Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

Ειδικά θέματα Κβαντικής πληροφορίας και υπολογιστικής
Εργασία 3

Ονοματεπώνυμο: Φραγκίσκος Φαρμάκης   Αριθμός Μητρώου: 1115202100201

Parity Problem

Έστω μια συνάρτηση:

$$f : \{0,1\}^n \to \{0,1\}$$

θεωρούμε *parity* της συνάρτησης f το XOR όλων των εισόδων τις συνάρτησης μεταξύ τους,είδαμε οτι ο αλγόριθμος $Deutch$ λύνει το πρόβλημα αυτό μόνο με ένα $query$ σε ένα $oracle$ της συνάρτησης για $n = 1$.Έμεις καλούμαστε να βρούμε έναν αλγόριθμο ο οποίος επιλύει το παρακάτω πρόβλημα,για $n = 2$.Ας εξετάσουμε πιο αναλυτικά το πρόβλημα,ψάχνουμε να βρούμε της τιμή:

$$(f(0) \oplus f(1)) \oplus (f(2) \oplus f(3)) \to 0/1$$

και μάλιστα κάνοντας το πολύ δύο $queries$,στο $oracle$ της συνάρτησης.

Γενική σχεδίαση-Διαίσθηση

Ο αλγόριθμος σε γενικές γραμμές θα χωρίσει τις τιμές στην μέση.Θα χρησιμοποιήσει ένα σύστημα πολύ κοντά στον αλγόριθμο του $Deutch$ για τις δύο πρώτες τιμές($queries = 1$) και έπειτα θα εκτελέσει τον αλγόριθμο του $Deutch$ για τις αλλες δύο τιμές($queries = 2$).Έτσι άμα οι δύο αυτες ομάδες τιμών δόσουν τον ίδιο αποτέλεσμα($balanced - balanced$ $constant - constant$) υπολογίζουμε $parity = 0$ αλλιώς $parity = 1$.Θα δούμε παρακάτω και πιο τεχνικά πως ακριβώς δημιουργείτε ο αλγόριθμος αυτος,αλλα υπο μία έννοια είναι παραλλαγη του $deutch - josza$ διότι δέχετε δύο $data$ $bits$.

Αλγόριθμος

Θα χωρίσουμε τον αλγόριθμο σε δύο μέρη,το πρώτο $query$ και το δεύτερο $query$.Η κάθε φάση προετοιμάζει και τα $qubits$ και για το κάθε $query$.Άς ξεκινήσουμε με το πρώτο κομμάτι.

$$|\psi_1\rangle = (I \otimes H \otimes I)U_f(I \otimes H \otimes H)\,|0\rangle\,|0\rangle\,|1\rangle$$

Ας αναλύσουμε την έκφαση και ας δούμε την γίνεται στις καταστάσεις:

$$(I \otimes H \otimes H)\,|0\rangle\,|0\rangle\,|1\rangle = (\frac{|00\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}})(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}) = \frac{1}{2}(|000\rangle - |001\rangle + |010\rangle - |011\rangle)$$

Έπειτα θεωρούμε το U_f ο τελεστής μαντείου της συνάρτησης:

$$U_f\,|x_1x_2y\rangle = |x_1x_2, y \otimes f(x_1x_2)\rangle$$

Επομένως η πράξεις συνάδουν με τις πράξεις που εκτελέσαμε στον αλγόριθμο του *Deutch*,δηλαδή ας δούμε για παράδειγμα το $|000\rangle$

$$U_f|000\rangle = U_f|00, 0\oplus f(0)\rangle = (1-f(0))|000\rangle + f(0)|001\rangle$$
$$U_f|001\rangle = U_f|00, 1\oplus f(0)\rangle = f(0)|000\rangle + (1-f(0))|001\rangle$$
$$U_f|010\rangle = U_f|01, 0\oplus f(1)\rangle = (1-f(1))|010\rangle + f(1)|011\rangle$$
$$U_f|011\rangle = U_f|01, 1\oplus f(1)\rangle = f(1)|010\rangle + (1-f(1))|011\rangle$$

Έπειτα εφαρμόζουμε την τελευταία πύλη $I\otimes H\otimes I$.Η διαδικασία είναι σε πλήρη αντιστοιχία με τον αλγόριθμο *Deutch* απλά έχουμε κωδικοποιήσει τις καταστάσεις αλλίως.Για να μην ξεφύγουν οι πράξεις γράφουμε την τελική κατάσταση.

$$|\psi_1'\rangle = (1-f(0)-f(1))|00\rangle(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}) + (f(1)-f(0))|01\rangle(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}})$$

Έτσι λοιπόν μετρώντας το δεύτερο *qubit* μπορούμε να αποφασίσουμε αν $f(0)=f(1)$ ή $f(0)\neq f(1)$. Σε αυτο το σημείο έχουμε καλέσει μια φορά το μαντείο,ας θεωρήσουμε οτι το αποτέλεσμα της μέτρησης του *bit* είναι r_1.Έπειτα συνεχίζουμε με το δεύτερο κομμάτι του αλγορίθμου.Απλά πριν ξεκινήσουμε πρέπει να θέσουμε το 2-3ο *qubit* πάλι στην τιμή 0 και 1 αν δεν είναι ήδη.Επομένως το δεύτερο κομμάτι είναι

$$|\psi_2\rangle = (I\otimes H\otimes I)U_f(X\otimes H\otimes H)|0\rangle|0\rangle|1\rangle$$

Έδω θα ακολουθήσουμε μια αντίστοιχη διαδικασία,ωστόσο μια σημαντική παρατήρηση είναι οτι αλλάζουμε την τιμή του πρώτου *qubit* για να προσπελάσουμε τις υπόλοιπες τιμές της συνάρτησης.Ας προχωρήσοουμε στην ανάλυση:

$$(X\otimes H\otimes H)|0\rangle|0\rangle|1\rangle = (\frac{|10\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}})(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}) = \frac{1}{2}(|100\rangle-|101\rangle+|110\rangle-|111\rangle)$$

Έπειτα θεωρούμε το U_f ο τελεστής μαντείου της συνάρτησης:

$$U_f|x_1x_2y\rangle = |x_1x_2, y\otimes f(x_1x_2)\rangle$$

Επομένως η πράξεις συνάδουν με τις πράξεις που εκτελέσαμε στον αλγόριθμο του *Deutch*,δηλαδή ας δούμε για παράδειγμα το $|000\rangle$

$$U_f|100\rangle = U_f|10, 0\oplus f(2)\rangle = (1-f(2))|100\rangle + f(2)|101\rangle$$
$$U_f|101\rangle = U_f|10, 1\oplus f(2)\rangle = f(2)|100\rangle + (1-f(2))|101\rangle$$
$$U_f|110\rangle = U_f|11, 0\oplus f(3)\rangle = (1-f(3))|110\rangle + f(3)|111\rangle$$
$$U_f|111\rangle = U_f|11, 1\oplus f(3)\rangle = f(3)|110\rangle + (1-f(3))|111\rangle$$

Έπειτα εφαρμόζουμε την τελευταία πύλη $I\otimes H\otimes I$.Η διαδικασία είναι σε πλήρη αντιστοιχία με τον αλγόριθμο *Deutch* απλά έχουμε κωδικοποιήσει τις καταστάσεις αλλίως.Για να μην ξεφύγουν οι πράξεις γράφουμε την τελική κατάσταση.

$$|\psi_2'\rangle = (1-f(2)-f(3))|10\rangle(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}) + (f(3)-f(2))|11\rangle(\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}})$$

Έτσι λοιπόν με μια ακόμα μέτρηση του δεύτερου *qubit* μπορούμε να αποφασίσουμε αν αυτες οι δύο τιμές είναι ίσες η διαφέρουν,έστω αποθηκεύουμε την μέτρηση στο r_2. Η τελική απάντηση του αλγορίθμου θα είναι:

$$r_1\otimes r_2 = r$$

Αν το $r=1$,σημαίνει οτι μια απο τις δύο εκτελέσεις είναι *balanced* και η άλλη *constant* άρα και το *parity* της συνάρτησης θα είναι 1. Αλλίως $r=0$,σημαίνει οτι και οι δύο εκτελέσεις είναι *balanced* ή *constant* άρα και το *parity* της συνάρτησης θα είναι 0.Μαζί με αυτο το αρχείο παρατίθεται και αντίστοιχο *notebook* με το κύκλωμα και παράδειγμα εκτέλεσης.

$Grover's\ Algorithm$

Έστω οτι έχουμε μια συνάρτηση:

$$f : \{0,1\}^2 \rightarrow \{0,1\}$$

Η οποία ορίζετε πλήρως απο τις παρακάτω τιμές:

$$f(0) = 0$$

$$f(1) = 0$$

$$f(2) = 1$$

$$f(3) = 0$$

Θα θεωρήσουμε οτι δεν ξέρουμε τίποτα για την παραπάνω συνάρτηση και θα προσπαθήσουμε να ανάζητήσουμε την τιμή 1,με τα λιγότερα δυνατά $queries$ στην συνάρτηση μας.Την οποία μπορούμε να την θεωρήσουμε σαν μαύρο κουτί($oracle$).Εφόσον έχουμε μόνο μια δυνατή τιμή που ικανοποιεί την αναζήτηση μας,έχουμε την περίπτωση του προβλήματος $unique\ search$.Για την λύση του παραπάνω προβλήματος θα χρησιμοποιήθει ο αλγόριθμος του $Grover$,ο οποίος συγκλίνει με αριθμό $queries$ της τάξης $O(\sqrt{N})$. Στην παρακάτω ανάλυση παραθέτουμε και τις εξισώσεις του γενικού αλγορίθμου,αλλα και πως αριθμητικά επιλύουν το παραπάνω παράδειγμα.Επομένως σκόπος μας είναι να φτιάξουμε αυτο το μαύρο κουτί αλλα και να δείξουμε οτι στο συγκεκριμένο παράδειγμα η σύγκλιση γίνετε μόνο σε ένα $query$.

1

Σάν πρώτο βήμα ας εξετάσουμε τις έννοιες που θα χρειαστούμε για να κατασκευάσουμε την πύλη αυτή.Γενικά ορίζετε:

$$G = H^{\oplus n} Z_{OR} H^{\oplus n} Z_f$$

Άς εξετάσουμε τους όρους που το αποτελούν πριν προχωρήσουμε στις πράξεις:

1. $H^{\oplus n}$,εφαρμογή της πύλης $Hadamard$ στα n bit είσόδου που συμμετέχουν στον υπολογισμό.
2. $Z_f = (-1)^{f(x)} |x\rangle$,συνάρτηση η οποία αλλάζει την φάση μόνο στο $state$ το οποίο αποτελεί την απάντηση του $query$.
3. $$Z_{OR} = \begin{cases} |x\rangle & x = 0^n \\ -|x\rangle & x \neq 0^n \end{cases}$$

Τώρα έχουμε ορίσει οτι χρειαζόμαστε για να αναλύσουμε τον αλγόριθμο του $Grover$.

2

Ας αρχίσουμε ορίζοντας δύο σύνολα:

$$A_0 = \{x \in \Sigma^n : f(x) = 0\} = \{00, 01, 11\}$$

$$A_1 = \{x \in \Sigma^n : f(x) = 1\} = \{10\}$$

Το A_0 περιέχει όλα τα $strings$ που δεν αποτελούν λύση στο πρόβλημα μας,ενώ το A_1 αντίθετα περιέχει όλες(σε αυτη την περίπτωση την μοναδική) λύση του προβλήματος μας.Μέσω αυτών των συνόλων μπορούμε να ορίσουμε 2 μοναδιαία διανύσματα που αντιπροσοπεύουν την ομοιόμορφη υπέρθεση στο εκάστοτε σύνολο:

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{|A_0|}} \sum_{x \in A_0} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|00\rangle + |01\rangle + |11\rangle)$$

και αντίστοιχα

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{|A_1|}} \sum_{x \in A_1} |x\rangle = |10\rangle$$

Έστω λοιπόν οτι έχουμε εκτελέσει το πρώτο βήμα του αλγορίθμου και έχουμε n(ή 2 στο παράδειγμα) $qubits$ σε τυχαία υπέρθεση πρίν την είσοδο τους στην πύλη μας.Η κατάσταση του συστήματος θα είναι:

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x \in \Sigma^n} |x\rangle$$

Προκύπτει λοιπόν οτι μπορούμε να γράψουμε το u ως εξής:

$$|u\rangle = \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} |A_0\rangle + \sqrt{\frac{|A_1|}{N}} |A_1\rangle$$

Έτσι έχουμε περιορίσει το πρόβλημα σε ένα επίπεδο το οποίο αναλύετε σε συντεταγμένες των μοναδιαίων διανυσμάτων που ορίσαμε.Τα οποία επίσης συμβολίζουν τις καταστάσεις που είτε ικανοποιούν είτε όχι το αρχικό πρόβλημα μας. Άς εξετάσουμε λοιπόν την επίδραση του συντελεστή G στην είσοδο. Αρχικά έχουμε:

$$Z_f |A_0\rangle = |A_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|00\rangle + |01\rangle + |11\rangle)$$

$$Z_f |A_1\rangle = -|A_1\rangle = -|10\rangle$$

Επιπλέον μπορούμε να γράψουμε το υπόλοιπο κομμάτι του τελεστή ως εξής:

$$H^{\oplus n} Z_{OR} H^{\oplus n} = 2|u\rangle\langle u| - I$$

Ξέρουμε λοιπόν οτι άμα εφαρμόσουμε και αυτο το κομμάτι θα έχουμε:

$$G|A_0\rangle = \frac{|A_0| - |A_1|}{N} |A_0\rangle + \frac{2\sqrt{|A_0||A_1|}}{N} |A_1\rangle = \frac{1}{2} |A_0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |A_1\rangle$$

και

$$G|A_1\rangle = -\frac{2\sqrt{|A_0||A_1|}}{N} |A_0\rangle + \frac{|A_0| - |A_1|}{N} |A_1\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} |A_0\rangle + \frac{1}{2} |A_1\rangle$$

Για να κατανοήσουμε καλύτερα τι συμβαίνει γράφουμε το G σαν $2x2$ πίνακα,όπου οι συντεταγμένες του είναι τα μοναδιαία διανύσματα που χρησιμοποιήσαμε.

$$M = \begin{pmatrix} \frac{|A_0|-|A_1|}{N} & -\frac{2\sqrt{|A_0||A_1|}}{N} \\ \frac{2\sqrt{|A_0||A_1|}}{N} & \frac{|A_0|-|A_1|}{N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} & -\sqrt{\frac{|A_1|}{N}} \\ \sqrt{\frac{|A_1|}{N}} & \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} \end{pmatrix}$$

Παρατηρούμε όμως οτι ο τελευταίος πίνακας είναι πίνακας περιστρόφης,επομένως:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} & -\sqrt{\frac{|A_1|}{N}} \\ \sqrt{\frac{|A_1|}{N}} & \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Με $\theta = \sin^{-1}\sqrt{\frac{|A_1|}{N}} = \sin^{-1}\sqrt{\frac{1}{4}}$ Άρα η περιστροφή θα είναι:

$$M = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} & -\sqrt{\frac{|A_1|}{N}} \\ \sqrt{\frac{|A_1|}{N}} & \sqrt{\frac{|A_0|}{N}} \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} \cos 2\theta & -\sin 2\theta \\ \sin 2\theta & \cos 2\theta \end{pmatrix}$$

Συνοψίζοντας μπορούμε να γράψουμε την κατάσταση:

$$|u\rangle = \cos\theta\,|A_0\rangle + \sin\theta\,|A_1\rangle$$

και κάθε *query* όπου εκτελείτε η πύλη G στην κατάσταση θα αυξάνει την γωνία προς $\pi/2$,όπου θεωρούμε πως βρίσκετε η λύση του προβλήματος αναζήτησης,γενικά μετά απο t περιστροφές θα βρισκόμαστε στην κατάσταση:

$$G^t\,|u\rangle = \cos\left((2t+1)\theta\right)|A_0\rangle + \sin\left((2t+1)\theta\right)|A_1\rangle$$

Τέλος ας δούμε τι τιμή πρέπει να έχει το t για να έχουμε μια καλή προσέγγιση της λύσης,δηλαδή πόσες περιστροφές πρέπει να κάνουμε:

$$(2t+1)\theta \simeq \frac{\pi}{2}$$

$$t \simeq \frac{\pi}{4\theta} - \frac{1}{2}$$

Αλλά πρέπει το t να είναι ακέραιος αριθμός επομένως:

$$t \simeq \left\lfloor \frac{\pi}{4\theta} \right\rfloor$$

Στην δική μας περίπτωση έχουμε βρεί την τιμή της γωνίας,επιπλέον θεωρούμε πως για μικές γωνίες $\theta \simeq \sqrt{\frac{1}{N}}$ Άρα εν τέλει η περιστροφές που χρειάζετε να κάνουμε είναι:

$$t = \left\lfloor \frac{\pi}{4}\sqrt{4} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{\pi}{2} \right\rfloor = 1$$

Αυτό που μένει να κάνουμε είναι δεδομένης της περιστροφής να μετρήσουμε την πιθανότητα να πάρουμε λύση του προβλήματος,αυτη πιθανότητα μετά απο t περιστροφές θα είναι:

$$Pr(N,1) = \sin^2\left((2t+1)\theta\right)$$

Στην δική μας περίπτωση θα έχουμε:

$$Pr(4,1) = \sin^2\left((2+1)\frac{\pi}{6}\right) = \sin^2\frac{\pi}{2} = 1$$

Επομένως δείξαμε πως για το συγκεκριμένο πρόβλημα χρειαζόμαστε 1 μόνο περιστροφή δηλαδή *query* για να πάρουμε σίγουρα σώστό αποτέλεσμα.

Παρακάτω υπάρχει μια σύνοψη του *paper* : $https://www.rivas.ai/pdfs/khanal2021quantum.pdf$

1 *Paper review*

Analytical Summary

The paper, *"Quantum Machine Learning: A Case Study of Grover's Algorithm"* by Khanal and Rivas, explores the integration of quantum computing with machine learning, focusing on **quantum kernel methods** and **quantum variational algorithms (QVAs)**. These approaches are analyzed within the framework of Grover's Algorithm (GA), showcasing its potential in quantum-enhanced machine learning.

Key Points

1. *Quantum Kernel Methods*

- The authors discuss quantum kernel methods as tools for mapping data into high-dimensional Hilbert spaces, enabling linear models to capture non-linear patterns efficiently.
- Quantum kernels are utilized in tasks such as support vector machines (SVMs), employing the kernel trick for classification.
- Grover's Algorithm is applied to efficiently search and optimize kernel functions within this quantum framework.

Analysis : Quantum kernels offer significant promise for machine learning but are constrained by challenges such as scalability, noise resilience, and hardware limitations.

2. *Quantum Variational Algorithms(QVAs)*

- Variational algorithms leverage parameterized quantum circuits (PQCs) in conjunction with classical optimization to minimize cost functions iteratively.
- The paper highlights how QVAs can complement Grover's Algorithm, with GA handling feature selection or kernel optimization and QVAs refining decision boundaries.
- Variational algorithms are particularly suitable for noisy intermediate-scale quantum (NISQ) devices.

Analysis :While QVAs address scalability issues, they face challenges like barren plateaus (regions with vanishing gradients) and convergence difficulties.

3. *Hybrid Framework*

- The authors propose a hybrid approach combining quantum kernel methods, variational algorithms, and Grover's Algorithm.
- Grover's Algorithm provides efficient search capabilities, while QVAs optimize parameters for classification or regression in high-dimensional spaces.
- This synergy highlights the complementary strengths of quantum and classical paradigms.

Analysis : The hybrid framework demonstrates significant potential for advancing quantum machine learning, particularly for non-linear data transformations.

Implications and Challenges

- *Theoretical Advancement* : The integration of quantum kernels, variational algorithms, and Grover's Algorithm provides a robust foundation for quantum-accelerated machine learning.
- *Practical Constraints* :Implementation challenges include efficient quantum circuit design, noise resilience, and the classical optimization bottleneck in QVAs.
- *Future Directions* :Expanding the framework to include additional quantum subroutines (e.g., Hamiltonian simulation) could further enhance performance.

Conclusion

The paper illustrates how **quantum kernel methods**, **variational algorithms**, and **Grover's Algorithm** can be combined to create powerful quantum-classical hybrid machine learning frameworks. While the theoretical promise is substantial, practical implementation depends on overcoming hardware and optimization challenges. This work represents a key step toward realizing quantum-enhanced machine learning.