruturado da seguinte forma: na seção 2 são abordados os principais conceitos de ontologias e a linguagem OWL; na seção 3 são levantadas características da computação quântica importantes para o desenvolvimento do trabalho; na seção 4 são abordados trabalhos relacionados ao tema proposto; o desenvolvimento da ontologia para computação quântica é realizado na seção 5 e a conclusão do trabalho na seção 7.

2. Ontologias

A palavra "ontologia" é de origem grega, tendo sido estabelecida por Aristóteles, dentro da área de Filosofia, com o intuito de significar "aquilo que descreve tudo que pode existir ou ser". Ainda relacionando à filosofia, uma definição mais recente para esse conceito descreve como o estudo das coisas que existem, da descrição de tipos e estruturas de objetos, suas propriedades, eventos, processos e relacionamentos em cada área do mundo real [Smith 2003].

O termo e os conceitos de ontologias foram convertidos para uma interpretação computacional. Uma ontologia é uma especificação de uma conceitualização, ou seja, é uma descrição de conceitos e relacionamentos que existem entre estes conceitos [Gruber 2009]. Esta definição genérica, bastante diferente do sentido filosófico de ontologia, considera as ontologias apenas como um conjunto de conceitos e definições.

Outra definição de ontologia pode ser definida como uma especificação formal e explícita de uma conceito compartilhado, o formalismo representa a legibilidade para interpretação por computadores e a explicitude são os conceitos, propriedades, relações, funções, restrições e axiomas explicitamente definidos, conceitualização representa um modelo abstrato de algum fenômeno do mundo real e compartilhada significa conhecimento consensual [Borst 1997].

Embora ambas definições abordem diferentes visões sobre ontologias, as duas afirmam que o principal objetivo é utilizar ontologias para representar, compartilhar, definir e reutilizar conhecimento [Borst 1997, Gruber 2009].

Ontologias podem ser utilizadas em várias áreas da computação, com diversos propósitos, tais como: recuperação de informação na internet [Borgo et al. 1997], processamento de linguagem natural [Germann 1998], gestão de conhecimento [Gandon 2001], web semântica [Berners-Lee et al. 2001], educação [Halpern and Moses 1990, Shum et al. 2000], entre outras.

As ontologias podem ser definidas quanto seu grau de formalismo, aplicação ou estrutura. Já quanto à função das ontologias elas podem ser divididas em: ontologias genéricas, ontologias de domínio, ontologias de tarefas, ontologias de aplicação e ontologias de representação [Guarino 1997].

Para representar uma ontologia pode-se utilizar a OWL, uma linguagem para definição de ontologias, a OWL pode ser utilizada para: formalizar um domínio, definindo classes e propriedades destas classes, definir indivíduos e afirmações sobre eles e, usando-se a semântica formal OWL, especificar como derivar consequências lógicas,

isto é, fatos que não estão presentes na ontologia, mas são vinculados pela semântica [Antoniou et al. 2003].

3. Computação Quântica

A unidade básica de informação clássica computável é o bit, um sistema físico clássico binário. Em computação quântica, a unidade básica de informação é representada pelo bit quântico ou qubit, um sistema físico quântico binário. O qubit é comumente representado como uma superposição de estados, pela da notação *braket* $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$.

A notação de Dirac tem a vantagem de apresentar as bases dos vetores explicitamente. As bases de estado $|0\rangle$ e $|1\rangle$ podem ser definidas como um sistema de dois níveis com uma base ortonormal dentro do espaço vetorial, ao qual o qubit pertence. Os coeficientes, chamados de amplitudes de probabilidade, α e β , são números complexos, em que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Bits clássicos podem ser representados através de bases de estado, por exemplo, o bit 0 pode ser representado pelas bases $|0\rangle = 1|0\rangle + 0|1\rangle$ e o bit 1 através das bases $|1\rangle = 0|0\rangle + 1|1\rangle$. Para estados com diferentes valores para α e β , é entendido que o qubit está em *superposição quântica* de $|0\rangle$ e $|1\rangle$, com amplitudes de probabilidade associada a cada base.

Através da superposição de estados o qubit pode assumir 0 e 1 ao mesmo tempo. Essa característica proporciona poderes exponenciais a algoritmos quânticos, possibilitando o desenvolvimento de algoritmos que possam verificar várias alternativas em paralelo.

Formalmente, a combinação de dois ou mais estados quânticos pode ser obtida usando uma operação de produto tensorial (\otimes). Em analogia à computação clássica, considerando um estado com dois bits, temos quatro alternativas de representação: 00, 01, 10, 11. Assim, o estado de dois qubits é uma combinação linear desses dois estados, cada qual com uma amplitude de probabilidade associada: $\alpha|00\rangle + \gamma|01\rangle + \delta|10\rangle + \beta|11\rangle$.

O processamento de informação na computação quântica é realizado por operadores quânticos, utilizando-os é possível evoluir um sistema quântico. Um sistema quântico isolado no estado $|\phi\rangle_1$ evolui para $|\phi\rangle_2$ através da aplicação de uma operação unitária \mathbb{U} : $|\phi\rangle_2 = \mathbb{U}|\phi\rangle_1$.

Uma característica importante na estrutura de operadores quânticos é sua capacidade de ser reversível. Esta propriedade permite saber o estado inicial de um qubit, tendo o qubit resultante e as operações que foram aplicadas ao dado quântico representado como $|\phi\rangle_1 = \mathbb{U}^\dagger|\phi\rangle_2$.

Para operações em um qubit podemos mencionar as matrizes \mathbb{I} (Identidade) representa a identidade do qubit, a saída retorna a mesma entrada e X (Pauli-X) é a representação análoga quântica a porta *NOT* clássica. Outro operador bastante importante é o de Hadamard (H), que fornece ao qubit uma equivalência de suas amplitudes de probabilidade estabelecendo uma superposição igualmente distribuída.

Para serem realizadas operações mais complexas sobre qubits é necessário estender a aplicação para que englobe operações em mais de um qubit no circuito. Um exemplo

é a porta NOT-Controlada (C-NOT), que basicamente aplica a operação NOT no segundo qubit a partir da entrada. Da mesma forma do operador C-NOT, que aplica sua função a dois qubits, temos operações aplicadas a vários qubits, como o operador de Tofolli que é aplicado a 3 qubits.

Outra operação quântica, diferente das anteriores é o processo medição é obtida com um colapso na função de onda de um sistema quântico em superposição de estados, assim é possível obter uma espécie de "informação clássica" do estado do qubit, que se refere a probabilidade de um qubit representar determinado estado. Dessa forma ao aplicar a medição do valor 0 em um sistema quântico da forma $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ o estado final dessa representação é $|0\rangle$ com $|\alpha|^2$ de probabilidade associada.

Os estados quânticos podem ser representados através de vetores, tal que esses valores estão em espaços vetoriais. Por sua vez, a união desses vetores podem ser representados através de matrizes de densidade [Neumann 1927]. A partir das matrizes de densidade, podemos definir e representar tanto estados puros (estados anteriores ao processo de medição) e estados mistos (estados após a medição).

4. Trabalhos Relacionados

Existem poucos trabalhos que se relacionam entres as área de computação quântica e ontologias, a maioria destes aborda princípios da mecânica quântica como eixo principal.

Um trabalho que tem como propósito a representação de conhecimento em mecânica quântica pode ser visto através da ontologia *quONTOm* [Skulimowski 2010], com versões disponíveis em OWL1 e OWL2, possui uma representação ainda incompleta (segundo os autores), mesmo assim, define vários conceitos do domínio.

Além dos conceitos da computação quântica, a ontologia define alguns outros que não fazem necessariamente parte dela, como objetos puramente matemáticos. Os autores ainda planejam separar concepções matemáticas e físicas da parte da computação quântica, utilizando essas partes como ontologias auxiliares.

Neste, são abordadas formas interessantes de representação de informação quântica, tal como a amplitude de probabilidade de um qubit, na computação quântica ela é representada através de um número complexo. Porém não é possível representar a amplitude de probabilidade em OWL devido a linguagem não possuir este tipo de dado. A proposta foi definir uma classe *ComplexNumber* e atribuir duas propriedades à esse domínio, *imaginaryValue* e *realValue*.

Embora o trabalho aborde amplamente o domínio da mecânica quântica, alguns conceitos podem ser omitidos na computação quântica e outros inseridos. Um dos motivos é de que se trabalha em um nível mais alto de abstração em relação à conceitos matemáticos e algumas características mais internalizadas na física.

5. Ontologia para Computação Quântica

A construção da ontologia para aplicação na computação quântica ocorreu em duas etapas, (1) levantamento dos conceitos que deveriam ser representados e seus relacionamentos, (2) criação de uma ontologia a partir do domínio levantado na etapa anterior.

5.1. Levantamento dos Conceitos

O levantamento e análise dos conceitos foi realizada com base na teoria da computação quântica pelos conceitos relacionados (e possivelmente utilizados neste trabalho) à ontologia e à computação quântica. Também foi realizada uma análise da ontologia para representação da mecânica quântica, descrita na seção 4, a fim de estabelecer os principais conceitos e formas de representação das estruturas de dados da computação quântica.

A partir do levantamento e análise dos assuntos para criação da ontologia, foram definidas duas classes principais e a partir delas o restante da ontologia, são elas:

- (1) *DensityMatrix* ou matriz de densidade, ela pode tanto representar um estado puro (*PureState*) quanto um estado misto (*MixState*). O estado puro é equivalente a representação de um qubit (*Qubit*), em que a posição do qubit é não determinística, este qubit tem bases (*Base*) que possuem amplitudes de probabilidade (*ProbabilityAmplitude*) que são definidas através de números complexos (*ComplexNumber*). O estado misto é um estado puro que já sofreu colapso na função de onda, ou seja, já foi aplicada a medição sobre ele.
- (2) *SuperOperators* ou superoperadores, que representam as aplicações de operações sobre os dados quânticos, eles podem ser de dois tipos, a aplicação de uma medida (*Measure*) ou de um operador linear (*LinearOperator*).

5.2. Criação da Ontologia

A partir da definição da estrutura, foi construída uma ontologia em OWL utilizando o software Protégé, na versão 5.0. A estrutura de classes da ontologia, pode ser visualizada através da Figura 1 .

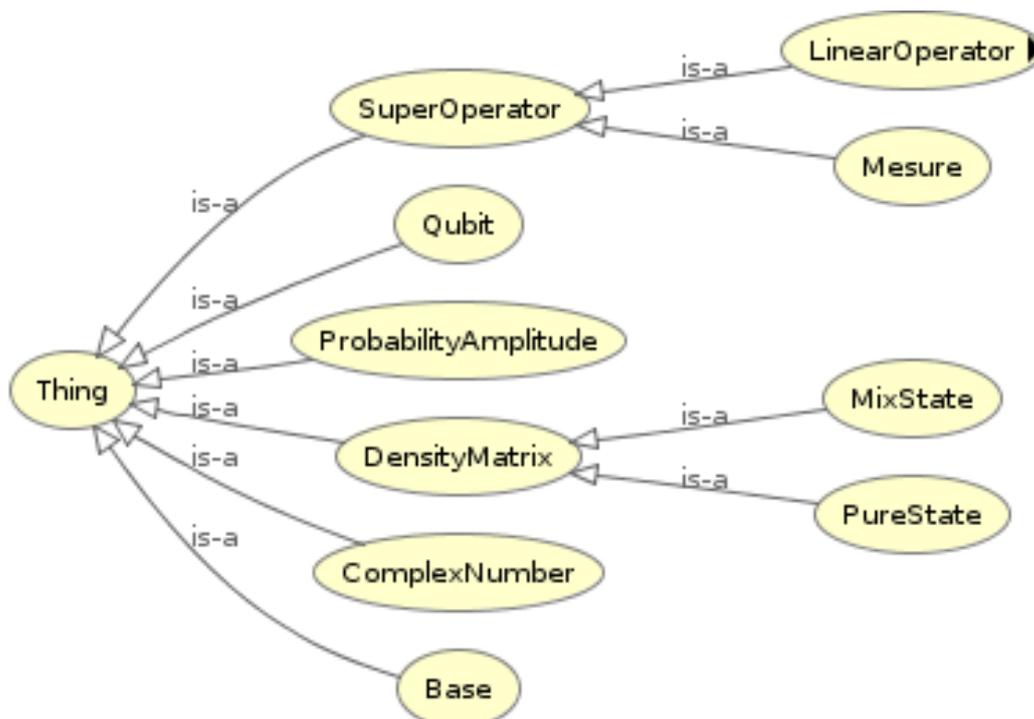


Figura 1. Hierarquia de Classes da Ontologia

Após isso foram definidas algumas propriedades do objeto, que estabelecem o relacionamento entre as classes (foram definidas também as propriedades inversas), entre elas podem ser destacadas: (1) *equivalentTo*, que estabelece uma relação de equivalência entre o *Qubit* e o estado puro (*PureState*); (2) *hasComplexNumber*, definindo que a amplitude de probabilidade possui um número complexo (*ComplexNumber*); (3) *hasProbabilityAmplitude*, em que a base (*Base*) possui uma amplitude de probabilidade (*ProbabilityAmplitude*); (4) *hasBase* em que demonstra que um qubit possui base(s), nesta propriedade foi utilizada também a cardinalidade, definido conforme do trecho de código abaixo.

```
<ObjectPropertyDomain>
  <ObjectProperty IRI="#hasBase"/>
  <Class IRI="#Qubit"/>
</ObjectPropertyDomain>
<ObjectPropertyRange>
  <ObjectProperty IRI="#hasBase"/>
  <ObjectExactCardinality cardinality="2">
    <ObjectProperty IRI="#hasBase"/>
    <Class IRI="#Base"/>
  </ObjectMinCardinality>
</ObjectPropertyRange>
```

Desta forma podemos analisar que a propriedade *hasBase* tem o domínio *Qubit* e também o alcance da *Base*, esta possui uma restrição de cardinalidade que impõe ao *Qubit* sempre possuir duas bases. Isso garante a característica da computação quântica de superposição de estados.

Também temos outra propriedade sobre as classes, a aplicação (*isApplyIn*), em que um super operador *SuperOperator* é aplicado à uma matriz de densidade *DensityMatrix*. Através dessa aplicação é possível colocar a computação e essa ontologia em movimento; possibilitando a criação de circuitos quânticos e algoritmos quânticos.

Também na ontologia foram definidas alguns dados para as classes ao utilizar o trabalho relacionado (Seção 4) para desenvolver essa ontologia, assim foi criada uma classe *ComplexNumber* com os valores: real e imaginário. Eles são definidos como atributos dessa classe em que cada um é representado por de um valor do tipo *double*.

```
<DataPropertyDomain>
  <DataProperty IRI="#imaginaryValue"/>
  <Class IRI="#ComplexNumber"/>
</DataPropertyDomain>
<DataPropertyDomain>
  <DataProperty IRI="#realValue"/>
  <Class IRI="#ComplexNumber"/>
</DataPropertyDomain>
<DataPropertyRange>
  <DataProperty IRI="#imaginaryValue"/>
  <Datatype abbreviatedIRI="xsd:double"/>
</DataPropertyRange>
<DataPropertyRange>
  <DataProperty IRI="#realValue"/>
```

```

    <Datatype abbreviatedIRI="xsd:double"/>
  </DataPropertyRange>

```

Outros relacionamentos e tipos de atributos das classes não descritos aqui foram inseridos nessa ontologia, através da Figura 2 é possível visualizar as classes da ontologia e as relações entre elas.

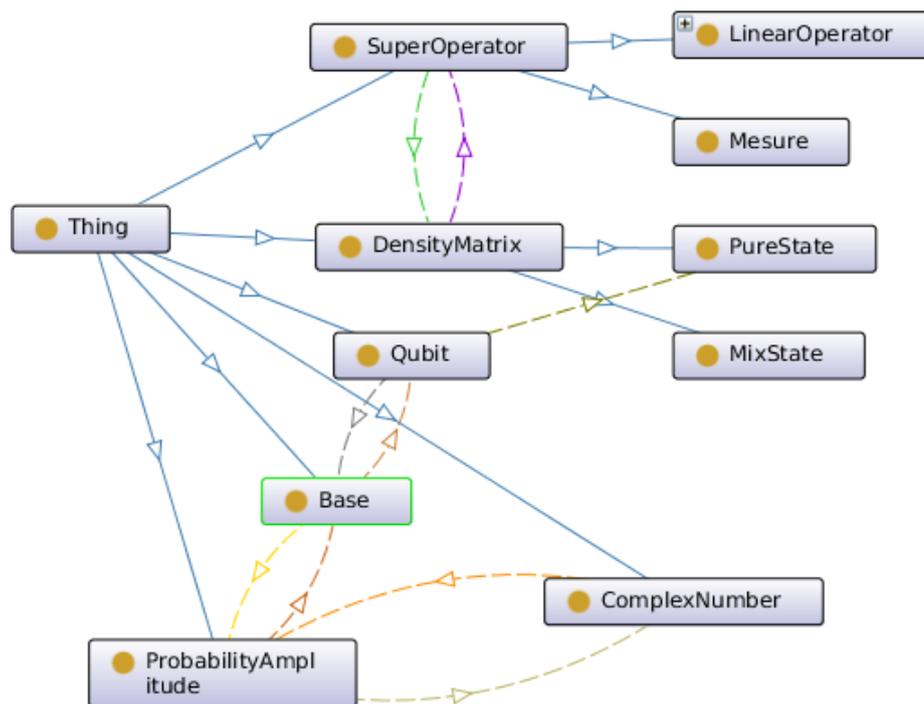


Figura 2. Classes e Relacionamentos da Ontologia

6. Discussão

A área de computação quântica se apresenta aos pesquisadores como uma área nova e com muitos pontos não definidos até então. Cientistas estão ainda no desenvolvimento da lógica e estrutura de representação e manipulação de dados em computadores quânticos a serem desenvolvidos para ampla utilização.

Uma forma de contribuir com a área é através da representação de conhecimento, abordado nesse trabalho na forma de uma ontologia. Assim é possível o alcance a um público maior pelo aprendizado se tornar mais acessível.

A ontologia desenvolvida está disponível em <https://github.com/ontocq/ontocq>, ela possui cerca de 250 linhas para definição das classes e relacionamentos descritos anteriormente.

Este trabalho propõe mudanças de foco em comparação ao apresentado na seção 4. Enquanto àquela propunha uma abordagem da física quântica com várias definições

envolvendo a física e matemática, esta define estas questões através de uma proposta mais de alto nível. Apesar desta ontologia possuir algumas formas baseadas no trabalho relacionado, a abordagem desta é puramente computacional, tentando relacionar seus dados a uma possível modelagem para uma linguagem computacional quântica.

Esta ontologia pode ser utilizada em cenários onde se procure o conhecimento da computação quântica, como a compreensão da computação quântica, definição de uma estrutura de dados e valores que componham a ontologia, criação de simuladores, definição de linguagens para a computação quântica entre outras.

Apesar da possibilidade de utilização em vários cenários, a ontologia não possui ainda uma forma de validação, cabe ao usuário definir como ela será implementada e modelada a fim de buscar sua melhor utilização para o cenário proposto.

7. Conclusão

Nesse trabalho foi realizada uma representação da computação quântica como uma ontologia de domínio específico, bem como relação entre os elementos no contexto e suas características em que são abordados os tópicos principais.

Como trabalhos futuros utilizaremos o conhecimento representado na ontologia como auxílio na implementação de um interpretador para o cálculo- λ quântico monádico com utilização de setas, a fim de produzir uma linguagem de programação quântica de alto nível para modelagem e estudo de princípios ligados à computação quântica [Pires et al. 2015].

Também buscar-se-a definição de mais propriedades para as classes e a criação da camada lógica da ontologia, em que são elaboradas as regras de inferência, uma das varias regras possíveis de criação é para que ao se aplicar uma medida *Measure* em um estado puro *PureState*, este estado deixe de ser puro e seja representado através de um estado misto *MixState*.

Referências

- Antoniou, G., , Antoniou, G., Antoniou, G., Harmelen, F. V., and Harmelen, F. V. (2003). Web ontology language: Owl. In *Handbook on Ontologies in Information Systems*, pages 67–92. Springer.
- Berners-Lee, T., Hendler, J., and Lassila, O. (2001). The semantic web. *Scientific American*, 284(5):34–43.
- Borgo, S., Guarino, N., Masolo, C., and Vetere, G. (1997). Using a large linguistic ontology for internet-based retrieval of object-oriented components. In *In Proceedings of 1997 Conference on Software Engineering and Knowledge Engineering*. Madrid, Knowledge Systems Institute, pages 18–20.
- Borst, W. N. (1997). Construction of engineering ontologies for knowledge sharing and reuse. Universiteit Twente.
- Gandon, F. (2001). Engineering an Ontology for a Multi-Agents Corporate Memory System. In *ISMICK 2001 Eighth International Symposium on the Management of Industrial and Corporate Knowledge*, Compiègne, France. Université de Technologie de Compiègne.

- Germann, U. (1998). Making semantic interpretation parser-independent. In Farwell, D., Gerber, L., and Hovy, E. H., editors, *AMTA*, volume 1529 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 286–299. Springer.
- Gruber, T. (2009). What is an ontology?
- Guarino, N. (1997). Understanding, building and using ontologies. *International Journal of Human-Computer Studies*, 46(2-3):293–310.
- Halpern, J. Y. and Moses, Y. (1990). Knowledge and common knowledge in a distributed environment. *J. ACM*, 37(3):549–587.
- Neumann, J. v. (1927). Wahrscheinlichkeitstheoretischer aufbau der quantenmechanik. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Gottingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, 1927:245–272.
- Pires, J. C. P., Vizzotto, J. K., and Piveta, E. K. (2015). Proposta de um interpretador para o cálculo lambda quântico. volume 3 Ed., pages 198–205.
- Shum, S. B., Motta, E., and Domingue, J. (2000). Scholonto: an ontology-based digital library server for research documents and discourse. *International Journal on Digital Libraries*, 3(3):237–248.
- Skulimowski, M. (2010). An owl ontology for quantum mechanics. In Sirin, E. and Clark, K., editors, *OWLED*, volume 614 of *CEUR Workshop Proceedings*. CEUR-WS.org.
- Smith, B. (2003). Ontology: philosophical and computational. *The Blackwell Guide to the Philosophy of Computing and Information*. Blackwell, Oxford.