



Universidad Simón Bolívar
Decanato de Estudios Profesionales
Coordinación de Ingeniería de Electrónica

Diseño y Simulación de Procesadores Cuánticos que Implementen Algoritmos Cuánticos de Búsqueda

Por:

Miguel Casanova

Realizado con la asesoría de:

Enrique Castro y Sttiwuer Diaz

PROYECTO DE GRADO

Presentado ante la Ilustre Universidad Simón Bolívar
como requisito parcial para optar al título de
Ingeniero Electrónico

Sartenejas, noviembre de 2018

Índice general

Índice de Figuras	2
Lista de Tablas	3
1. Introducción	9
1.1. JUSTIFICACION	14
1.2. OBJETIVOS	16
1.2.1. Objetivo General:	16
1.2.2. Objetivos Específicos:	16
1.2.3. Fases del Proyecto	16
1.2.4. REFERENCIAS	17
2. Información cuántica	20
2.1. Función de onda	20
2.2. Espacio de Hilbert	21
2.3. Delta de Kronecker	22
2.4. Operadores hermíticos	23
2.5. Operadores unitarios	23
2.6. Notación de Dirac	23
2.7. Producto tensorial	25
2.8. Postulados de la mecánica cuántica	27
2.9. Matriz densidad	28
2.10. Traza parcial	30
2.10.1. Comparación con el producto tensorial	31
2.11. Entrelazamiento	31
2.12. Computación cuántica	32
2.12.1. Qubits	32
2.12.2. Esfera de Bloch	33
2.12.3. Conmutador y anticonmutador	33
2.12.3.1. Conmutador	34
2.12.3.2. Anticonmutador	34
2.12.4. Matrices de Pauli	34
2.12.5. Circuitos cuánticos	35
2.12.6. Compuertas cuánticas de un qubit	37
2.12.6.1. Compuerta identidad	37

2.12.6.2. Compuerta X	38
2.12.6.3. Compuerta Z	38
2.12.6.4. Compuerta Y	39
2.12.6.5. Compuerta de Hadamard	40
2.12.6.6. Compuerta S	40
2.12.6.7. Compuerta T	41
2.12.6.8. Compuerta de cambio de fase	41
2.12.6.9. Compuertas de rotación	42
2.12.7. Compuertas multiqubit	43
2.12.7.1. Compuerta CNOT	43
2.12.7.2. Compuerta SWAP	44
2.12.7.3. Compuerta $\sqrt{\text{SWAP}}$	45
2.12.7.4. Compuerta de Ising	45
2.12.7.5. Compuerta de Toffoli	46
2.12.7.6. Compuerta de Deutsch	46
2.12.8. Conjuntos universales de compuertas cuánticas	47
2.12.9. Criterios de DiVincenzo	48
2.13. Fidelidad	48
2.14. Medidas proyectivas	49
3. Superconductividad	50
3.1. Cuantización macroscópica y superconductividad	50
3.2. La teoría BCS	52
3.3. Cuantización del flujo magnético y efecto tunel Giaver	60
3.4. Efecto Josephson	66
3.5. Componentes de la corriente en las uniones de Josephson	71
3.6. Qubits superconductores	72
3.7. Arquetipos de qubits superconductores	73
3.7.1. Qubit de carga	73
3.7.2. Qubit de flujo	74
3.7.3. Qubit de fase	74
3.8. Transmones	74
3.9. Hamiltonianos multiqubit de transmones	75
3.9.1. Acoplamiento capacitivo	75
3.9.2. Acoplamiento por el resonador	75
3.9.3. Acoplamiento de JJ	76
3.9.4. Acoplamiento afinable/calibrable	76
3.10. Compuertas cuánticas en transmones	76
3.10.1. El operador de evolución temporal	76
3.10.2. Pulsos de microondas	77
3.10.3. Régimen rotacional del pulso	77
3.10.4. Efecto del pulso sobre el qubit	77
3.10.5. Régimen dispersivo	78
3.10.6. Rotaciones X-Y	78

3.10.7. Compuerta de entrelazamiento	79
3.10.8. Compuertas compuestas	79
4. El simulador	80
4.1. Parámetros de los sistemas simulados	81
4.2. Compuertas simples	82
4.2.1. Rx y Ry	82
4.2.2. iSWAP	84
4.3. Compuertas compuestas	85
4.3.1. X	85
4.3.2. Y	85
4.3.3. Rz	85
4.3.4. Z	86
4.3.5. H	86
4.3.6. CNOT	86
4.3.7. SWAP	86
4.3.8. Compuertas condicionales generales	87
4.3.9. CP	88
5. Algoritmo de Grover	92
5.1. El algoritmo	96
5.2. Variaciones y generalizaciones del algoritmo de Grover	97
5.2.1. Algoritmo de amplificación de amplitud	97
5.2.2. Algoritmo de Grover en un paso	100
5.2.3. Optimización del algoritmo de Grover	101
5.3. Simulaciones	102
5.3.1. Algoritmo de Grover	102
5.3.2. Amplificación de amplitud	104
5.3.3. Optimización del algoritmo de Grover	104
6. Algoritmo de Shor	105
6.1. Transformada cuántica de Fourier	105
6.2. Estimación de fase	107
6.3. Estimación de orden	110
6.4. Expansión en fracciones continuas	113
6.5. Algoritmo de factorización de Shor	114
6.6. Simulaciones	115
6.6.1. Factorización del número 15	115
6.6.2. Factorización del número 8	118
1. Google PageRank	4
1.1. El algoritmo de remiendo (parcheo) general	7
1.2. Interpretación como una caminata aleatoria	8
1.3. Cuantizando las caminatas aleatorias	9
1.4. Caminata cuántica de Szegedy	9

1.5. PageRank cuántico	11
1.6. Circuitos de las caminatas cuánticas de Szegedy	11
1.7. Simulaciones	16
1.7.1. Grafo estrella	16
1.7.2. Grafo corona	20
1.7.3. Grafo árbol	22
1.7.4. Grafo aleatorio	24
A. Cálculos de Hamiltonianos	143
A.1. Hamiltoniano de Jaynes-Cummings	143
A.2. Hamiltoniano multiquibit	143
A.3. Pulsos de microondas	143
A.4. Régimen rotacional del pulso	144
A.5. Efecto del pulso sobre el qubit	148
A.6. Régimen dispersivo	149
A.7. Rotaciones X-Y	152
A.8. Compuerta de entrelazamiento	153
B. Cálculos de matrices de adyacencia	154
C. Circuitos cuánticos	155
D. Códigos del simulador	164
D.1. Wolfram Mathematica	164
D.2. Python	171
E. Códigos de la simulación del algoritmo de Grover	184
E.1. Wolfram Mathematica	184
E.2. Python	186
F. Códigos de la simulación del algoritmo de Shor	188
F.1. Wolfram Mathematica	188
F.2. Python	192
G. Códigos de la simulación del algoritmo de PageRank	196
G.1. Wolfram Mathematica	196
G.2. Python	196

Índice de figuras

2.1. Esfera de Bloch	33
2.2. Compuerta I en la esfera de Bloch	38
2.3. Compuerta X en la esfera de Bloch	38
2.4. Compuerta Z en la esfera de Bloch	39
2.5. Compuerta Y en la esfera de Bloch	39
2.6. Compuerta H en la esfera de Bloch	40
2.7. Compuerta S en la esfera de Bloch	41
2.8. Compuerta T en la esfera de Bloch	41
2.9. Compuerta P en la esfera de Bloch	42
2.10. Compuertas Rx, Ry y Rz en la esfera de Bloch	43
3.1. Diagrama de Feynman de la interacción electrón-fonón-electrón . .	56
3.2. Construcción geométrica de los posibles electrones candidatos para formar pares de Cooper, siendo $\hbar K$ el momentum del centro de masas.	57
3.3. Cuantización del flujo magnético	62
3.4. Imposibilidad de efecto túnel a través de la barrera	64
3.5. Posibilidad de efecto túnel a través de la barrera	65
3.6. Efecto Giaver: Efecto túnel entre un metal y un superconductor . .	66
3.7. Curva característica de una unión Josephson	70
4.1. Rotaciones en X e Y de 2π	83
4.2. Rotaciones en X e Y de π	83
4.3. Rotaciones en X e Y de $\frac{\pi}{2}$	83
4.4. Compuertas iSWAP y \sqrt{iSWAP} aplicadas a $ 00\rangle$	84
4.5. Compuertas iSWAP y \sqrt{iSWAP} aplicadas a $ 01\rangle$	84
4.6. Compuertas iSWAP y \sqrt{iSWAP} aplicadas a $\frac{ 00\rangle+ 11\rangle}{\sqrt{2}}$	84
4.7. Compuertas iSWAP y \sqrt{iSWAP} aplicadas a $\frac{ 0\rangle+ 1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{ 0\rangle+ 1\rangle}{\sqrt{2}}$	84
5.1. Circuito del algoritmo de Grover, k_{max} desconocido.	94
5.2. Interpretación geométrica del operador difusión	96
5.3. Circuito del algoritmo de Grover.	96
5.4. Evolución de las probabilidades en el algoritmo de Grover sin rela- jación	103
5.5. Evolución de las probabilidades en el algoritmo de Grover con rela- jación	103

6.1. Distribución de probabilidad en la estimación de fase del algoritmo de Shor sin pérdidas	116
6.2. Distribución de probabilidad en la estimación de fase del algoritmo de Shor sin pérdidas	118
1.1. Transformación de un grafo al crear la matriz de Google con $\alpha = \frac{1}{2}$	8
1.2. Operador de permutación	13
1.3. Circuito de Loke para las caminatas cuánticas de Szegedy	13
1.4. Circuito de K_i	14
1.5. Grafo estrella	17
1.6. Circuito de K_1 para el grafo estrella	18
1.7. Circuito de K_2 para el grafo estrella	18
1.8. K_b del grafo estrella	18
1.9. T del grafo estrella	18
1.10. Preparación del estado inicial para la caminata en el grafo estrella	18
1.11. Circuito del PageRank cuántico del grafo estrella	19
1.12. PageRank cuántico instantáneo del grafo estrella sin pérdidas	19
1.13. PageRank cuántico promedio del grafo estrella sin pérdidas	19
1.14. PageRank cuántico instantaneo del grafo estrella con y sin pérdidas	20
1.15. PageRank cuántico promedio del grafo estrella con y sin pérdidas	20
1.16. Grafo corona	21
1.17. PageRank cuántico instantáneo del grafo corona sin pérdidas	21
1.18. PageRank cuántico promedio del grafo corona sin pérdidas	22
1.19. Grafo árbol	23
1.20. PageRank cuántico instantáneo del grafo árbol sin pérdidas	23
1.21. PageRank cuántico promedio del grafo árbol sin pérdidas	24
1.22. PageRank cuántico instantaneo del grafo árbol con y sin pérdidas	24
1.23. PageRank cuántico promedio del grafo árbol con y sin pérdidas	24
1.24. Grafo aleatorio	25
1.25. PageRank cuántico instantáneo del grafo aleatorio sin pérdidas	25
1.26. PageRank cuántico promedio del grafo aleatorio sin pérdidas	25
1.27. PageRank cuántico instantaneo del grafo aleatorio con y sin pérdidas	26
1.28. PageRank cuántico promedio del grafo aleatorio con y sin pérdidas	26

Índice de cuadros

Capítulo 7

Google PageRank

El algoritmo de PageRank fue desarrollado en 1996 en la Universidad de Stanford por Larry Page y Sergey Brin, los cuales fueron los fundadores de Google.

Este algoritmo se basa en la idea de que sitios web importantes tienen muchos vínculos que apuntan hacia ellos, lo que conduce a pensar en la web como una red ponderada orientada.

Existen muchos otros algoritmos, algunos más eficientes, pero la importancia de PageRank se sustenta en el poder económico de Google.

Ilustraremos el algoritmo de PageRank con un ejemplo sencillo:

Ejemplo:

Consideremos 5 páginas web distintas a las que denotaremos por 1, 2, 3, 4, y 5, y cuyo grafo es:

Pasos:

1. Determinar la matriz de adyacencia. Algunos autores denotan la matriz de adyacencia por M en el protocolo de PageRank

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

2. Sumamos los elementos de cada una de las columnas.

$$\begin{matrix} 3 & 1 & 2 & 2 & 3 \end{matrix}$$

Estas sumas representan el número de links que salen del nodo o vértice de la página p_j , es decir:

$I(p_j) \equiv$ Importancia de la página j

$\text{outdeg}(p_j) \equiv$ número de links que salen de la página p_j

$$I(p_i) \equiv \sum_{j \in B_i} \frac{I(p_j)}{\text{outdeg}(p_j)}$$

$B_i \equiv$ conjunto de páginas que son linkeadas

3. Dividimos cada elemento de M por la suma de los elementos de la columna a la cual corresponde y llamaremos a la nueva matriz obtenida M'

$$M' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/2 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 0 & 1/2 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

4. El siguiente paso es encontrar un vector \vec{v} (algunos autores lo llaman \vec{I}) que represente el PageRank de cada una de las páginas. Como tenemos 5 páginas web le asignamos a \vec{v} como valores $\vec{v} = (a, b, c, d, e)^T$, obteniendo así un vector de dimensión $d = 5$.
5. Obtenemos los valores de $\{v_i\}$ a partir de los autovalores de M' , tal que:

$$M'\vec{v} = \lambda\vec{v} \text{ con } \lambda \in R$$

6. Determinamos los autovalores de M'

$$\lambda_1 = 1; \quad \lambda_2 = \frac{-2}{3}; \quad \lambda_3 = \frac{-1}{2}; \quad \lambda_4 = \frac{-1}{3}; \quad \lambda_5 = \frac{1}{3}$$

Tomaremos sólo $\lambda = 1 \rightarrow M'\vec{v} = \vec{v}$ (Ecuación autoconsistente)

7. Hallamos el autovector asociado a $\lambda = 1$. Obteniendo:

$$a = 6; \quad b = 1; \quad c = \frac{16}{3}; \quad d = \frac{14}{3}; \quad e = 3$$

8. Finalmente, Google ordena de mayor a menor las componentes de \vec{v} , quedándonos:

$$\begin{array}{rcl} & - & a \\ & - & c \\ \text{Pantalla} & \rightarrow & - d \\ & - & e \\ & - & b \end{array}$$

La idea de PageRank de Google es que la importancia de una página viene dada por la cantidad de páginas que se enlazan con ella.

Surgen varios problemas:

1. Las matrices hyperlink (hiperenlace) pueden tener billones de entradas en filas y columnas.
2. Calcular los autovectores es un absurdo computacional.
3. Los estudios muestran que un nodo (página web) tiene un promedio de 10 enlaces, y las demás entradas de la matriz son cero.
4. No se encuentra $\lambda = 1$ en la mayoría de los casos.

Por esta razón, un remedio (Patching) del algoritmo de PageRank fue el método de las potencias, en el cual la matriz hiperenlace

$$H_{ij} \equiv \begin{cases} \frac{1}{\text{outdeg}(P_j)} & \text{si } P_j \in B_i \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

debería converger a una solución autoconsistente

$$I^{k+1} = HI^k$$

donde se toma un vector I^0 y se hace interactuar unas 100 veces y el orden mostrado de las páginas es el de I^{100} , ordenadas de mayor a menor. Si se normalizan las columnas de la matriz hipervínculo (hiperenlace) H , obtenemos otra matriz hiperenlace normalizada E .

La matriz E : se sabe de la teoría de matrices estocásticas que 1 es uno de sus autovalores. Además, también se sabe que la convergencia de $I^k = EI^{k-1}$ a $I = EI$ depende del segundo autovalor de λ_2 de E y es un hecho que $I^k = EI^{k-1}$ converge rápidamente si $|\lambda_2|$ es cercano a cero.

7.1. El algoritmo de remiendo (parcheo) general

Asumamos que el caminante recorre el grafo siguiendo la web con una matriz estocástica E con probabilidad α , y con probabilidad $1 - \alpha$ podrá ir a cualquier página al azar que sea de su interés. La matriz web de este proceso será:

$$G \equiv \alpha E + \frac{1 - \alpha}{N} \mathbb{I} \text{Matriz de Google}$$

\mathbb{I} es una matriz en la cual todas las entradas están establecidas en 1, y N el número de nodos.

Propiedades de G :

1. Es estocástica
2. Irreducible
3. Primitiva
4. El resultado de determinar el estado auto-consistente no depende del vector Google inicial I^0

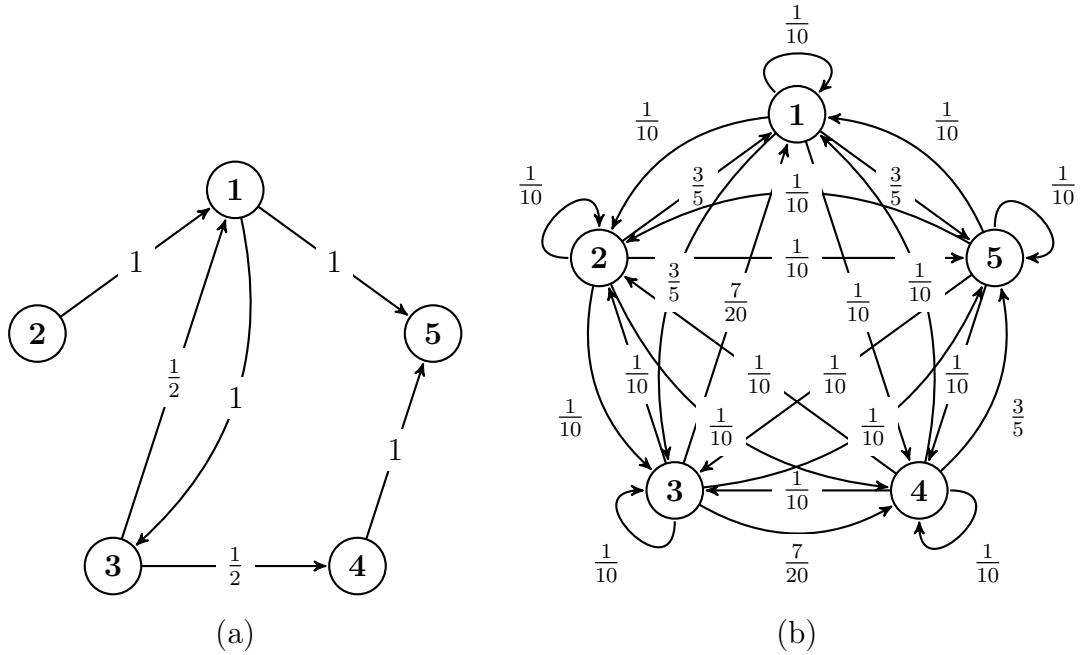


FIGURA 7.1: Transformación de un grafo al crear la matriz de Google con $\alpha = \frac{1}{2}$: Grafo correspondiente a la matriz de adyacencia (a) de la red E (b) remendada de Google G con $\alpha = \frac{1}{2}$

7.2. Interpretación como una caminata aleatoria

La asignación de valores de importancia se puede replantear como la probabilidad de encontrar un caminante aleatorio en cierto nodo del grafo.

Del proceso:

De la ley de probabilidad total:

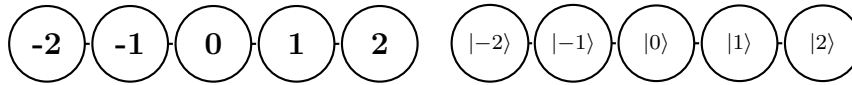
$$\begin{aligned}
 Pr(x^{(n+1)} = p_i) &= \sum_j G_{ij} Pr(x^{(n)} = p_j) \\
 Pr(x^{(n+1)} = p_i) &= \sum_j Pr(x^{(n+1)} = p_i | x^{(n)} = p_j) Pr(x^{(n)} = p_j) \\
 \implies G_{ij} &= Pr(x^{(n+1)} = p_i | x^{(n)} = p_j)
 \end{aligned}$$

En el contexto del Internet, G_{ij} es la probabilidad de que cierto internauta, que se encuentra en la página p_i , entre en la página p_j . El factor αE_{ij} es la probabilidad de que lo haga presionando un enlace presente en p_i , mientras que $\frac{1-\alpha}{N} \mathbb{I}$ es la probabilidad de que lo haga introduciendo la URL directamente.

El factor de amortiguamiento es libre y debe ser calibrado. Se suele usar $\alpha = 0,85$

7.3. Cuantizando las caminatas aleatorias

La forma obvia y directa de cuantizar una caminata aleatoria sería sustituir el conjunto de nodos $\{p_i\}$ por el conjunto de kets $\{|i\rangle\}$. Sin embargo, esto lleva a sistemas con operadores no unitarios y no es realizable.



Esto nos obliga a buscar maneras alternativas de cuantizar las caminatas aleatorias. La cadena anterior se podría cuantizar agregando un espacio "moneda".^{a1} espacio de Hilbert generado por $\{|i\rangle\}$. En este caso, el operador de difusión se interpreta como "lanzar la moneda" para decidir en qué dirección ir.

$$\begin{aligned}
 U &= \sqrt{p} |i+1\rangle\langle i| \otimes |c\rangle\langle c| + \sqrt{1-p} |i-p\rangle\langle i| \otimes |s\rangle\langle s| \\
 U^\dagger &= \sqrt{p} |i\rangle\langle i+1| \otimes |c\rangle\langle c| + \sqrt{1-p} |i\rangle\langle i-p| \otimes |s\rangle\langle s| \\
 UU^\dagger &= p |i+1\rangle\langle i+1| \otimes |c\rangle\langle c| + (1-p) |i-1\rangle\langle i-1| \otimes |s\rangle\langle s|
 \end{aligned}$$

Al realizar la suma sobre i se tiene $\mathbb{1}$, como se deseaba. Sin embargo, esta solución todavía no es satisfactoria, pues exige que $p_{ij} = \frac{1}{\text{outdeg}(j)}$ para que $UU^\dagger = \mathbb{1}$.

Casi todas las cuantizaciones cometen estos dos pecados, aumentar la dimensión del espacio de Hilbert e imponer condiciones sobre el grafo; y en general, se debe cometer al menos uno de los dos. También existen caminatas cuánticas continuas, no sólo discretas, pero ellas siguen un esquema distinto de la computación cuántica, donde no se busca que el operador de evolución del sistema corresponda a compuertas cuánticas con las cuales construir el operador de difusión, sino directamente al operador de difusión de la caminata cuántica.

7.4. Caminata cuántica de Szegedy

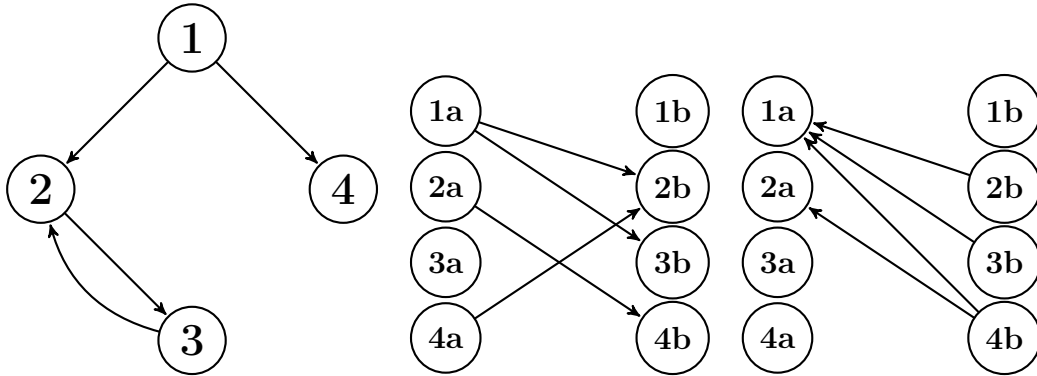
Existe un tipo particular de caminatas aleatorias conocido como caminatas bipartitas. En éstas se tiene dos conjuntos de nodos y sólo ocurren transiciones entre los dos conjuntos, no dentro del mismo.

Szegedy desarrolló una cuantización de estas caminatas. Para esto utilizó operadores de reflexión ($W = \mathbb{1} - 2|w\rangle\langle w|$, similares a los utilizados en el algoritmo de Grover). Aprovechándose del hecho de que un par de reflexiones equivale a una rotación (como en el algoritmo de Grover), creó el siguiente operador de evolución de la caminata: $U = (\mathbb{1} - 2B)(\mathbb{1} - 2A)$, donde A es el proyector sobre las transiciones de la primera partición a la segunda y B de la segunda a la primera.

$$|\psi_i\rangle = |i\rangle_1 \otimes \sum_j \sqrt{p_{ji}} |j\rangle_2 \quad |\psi_i\rangle = \sum_i \sqrt{p_{ij}} |i\rangle_1 \otimes |i\rangle_2$$

$$A = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad B = \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

Si tomamos un grafo cualquiera y lo duplicamos en la forma de un grafo bipartito con ambas particiones iguales y transiciones iguales en ambos sentidos, podemos cuantizar cualquier tipo de caminata. Sólo hay que pagar el precio de duplicar el espacio de Hilbert generado por $\{|i\rangle\}$: $\mathcal{H}' = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$.



En estos casos, podemos escribir el operador de difusión en términos de sólo A, pues como la segunda partición es un reflejo de la primera, $B = A^T$. Entonces: $U = (2A^T - \mathbb{1})(2A - \mathbb{1})$

$$\Rightarrow = (2SAS - \mathbb{1})(2A - \mathbb{1}) = S(2A - \mathbb{1})S(2A - \mathbb{1}) = [S(2A - \mathbb{1})]^2$$

Donde S es el operador SWAP, $S = \sum_{ij} |ji\rangle\langle ij|$

Tomando $W = (2A - \mathbb{1})$, el operador de difusión es

$$U = (SW)^2 \quad (7.1)$$

7.5. PageRank cuántico

Finalmente, procedemos a cuantizar el algoritmo de PageRank. Partimos del hecho de que el algoritmo de PageRank se puede formular como una caminata aleatoria, cuya matriz de probabilidades es la matriz de Google, G . Entonces seguimos el procedimiento de Szegedy, sustituyendo p_{ij} por G_{ij} .

Ahora, definimos el valor de PageRank cuántico en el paso m como:

$$I_q(P_i, m) = |U^{\dagger m}(\mathbb{1} \otimes |i\rangle\langle i|)|\rangle$$

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i |\psi_i\rangle$$

Esto equivale a realizar m pasos de la caminata con $|\psi_0\rangle$ como estado inicial y realizar una medida proyectiva sobre $|i\rangle_2$.

Nota: I_q no converge, sino que oscila, así que se toma el centro de las oscilaciones como la medida de importancia de las páginas. Esto se hace promediando I_q sobre m : $\langle I_q(P_i) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} I_q(P_i, m)$

7.6. Circuitos de las caminatas cuánticas de Szegedy

Loke y Wang [?] proponen un esquema para construir eficientemente algoritmos de las caminatas cuánticas de Szegedy. Este esquema consiste en separar las reflexiones del algoritmo en distintas etapas y realizar reflexiones alrededor de estados de la base computacional.

Sea el operador de reflexión del operador de difusión

$$W = 2 \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| - \mathbb{1} = 2 \sum_i |i\rangle\langle i| \otimes |\psi'_i\rangle\langle\psi'_i| - \mathbb{1} \quad (7.2)$$

Donde $|\psi'_i\rangle = \sum_j \sqrt{p_{ji}} |j\rangle_2$

Si le aplicamos la transformación unitaria $K = \sum_i |i\rangle\langle i| \otimes K_i$ tal que $U_i |\psi'_i\rangle = |b\rangle$, donde $|b\rangle$ es un estado de la base computacional, tendremos:

$$\begin{aligned} KWK^\dagger &= K(2A - \mathbb{1})K^\dagger = 2KAK^\dagger - \mathbb{1} = 2 \sum_i |i\rangle\langle i| \otimes K_i |\psi'_i\rangle\langle\psi'_i| K_i^\dagger - \mathbb{1} \\ &= 2 \sum_i |i\rangle\langle i| \otimes |b\rangle\langle b| - \mathbb{1} = 2\mathbb{1}_1 \otimes |b\rangle\langle b|_2 - \mathbb{1} = D \quad (7.3) \end{aligned}$$

Lo cual se puede implementar fácilmente con compuertas de fase controladas, ya que es una reflexión alrededor de un estado de la base computacional del segundo registro. Sin embargo, esto todavía requeriría hallar N K_i distintos para un grafo de N nodos. Para disminuir la cantidad de K_i a hallar, se pueden aprovechar simetrías en la matriz de adyacencia del grafo. Si separamos el grafo en subgrafos cíclicos, bastaría con hallar un K_i por subgrafo. En los grafos cíclicos, cada fila de la matriz de adyacencia, y de la matriz de Google, es una permutación de la anterior. Lo mismo sucede con los estados asociados a cada uno de los nodos, así que, con un operador de permutación T , se podrían convertir los estados de todos los nodos de un grafo cíclico en un mismo estado de referencia. Por ejemplo, supongamos un grafo, cuyos estados $|\psi'_i\rangle$ son:

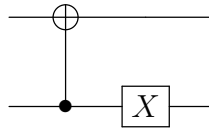
$$\begin{aligned} |\psi'_0\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{0,0375} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \end{pmatrix} & |\psi'_1\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,0375} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \end{pmatrix} \\ |\psi'_2\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,0375} \\ \sqrt{0,8875} \end{pmatrix} & |\psi'_3\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,8875} \\ \sqrt{0,0375} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.4)$$

Entonces, el operador de permutación

$$T = X(1)\text{CNOT}(1,0) \quad (7.5)$$

Permite transformar $|\psi'_1\rangle, |\psi'_2\rangle, |\psi'_3\rangle$ en $|\psi'_0\rangle$ de la siguiente manera:

$$|\psi'_0\rangle = T^\dagger |\psi'_1\rangle = T^3 |\psi'_1\rangle = T^2 |\psi'_2\rangle = T |\psi'_3\rangle \quad (7.6)$$

FIGURA 7.2: Operador de permutación T

Luego, siguiendo esta idea, $K_i = K_b^\dagger T_i$, donde $K_b^\dagger |\psi'_r\rangle = |b\rangle$ y $T_i |\psi'_i\rangle = |\psi'_r\rangle$. En otras palabras, $\{K_b\}$ representa el conjunto de K_i necesarios después de separar el grafo, uno por cada subgrafo cíclico; $|\psi'_r\rangle$ es un estado de referencia de cada subgrafo cíclico y podría ser el estado asociado a alguno de los nodos de ese subgrafo; T_i es un operador que transforma el estado de cada nodo en el estado de referencia del subgrafo cíclico correspondiente. En caso de haber elegido $|\psi'_r\rangle$ como el estado de alguno de los nodos del subgrafo cíclico, entonces T_i puede ser un mismo operador de permutación aplicado repetidas veces para todos los nodos del mismo subgrafo, como en el ejemplo anterior.

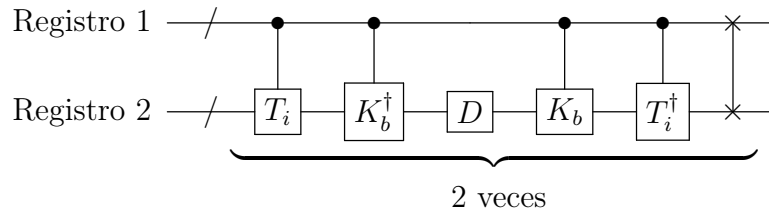


FIGURA 7.3: Circuito de Loke para las caminatas cuánticas de Szegedy

En resumen, el proceso para construir el circuito de una caminata de Szegedy es:

1. Hallar la matriz de Google del grafo.
2. Separar las filas de la matriz en grupos de filas tales que las filas de cada grupo sean permutaciones una de la otra.
3. Hallar los operadores de permutación T_i .
4. Hallar los operadores K_b que conviertan un estado de referencia $|\phi_{r_i}\rangle$ de cada grupo en un mismo estado de referencia $|b\rangle$ de la base computacional.
5. Hallar el operador de reflexión D .
6. Construir el operador de difusión a partir del circuito de la figura 1.3.

Loke y Wang sólo muestran como realizar K_i para unos pocos casos particulares de caminatas cuánticas de Szegedy que utilizan como ejemplo en su paper. En este trabajo mostramos cómo realizar cualquier K_i para caminatas cuánticas de Szegedy asociadas a grafos de cuatro nodos.

Todos los coeficientes de los estados involucrados en el algoritmo de PageRank son reales positivos o cero. Es decir, que los qubits individuales que forman estos estados pertenecen todos al arco de semicircunferencia que va de $+\hat{z}$ a $-\hat{z}$ pasando por $+\hat{x}$. Esto indica que los operadores K_i deben poder construirse a partir de compuertas $Ry(\theta)$ y compuertas $Ry(\theta)$ condicionadas tomando $0 \leq \theta \leq \pi$.

En lo que sigue se considerará $|b\rangle = |0\rangle$ y que los grafos son de cuatro nodos. De esta manera, podemos asumir que

$$K_i = CRy_n(0, 1, \theta_{11})CRy_b(0, 1, \theta_{10})Ry(0, \theta_{00}) \quad (7.7)$$

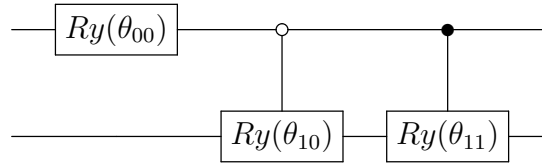


FIGURA 7.4: Circuito de K_i

Entonces, para hallar K_i , debemos resolver la siguiente ecuación y hallar $\theta_{11}, \theta_{10}, \theta_{00}$

$$CRy_n(0, 1, \theta_{11})CRy_b(0, 1, \theta_{10})Ry(0, \theta_{00}) |0\rangle = |\phi_{r_i}\rangle \quad (7.8)$$

Sin embargo, esto conduce a un sistema de cuatro ecuaciones y tres variables. Para poder resolver este sistema por métodos numéricos se modifica la ecuación de la siguiente manera, sabiendo que θ_x debe ser $n2\pi$, donde n es entero.

$$\cos\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = \sqrt{G_1} \quad (7.9)$$

$$\cos\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = \sqrt{G_2} \quad (7.10)$$

$$\cos\left(\frac{\theta_{11}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) = \sqrt{G_3} \quad (7.11)$$

$$\sin\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{11}}{2}\right) = \sqrt{G_4} \quad (7.12)$$

Esto se puede solucionar recordando la normalización de los estados cuánticos y de las matrices estocásticas, entonces, sabemos que $G_4 = 1 - (G_1 + G_2 + G_3)$. Por lo que podemos reducir el sistema de ecuaciones a un de tres variables

$$\cos\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = \sqrt{G_1} \quad (7.13)$$

$$\cos\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = \sqrt{G_2} \quad (7.14)$$

$$\cos\left(\frac{\theta_{11}}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) = \sqrt{G_3} \quad (7.15)$$

Sumando 1.13 y 1.14, y aplicando $\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1$, se tiene:

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = G_1 \quad (7.16)$$

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) = G_1 + G_2 \quad (7.17)$$

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{11}}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) = G_3 \quad (7.18)$$

Ahora, sustituyendo 1.17 en 1.16 y 1.18, y volviendo a aplicar la misma propiedad trigonométrica, se tiene:

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{10}}{2}\right) = \frac{G_1}{G_1 + G_2} \quad (7.19)$$

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{00}}{2}\right) = G_1 + G_2 \quad (7.20)$$

$$\cos^2\left(\frac{\theta_{11}}{2}\right) = \frac{G_3}{1 - (G_1 + G_2)} \quad (7.21)$$

Finalmente, se tiene que los ángulos de las rotaciones deben ser:

$$\theta_{00} = 2 \cos^{-1} \left(\sqrt{G_1 + G_2} \right) \quad (7.22)$$

$$\theta_{10} = 2 \cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{G_1}{G_1 + G_2}} \right) \quad (7.23)$$

$$\theta_{11} = 2 \cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{G_3}{1 - (G_1 + G_2)}} \right) \quad (7.24)$$

7.7. Simulaciones

Se han realizado simulaciones del algoritmo de PageRank con un grafo estrella, un grafo corona, un grafo árbol y un grafo aleatorio, todos de cuatro nodos. Se han realizado simulaciones con y sin pérdidas. El código de las simulaciones se encuentra en el apéndice [G](#).

7.7.1. Grafo estrella

En la figura [1.5](#) se observa el grafo estrella utilizado para esta simulación. Este grafo es simétrico, por lo tanto, su matriz de adyacencia es hermítica. Este no es el caso, sin embargo, una vez convertimos el grafo en uno ponderado. La matriz estocástica E no es hermítica, y por extensión la matriz de Google tampoco lo es.

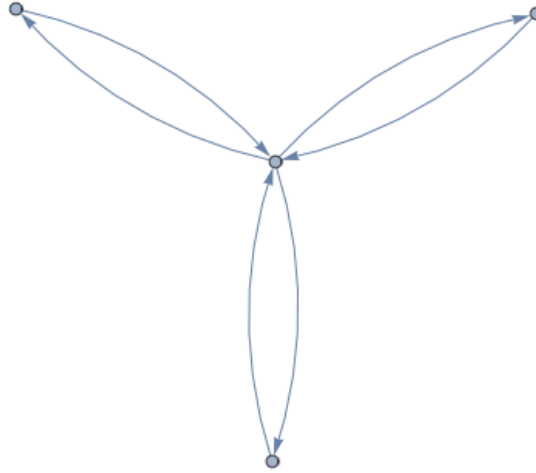


FIGURA 7.5: Grafo estrella

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.25)$$

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

$$G = \begin{pmatrix} \frac{3}{80} & \frac{71}{80} & \frac{71}{80} & \frac{71}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} \end{pmatrix} \quad (7.27)$$

Los tres nodos exteriores de este grafo, además, forman lo que hemos llamado un subgrafo cíclico, por lo que para este grafo necesitaremos dos operadores K_b , unos para estos tres nodos y otro para el nodo central. Las figuras 1.6 - 1.11 muestran cómo construir el circuito del operador de difusión de la caminata de Szegedy asociada a la matriz de Google de este grafo.

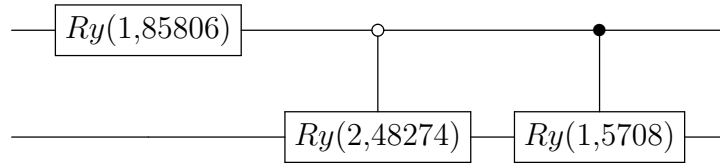


FIGURA 7.6: Circuito de K_1 para el grafo estrella

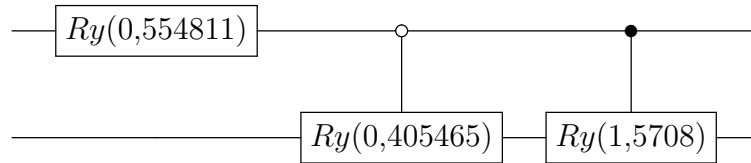


FIGURA 7.7: Circuito de K_2 para el grafo estrella

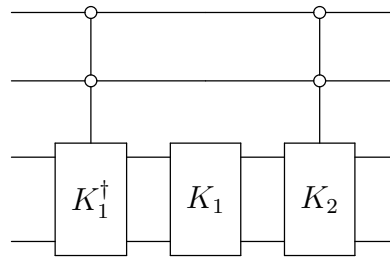


FIGURA 7.8: K_b del grafo estrella

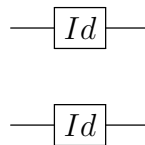


FIGURA 7.9: T del grafo estrella

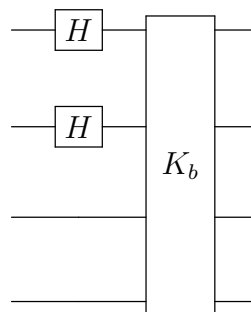


FIGURA 7.10: Preparación del estado inicial para la caminata en el grafo estrella

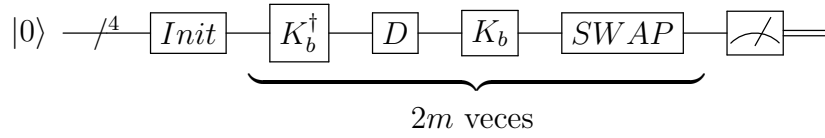


FIGURA 7.11: Circuito del PageRank cuántico del grafo estrella

En la figura 1.12 se puede observar la gráfica del PageRank cuántico instantáneo sin relajación. En esta figura se puede observar claramente la naturaleza sinusoidal de este algoritmo, por estar basado en reflexiones. Como se puede observar, ambas figuras son bastante similares. La diferencia está en que en el caso de la simulación matemática, el PageRank cuántico de los tres nodos exteriores se solapan perfectamente, mientras que en la simulación circuital, no. Esto se debe a la limitada precisión numérica del solucionador de ecuaciones maestras.

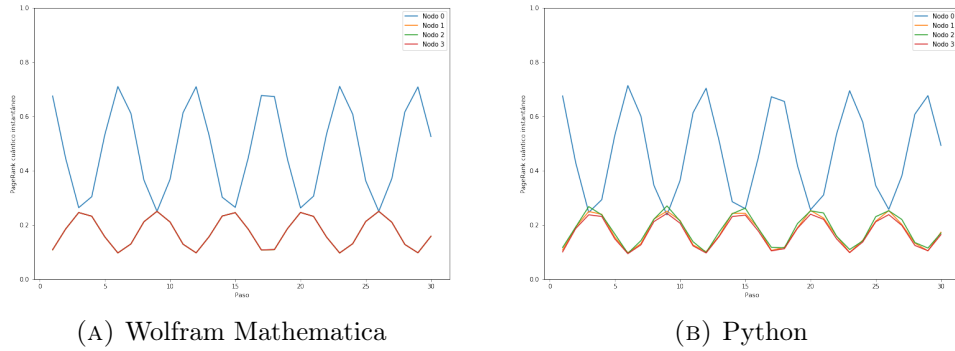


FIGURA 7.12: PageRank cuántico instantáneo del grafo estrella sin pérdidas

En el caso del PageRank promedio, en la figura 1.13 podemos ver cómo este valor sí converge, a diferencia del PageRank instantaneo, el cuál oscila alrededor del valor de convergencia del PageRank promedio.

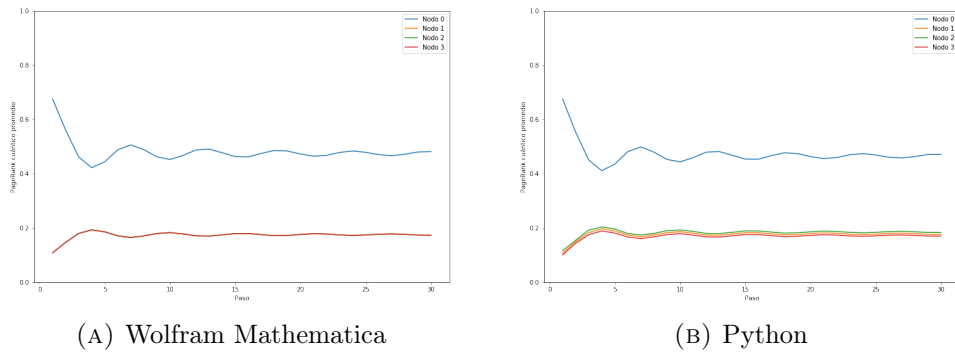


FIGURA 7.13: PageRank cuántico promedio del grafo estrella sin pérdidas

Ahora, compararemos los resultados de la simulación circuital con y sin pérdidas. Como se puede ver en la figura (FIGURA), en el caso con pérdidas, $\langle ++ \rangle$

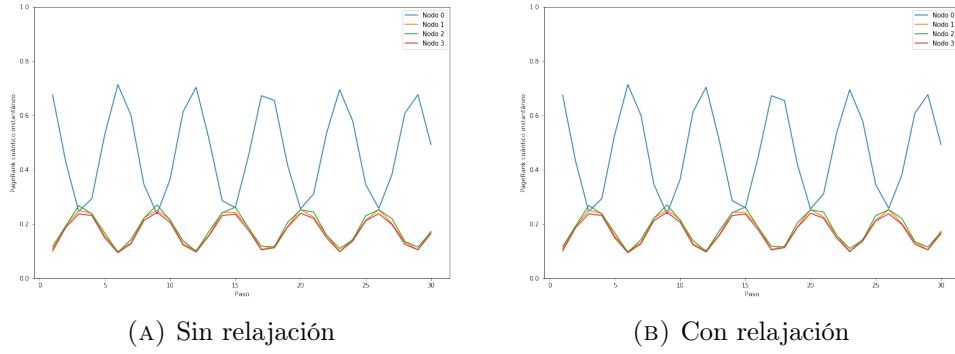


FIGURA 7.14: PageRank cuántico instantáneo del grafo estrella con y sin pérdidas

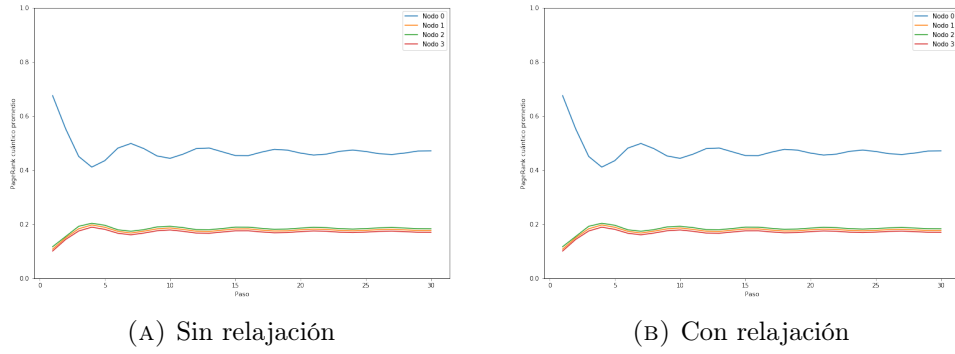


FIGURA 7.15: PageRank cuántico promedio del grafo estrella con y sin pérdidas

7.7.2. Grafo corona

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.28)$$

$$E = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.29)$$

$$G = \begin{pmatrix} \frac{3}{80} & \frac{77}{240} & \frac{77}{240} & \frac{1}{4} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{77}{240} & \frac{1}{4} \\ \frac{77}{240} & \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{1}{4} \\ \frac{77}{240} & \frac{77}{240} & \frac{77}{240} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.30)$$

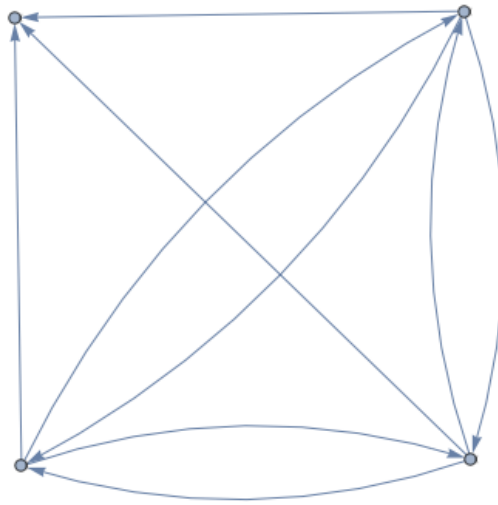
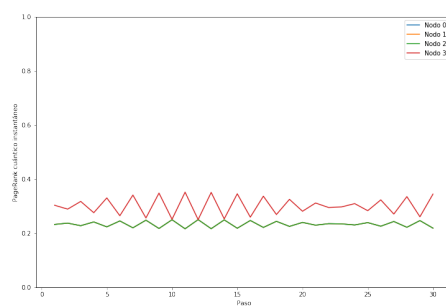
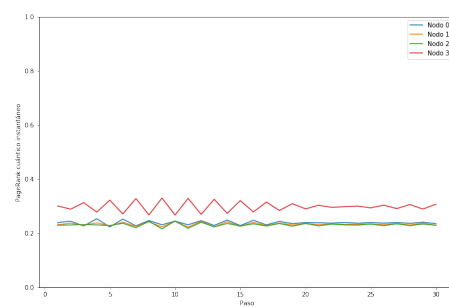


FIGURA 7.16: Grafo corona



(A) Wolfram Mathematica



(B) Python

FIGURA 7.17: PageRank cuántico instantáneo del grafo corona sin pérdidas

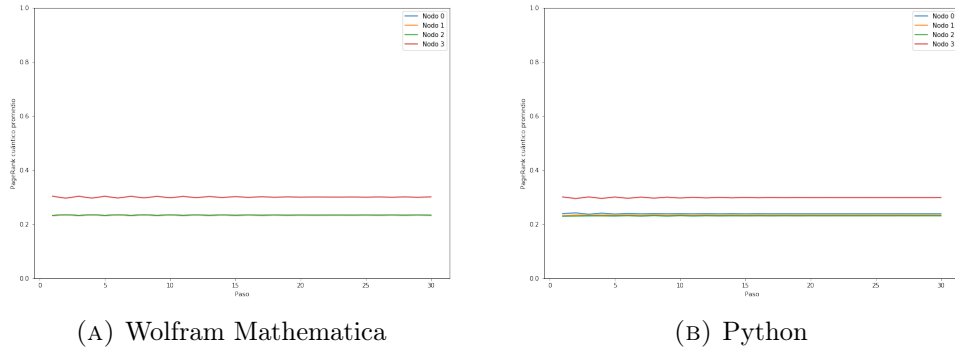


FIGURA 7.18: PageRank cuántico promedio del grafo corona sin pérdidas

7.7.3. Grafo árbol

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.31)$$

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.32)$$

$$G = \begin{pmatrix} \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{37}{80} & \frac{3}{80} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{37}{80} & \frac{3}{80} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{3}{80} & \frac{71}{80} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (7.33)$$

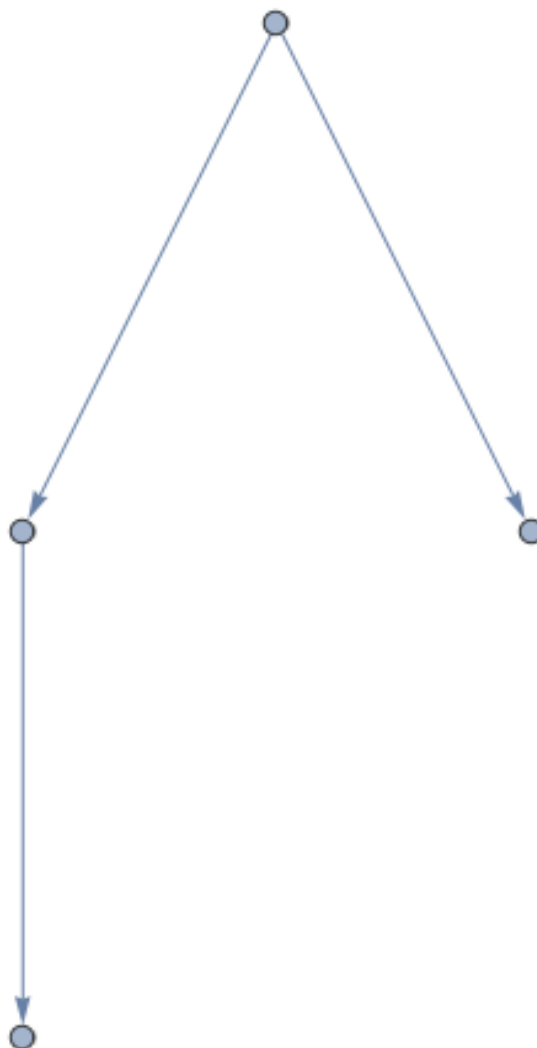
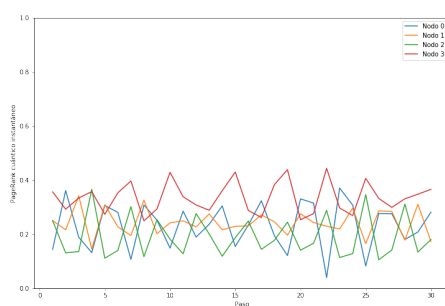
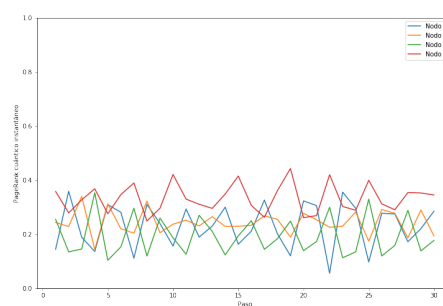


FIGURA 7.19: Grafo árbol



(A) Wolfram Mathematica



(B) Python

FIGURA 7.20: PageRank cuántico instantáneo del grafo árbol sin pérdidas

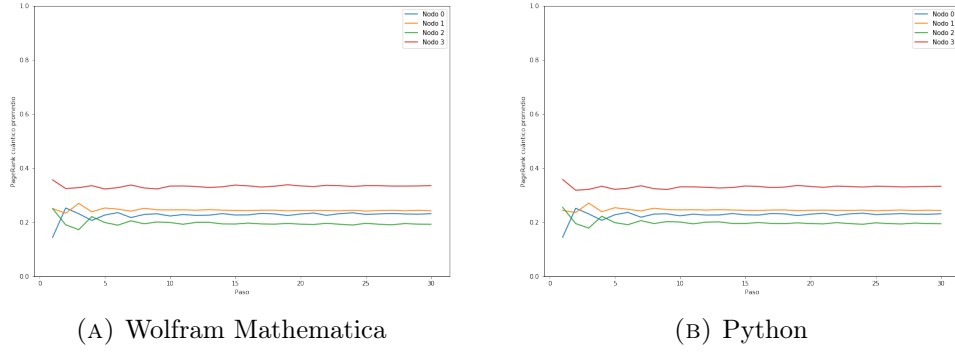


FIGURA 7.21: PageRank cuántico promedio del grafo árbol sin pérdidas

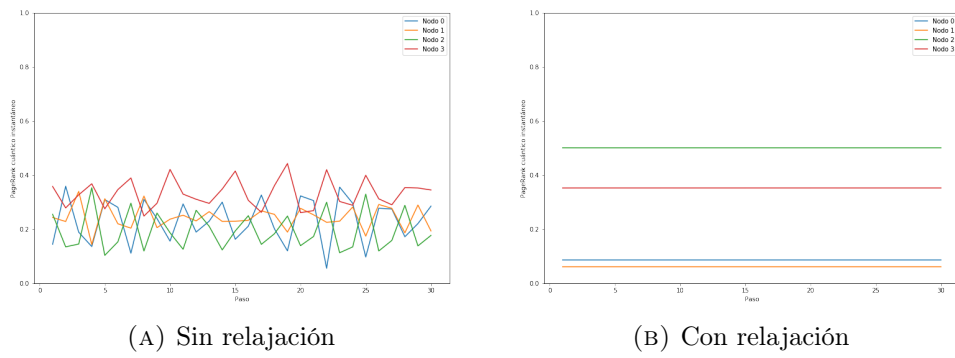


FIGURA 7.22: PageRank cuántico instantaneo del grafo árbol con y sin pérdidas

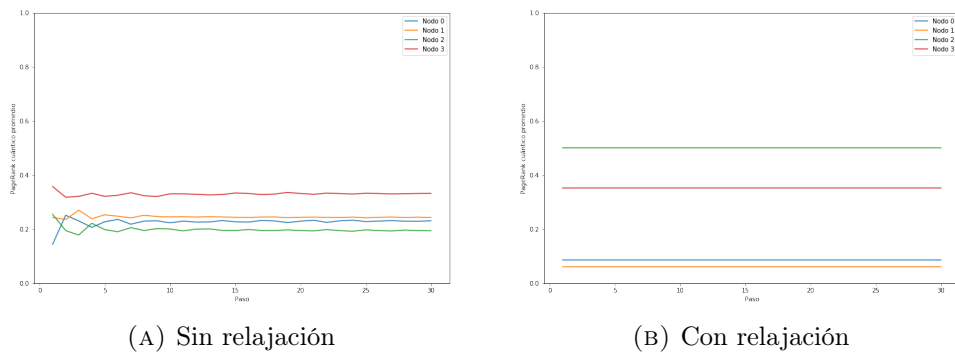


FIGURA 7.23: PageRank cuántico promedio del grafo árbol con y sin pérdidas

7.7.4. Grafo aleatorio

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.34)$$

$$E = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.35)$$

$$G = \begin{pmatrix} \frac{3}{80} & \frac{37}{80} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{3}{80} & \frac{3}{80} & \frac{71}{80} \\ \frac{77}{240} & \frac{37}{80} & \frac{71}{80} & \frac{3}{80} \end{pmatrix} \quad (7.36)$$

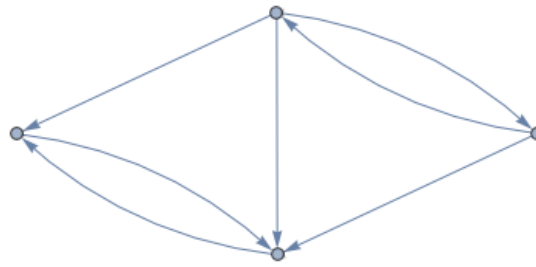
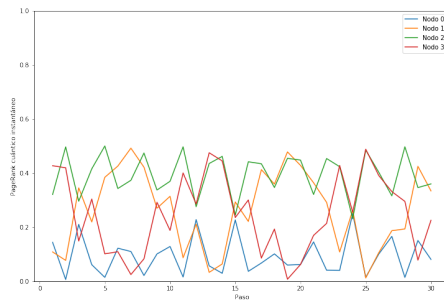
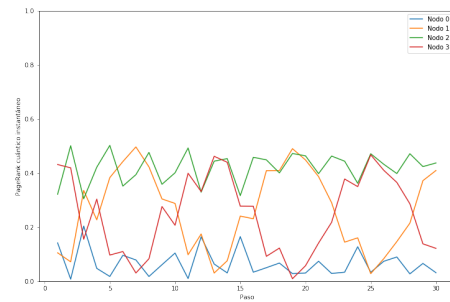


FIGURA 7.24: Grafo aleatorio

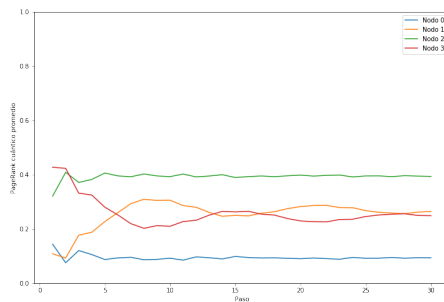


(A) Wolfram Mathematica

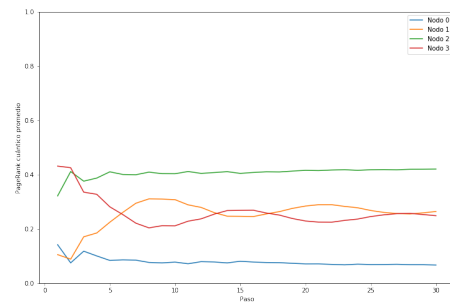


(B) Python

FIGURA 7.25: PageRank cuántico instantáneo del grafo aleatorio sin pérdidas



(A) Wolfram Mathematica



(B) Python

FIGURA 7.26: PageRank cuántico promedio del grafo aleatorio sin pérdidas

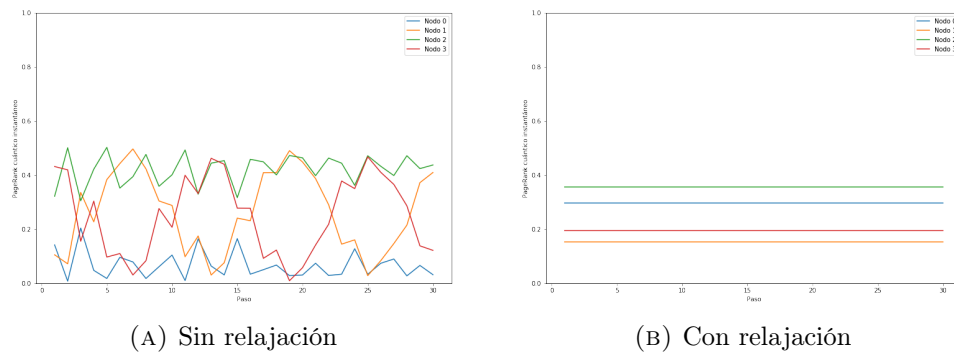


FIGURA 7.27: PageRank cuántico instantáneo del grafo aleatorio con y sin pérdidas

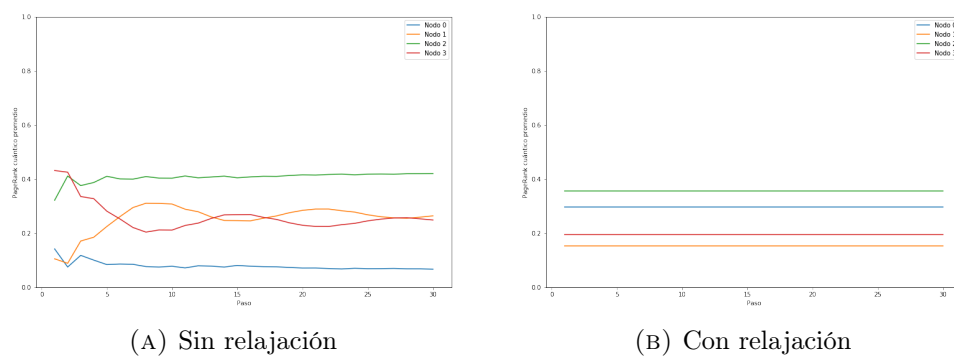


FIGURA 7.28: PageRank cuántico promedio del grafo aleatorio con y sin pérdidas

Bibliografía

- [1] Adriano Barenco, Charles H. Bennet, Richard Cleve, David P. DiVincenzo, Norman Margolus, Peter Shor, Tycho Sleator, Jhon A. Smolin, and Harald Weinfurter. Elementary gates for quantum computation. *Physical Review A*, 1995.
- [2] Sttiwuer Díaz-Solórzano. Esquemas de medidas. *QIC*, 2014.
- [3] Rudolf Gross and Achim Marx. Applied superconductivity: Josephson effect and superconducting electronics. *Walther-Meißner-Institut*, 2005.
- [4] Onnes H.K. Further experiments with liquid helium. g. on the electrical resistance of pure metals, etc. vi. on the sudden change in the rate at which the resistance of mercury disappears. *Springer, Dordrecht*, 1911.
- [5] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*, 525:73–76, 2015.
- [6] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review Journals Archive*, 1957.
- [7] Herbert Fröhlich. Theory of the superconducting state. *Unknown*, 1950.
- [8] M Cyrot. Ginzburg-landau theory for superconductors. *Reports on Progress in Physics*, 36(2):103, 1973.
- [9] Jr. Bascom S. Deaver and William M. Fairbank. Experimental evidence for quantized flux in superconducting cylinders. *Physical Review Letters*, 1961.
- [10] B.D. Josephson. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, 1(7):251 – 253, 1962.
- [11] P. W. Anderson and J. M. Rowell. Probable observation of the josephson superconducting tunneling effect. *Phys. Rev. Lett.*, 10:230–232, Mar 1963.

-
- [12] Sidney Shapiro. Josephson currents in superconducting tunneling: The effect of microwaves and other observations. *Phys. Rev. Lett.*, 11:80–82, Jul 1963.
 - [13] G. Wendin. Quantum information processing with superconducting circuits: a review. *IOP Science*, 2017.
 - [14] Alexandre Blais, Jay Gambetta, A. Wallraff, D. I. Schuster, S. M. Girvin, M. H. Devoret, , and R. J. Schoelkopf. Quantum-information processing with circuit quantum electrodynamics. *Physical Review A*, 2007.
 - [15] Norbert Schuch and Jens Siewert. Natural two-qubit gate for quantum computation using the xy interaction. *Physical Review A*, 2003.
 - [16] T. Loke and J.B. Wang. Efficient quantum circuits for szegedy quantum walks. *Annals of Physics*, 382:64 – 84, 2017.