



Budapest University of Technology and Economics
Faculty of Electrical Engineering and Informatics
Department of Computer Science and Information Theory

Simulation of quantum walks on a classical computer

Scientific Students' Association Report

Author:

Viktória Nemkin

Advisor:

dr. Katalin Friedl

2021

Contents

Kivonat	i
Abstract	ii
1 Introduction	1
2 Egyenletek	2
2.1 Tenzorszorzás	2
2.1.1 Azonosságai	2
2.2 Unitér mátrixok	2
2.3 Kvantumséta a rácson	3
2.4 Példa	4
Acknowledgements	8
Bibliography	9
Appendix	10
A.1 Első függelék	10
A.2 Második függelék	11

Notes

■ Ezt a Wikipedia-ról szedtem, hivatkozni: https://en.wikipedia.org/wiki/Unitary_matrix 2

Kivonat

Az utóbbi években egyre nagyobb figyelem összpontosul a kvantuminformatikára. Olyan globális vállalatok, mint az IBM, a Google, a Microsoft és az Amazon jelentős összegeket fektetnek kutatásba, hardver- és szoftverfejlesztésekbe ezen a területen, míg az Európai Unió és Magyarország számos olyan programot indított, melyek a kvantuminformatikai kutatások fellendítését célozzák meg.

A jelenlegi kvantumszámítógépekben elérhető qubitek (kvantumbitek) mennyisége még csekély, de sokan úgy vélik hogy a jövőben ez a szám növekedni fog. Az első olyan, a gyakorlatban is hasznos kvantumalgoritmusok, amiket ezeken a processzorokon futtatni tudunk majd, várhatóan azok lesznek, melyek takarékosan bánnak a rendelkezésre álló qubitekkel. A kvantumséta, mely a klasszikus véletlen bolyongás általánosítása kvantumos esetben, pontosan ilyen algoritmus. Mivel a qubit igénye a gráf csúcsszámában logaritmikus, így ez egy érdekes módszernek ígérkezik akár a közeljövőre nézve is. A kvantumséták erejét bizonyítja, hogy a Grover keresés (mely több kvantumalgoritmus alapját képezi) is értelmezhető ezek egy speciális fajtájának.

Dolgozatomban leírom a kvantumséták matematikai alapjait, részletezve a megvalósítás szempontjából fontos pontokat, melyek a szakirodalomban kisebb hangsúllyal szerepelnek. Ismertetem az általam írt szimulátor program architektúráis felépítését és működését, továbbá a futtatott szimulációim eredményeit.

A szimulátor programot Python 3 nyelven írtam, a Stratégia tervezési minta alapján. A szakirodalomban tipikusan használt gráfokat beépítetten támogatja, melyek kombinálásával tetszőlegesen bonyolult reguláris gráf előállítható, ez az előállítás képezi a kvantumséta alapját is. A szoftver reguláris gráfokon történő kvantum és klasszikus séták szimulációját teszi lehetővé, az eredményekről pedig egy részletes report fájlt generál. A kvantumos séták esetében a séta tulajdonságai a valószínűségek generálásához felhasznált érmétől is függnek, melyet többféleképpen is lehet definiálni. A program beépítetten tartalmazza az Hadamard-, a Grover- és a Fourier-érmeket, de felépítéséből adódóan könnyen bővíthető tetszőleges érmevel is.

Szimulációim segítségével összehasonlítottam a klasszikus és a kvantum séták viselkedését, továbbá kimutattam az elméleti szakirodalom alapján elvárt kvantumos jellegzetességeket, az Hadamard-séta ballisztikus természetét és a kvantumséták ciklikus tulajdonságát.

Abstract

In recent years, there has been an increasing focus on quantum informatics. Influential global companies such as IBM, Google, Microsoft, and Amazon have invested significant amounts into studying and developing hardware and software for this sector, while the European Union and Hungary have launched several programs to accelerate quantum research.

Current technology is yet to produce a significant number of qubits (quantum bits) in a quantum processor, but many believe the amount will increase over the years. The first practical quantum algorithms to be run on these processors are likely to be the ones that use qubits sparingly. Quantum walking, the generalized version of classical random walking, is exactly this kind of algorithm. The number of qubits required to run a quantum walk on a graph is logarithmic in the number of vertices, making it a promising technique for the near future. Furthermore, Grover's search algorithm (a basis for many quantum algorithms) can be viewed as a special case of quantum walks, which illustrates the potential power of this method.

In my dissertation, I present the mathematical framework for quantum walks, detailing the points critical for implementation, which are given less emphasis in the literature. I describe the architecture and capabilities of the simulator program I have written and the conclusions of the simulations I have run.

I developed the software using Python 3, based on the Strategy design pattern. It supports graphs commonly found in the literature while also providing a method for combining them, facilitating experimentation on several kinds of regular graphs. This composition is also the foundation of the quantum walk. It can simulate classical and quantum walks on the same graphs and produce a report file detailing the results. In the quantum case, the characteristics of the walk are also dependent on the type of coin used to generate the probabilities, which can be defined in several ways. The program includes the Hadamard, Grover, and Fourier coins and can easily be extended with others.

Running several simulations, I compared the behavior of classical and quantum walks and demonstrated the quantum characteristics expected from the theoretical literature, the ballistic nature of the Hadamard walk, and the cyclic property of quantum walks.

Chapter 1

Introduction

A bevezető tartalmazza a diplomaterv-kiírás elemzését, történelmi előzményeit, a feladat indokoltságát (a motiváció leírását), az eddigi megoldásokat, és ennek tükrében a hallgató megoldásának összefoglalását.

A bevezető szokás szerint a diplomaterv felépítésével záródik, azaz annak rövid leírásával, hogy melyik fejezet mivel foglalkozik.

Chapter 2

Egyenletek

2.1 Tenzorszorzás

Definition 1. Tenzorszorzat Az $r \times s$ méretű A és $t \times u$ méretű B mátrixok $rt \times su$ méretű $A \otimes B$ tenzorszorzata a következőképpen definiált:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1s} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r1} & a_{r2} & \ddots & a_{rs} \end{pmatrix} \text{ és } B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1u} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2u} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{t1} & b_{t2} & \ddots & b_{tu} \end{pmatrix} \text{ esetén}$$
$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1s}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2s}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r1}B & a_{r2}B & \ddots & a_{rs}B \end{pmatrix}$$

2.1.1 Azonosságai

Theorem 1 (Asszociativitás).

$$(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C) \quad (2.1)$$

Theorem 2 (Disztibutivitás a mátrixszorzás felett). Ha A és C , illetve B és D kompatibilisek, akkor:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD) \quad (2.2)$$

Theorem 3 (Lemma: Egységmátrixok beolvadása).

$$(A_n \otimes I_m)(I_n \otimes B_m) = A_n \otimes B_m \quad (2.3)$$

2.2 Unitér mátrixok

Ezt a Wikipedia-ról szedtem, hivatkozni: https://en.wikipedia.org/wiki/Unitary_matrix

Definition 2. Unitary matrix A complex square matrix U is unitary if its conjugate transpose U^* is also its inverse, as in:

$$U^* U = U U^* = I \quad (2.4)$$

2.3 Kvantumséta a rácson

A következőkben a rácson, mint 4-reguláris gráfon vett bolyongást fogjuk részletesen megvizsgálni.

Legyen a rács $N = n \times n$ -es.

Pozíció vektor: $|P\rangle = (p_0, \dots, p_N)$, ahol $p_i \in \mathbb{C}$ ahol $0 \leq i < N$, $\forall i$ -re és $\sum_{i=0}^N |p_i|^2 = 1$.

$$|P_0\rangle = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0) \quad (2.5)$$

$$C = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{\sqrt{2}}\right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{\sqrt{2}}\right) \quad (2.6)$$

$$S_{\text{left}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Definition 3 (Kronecker delta). Olyan kétváltozós függvény ami akkor 1, ha a két változója egyenlő, egyébként 0.

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{ha } i \neq j \\ 1 & \text{ha } i = j \end{cases} \quad (2.8)$$

Definition 4 (Upper cyclic shift matrix). Az U_k mátrix egy olyan $(k \times k)$ -s mátrix, aminek a felső mellékátlóján és a bal alsó sarokban 1-esek vannak, máshol 0-k. Az index számozása moduló k történik. Ennek az i . sor, j . oszlopában:

$$U_k[i, j] = \delta_{(i+1), j} \quad (2.9)$$

Definition 5 (Lower cyclic shift matrix). Az L_k mátrix egy olyan $(k \times k)$ -s mátrix, aminek az alsó mellékátlóján és a jobb felső sarokban 1-esek vannak, máshol 0-k. Az index számozása moduló k történik. Ennek az i . sor, j . oszlopában:

$$L_k[i, j] = \delta_{i, j+1} \quad (2.10)$$

$$L = U^T \quad (2.11)$$

- Rács = két körnek a tenzorszorzata.
- Fel/le = mindig 1 sorral felette/alatta lévő (modulóval) van összekötve = n-el van elcsúsztatva.
- Függőlegesen számozva ugyanígy csak fordított elnevezések.
- Jobbra-balra = 1 távolság, kivéve sor végén, ahol a sor elejére ugrik = kis körök.
- Tenzorszorzás tulajdonságait előre kiszedni, műveletek, használatkor hivatkozni.
- Többsoros képleteknek csak 1 száma legyen.

2.4 Példa

$$n = 3 \quad (2.12)$$

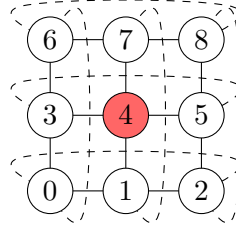


Figure 2.1: n=3-ös rács

$$N = n^2 = 9 \quad (2.13)$$

$$S_{\text{left}} = I_3 \otimes U_3 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$S_{\text{right}} = I_3 \otimes L_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

$$S_{\text{down}} = U_3^3 = U_3 \otimes I_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

$$S_{\text{up}} = L_3^3 = L_3 \otimes I_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$X_{\text{head}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$X_{\text{tail}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

$$S = (S_{\text{up}} S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{head}} \otimes X_{\text{head}}) + \quad (2.20)$$

$$(S_{\text{up}} S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{head}} \otimes X_{\text{tail}}) + \quad (2.21)$$

$$(S_{\text{down}} S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{head}}) + \quad (2.22)$$

$$(S_{\text{down}} S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{tail}}) \quad (2.23)$$

$$C_4 = H^{\otimes 2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

$$U = S(I_9 \otimes C_4) \quad (2.25)$$

$$U = ((S_{\text{up}}S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{head}} \otimes X_{\text{head}}) + \quad (2.26)$$

$$(S_{\text{up}}S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{head}} \otimes X_{\text{tail}}) + \quad (2.27)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{head}}) + \quad (2.28)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{tail}}))(I_9 \otimes C_4) \quad (2.29)$$

Definition 6 (Tenzorszorzás azonosság: mátrix szorzással disztibutív). Bal oldalt 9×9 -es, jobb oldalt 4×4 -es mátrixok vannak.

$$U = (S_{\text{up}}S_{\text{left}}) \otimes ((X_{\text{head}} \otimes X_{\text{head}})C_4) + \quad (2.30)$$

$$(S_{\text{up}}S_{\text{right}}) \otimes ((X_{\text{head}} \otimes X_{\text{tail}})C_4) + \quad (2.31)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{left}}) \otimes ((X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{head}})C_4) + \quad (2.32)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{right}}) \otimes ((X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{tail}})C_4) \quad (2.33)$$

$$C_4 = C_2 \otimes C_2 \quad (2.34)$$

$$U = (S_{\text{up}}S_{\text{left}}) \otimes ((X_{\text{head}} \otimes X_{\text{head}})(C_2 \otimes C_2)) + \quad (2.35)$$

$$(S_{\text{up}}S_{\text{right}}) \otimes ((X_{\text{head}} \otimes X_{\text{tail}})(C_2 \otimes C_2)) + \quad (2.36)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{left}}) \otimes ((X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{head}})(C_2 \otimes C_2)) + \quad (2.37)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{right}}) \otimes ((X_{\text{tail}} \otimes X_{\text{tail}})(C_2 \otimes C_2)) \quad (2.38)$$

Definition 7 (Tenzorszorzás azonosság: mátrix szorzással disztibutív).

$$U = (S_{\text{up}}S_{\text{left}}) \otimes (((X_{\text{head}}C_2) \otimes (X_{\text{head}}C_2))) + \quad (2.39)$$

$$(S_{\text{up}}S_{\text{right}}) \otimes (((X_{\text{head}}C_2) \otimes (X_{\text{tail}}C_2))) + \quad (2.40)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{left}}) \otimes (((X_{\text{tail}}C_2) \otimes (X_{\text{head}}C_2))) + \quad (2.41)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{right}}) \otimes (((X_{\text{tail}}C_2) \otimes (X_{\text{tail}}C_2))) \quad (2.42)$$

Definition 8 (Tenzorszorzás azonosság: asszociatív).

$$U = (S_{\text{up}}S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{head}}C_2) \otimes (X_{\text{head}}C_2) + \quad (2.43)$$

$$(S_{\text{up}}S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{head}}C_2) \otimes (X_{\text{tail}}C_2) + \quad (2.44)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{left}}) \otimes (X_{\text{tail}}C_2) \otimes (X_{\text{head}}C_2) + \quad (2.45)$$

$$(S_{\text{down}}S_{\text{right}}) \otimes (X_{\text{tail}}C_2) \otimes (X_{\text{tail}}C_2) \quad (2.46)$$

Definition 9 (Tenzorszorzás Lemma?).

$$S = ((S_{\text{up}} \otimes X_{\text{head}} \otimes I) + (S_{\text{down}} \otimes X_{\text{tail}} \otimes I))((S_{\text{left}} \otimes I \otimes X_{\text{head}}) + (S_{\text{right}} \otimes I \otimes X_{\text{tail}})) \quad (2.47)$$

Acknowledgements

Ez nem kötelező, akár törölhető is. Ha a szerző szükségét érzi, itt lehet köszönetet nyilvánítani azoknak, akik hozzájárultak munkájukkal ahhoz, hogy a hallgató a szakdolgozatban vagy diplomamunkában leírt feladatokat sikeresen elvégezze. A konzulensnek való köszönetnyilvánítás sem kötelező, a konzulensnek hivatalosan is dolga, hogy a hallgatót konzultálja.

Bibliography

- [1] Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Villamosmérnöki és Informatikai Kar. Diplomaterv portál (2011. február 26.). <http://diplomaterv.vik.bme.hu/>.
- [2] James C. Candy. Decimation for sigma delta modulation. 34(1):72–76, 01 1986. DOI: 10.1109/TCOM.1986.1096432.
- [3] Gábor Jeney. Hogyan néz ki egy igényes dokumentum? Néhány szóban az alapvető tipográfiai szabályokról, 2014. <http://www.mcl.hu/~jeneyg/kinezet.pdf>.
- [4] Peter Kiss. Adaptive digital compensation of analog circuit imperfections for cascaded delta-sigma analog-to-digital converters, 04 2000.
- [5] Wai L. Lee and Charles G. Sodini. A topology for higher order interpolative coders. In *Proc. of the IEEE International Symposium on Circuits and Systems*, pages 459–462, 05 4–7 1987.
- [6] Alexey Mkrtychev. Models for the logic of proofs. In Sergei Adian and Anil Nerode, editors, *Logical Foundations of Computer Science*, volume 1234 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 266–275. Springer Berlin Heidelberg, 1997. ISBN 978-3-540-63045-6. DOI: 10.1007/3-540-63045-7_27. URL http://dx.doi.org/10.1007/3-540-63045-7_27.
- [7] Richard Schreier. *The Delta-Sigma Toolbox v5.2*. Oregon State University, 01 2000. <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/>.
- [8] Ferenc Wettl, Gyula Mayer, and Péter Szabó. *L^AT_EX kézikönyv*. Panem Könyvkiadó, 2004.

A.1 Első függelék



A.2 Második függelék

A Pitagorasz-tételből levezetve

$$c^2 = a^2 + b^2 = 42. \quad (\text{A.2.1})$$

A Faraday-indukciós törvényből levezetve

$$\text{rot } E = -\frac{dB}{dt} \quad \longrightarrow \quad U_i = \oint_{\mathbf{L}} \mathbf{E} d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \int_A \mathbf{B} d\mathbf{a} = 42. \quad (\text{A.2.2})$$