



## Memoria das prácticas externas do Grao de Física

Roberto Losada García 5 de octubre de 2022

Titor da empresa: Andrés Gómez Tato Titor académico: José Manuel Sánchez de Santos

## Índice

1.	Dat	os pers	oais do estudante	2
2.	Enti	idade co	olaboradora	2
	2.1.	Datos d	la entidade	2
	2.2.	Datos d	lo titor da entidade	2
	2.3.	Calenda	ario e horario de realización das prácticas	2
3.	Mer	noria d	as actividades	3
	3.1.	Estrutu	ra desentrelazadora	4
	3.2.	Función	i de custo $\dots$	6
	3.3.	Optimiz	zación da función de custo	7
	3.4.	Factoriz	zación do operador QFT	11
		3.4.1.	2 qubits: descomposición con portas CZ	11
		3.4.2.	2 qubits: descomposición con portas CNOT	13
		3.4.3.	3 qubits: descomposición con portas CZ	15
			3.4.3.1. Configuración 1	15
			3.4.3.2. Configuración 2	17
		3.4.4.	3 qubits: descomposición con portas CNOT	19
	3.5.	Conclus	sións e posibles futuras continuacións	21
4.	Con	exión d	o Grao en Física coas prácticas	22
<b>5.</b>	Valo	oración	das prácticas	23
6.	Ane	xo		24
	6.1.	Portas	cuánticas de 1 e 2 qubits fundamentais	24
	6.2.	Conven	ción de significación para qubits de QisKit	26
	6.3.	Transfo	rmada de Fourier Cuántica (QFT)	26
	6.4.	Reposit	orio cos notebooks de Python e demais ficheiros de utilidade	28
$R\epsilon$	efere	ncias		29

## 1. Datos persoais do estudante

• Nome e apelidos: Roberto Losada García

■ DNI: 32720239W

■ Enderezo: Rúa República Arxentina, 49, 3ºB, Ferrol (A Coruña)

■ Teléfono: 618449712

■ Email: roberto.losada@rai.usc.es // robertolosada@hotmail.es

• Estudos: Dobre grao en matemáticas e física na USC (4º ano)

#### 2. Entidade colaboradora

Realicei as prácticas externas na Fundación Pública Galega Centro Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia (CESGA)

#### 2.1. Datos da entidade

O CESGA é o centro de cálculo, comunicacións de altas prestacións e servizos avanzados da Comunidad Científica Galega, do Sistema Académico Universitario e do Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC).

A súa misión é contribuír ao avance da ciencia e da tecnoloxía a través da investigación e aplicación da computación así como outros recursos das tecnoloxías da información en colaboración con múltiples institucións na procura do beneficio da sociedade.

O edificio do CESGA atópase na Avenida de Vigo no interior do Campus Sur da Universidade de Santiago de Compostela. Para máis información pode consultarse a súa páxina web [1].

#### 2.2. Datos do titor da entidade

O meu titor na entidade foi Andrés Gómez Tato, administrador do departamento de aplicacións e proxectos.

#### 2.3. Calendario e horario de realización das prácticas

O período de prácticas foi dende o venres 3 de Xuño de 2022 ata o mércores 6 de Xullo de 2022 cun horario de traballo aproximado dende as 8:00 ata as 15:00 horas (7 horas diarias ata cumplimentar as 150 horas lectivas establecidas pola descrición do programa de práticas externas).

Cómpre salientar que a complexidade do proxecto levado a cabo débese en certa medida á ausencia tanto por parte do titor coma miña debida á COVID-19 que fundamentalmente ralentizou o desenvolvemento de proxecto. Ademais, o 5 de Xullo, eu comezaba cunha beca no IGFAE, polo que non foi posible extender máis o período de prácticas.

#### 3. Memoria das actividades

No crecente mundo da computación cuántica, coa continua aparición de algoritmos e novas técnicas é frecuente atopar operadores que actúan sobre múltiples canles cuánticas e cuxa implementación é altamente complicada de realizar ou mesmo require do uso de moitas portas cuánticas. Consecuentemente, a descomposición de operadores arbitrarios unitarios en portas cuánticas máis sinxelas que poidan reproducir de xeito aproximado o comportamento destes é unha área de investigación de gran e crecente interés dentro do marco da computación cuántica.

Entre as principais vantaxes da factorización e descomposición de operadores máis complexos en portas cuánticas máis sinxelas se atopan a posibilidade de redución da profundidade cuántica dos circuítos e o alixeiramento do custo de simulacións.

Neste proxecto de prácticas, centrarémonos en particular na factorización do operador unitario correspondente á transformada de Fourier cuántica<sup>1</sup> (QFT) debido á grande utilidade e importancia que ten, por exemplo, en algoritmos [2] como a Quantum Phase Estimation ou o algoritmo de Shor cuántico.

A idea principal será construir un operador aproximado conformado polo menor número posible de portas cuánticas sinxelas<sup>2</sup> que reproduza o comportamento do operador QFT ao seren aplicado sobre calquera tipo de estado inicial.

Existen multitude de algoritmos e resultados que permiten factorizar operadores unitarios arbitrarios [3-5] en termos de portas cuánticas de rotacións e portas controladas CNOT e CZ principalmente. É importante mencionar a existencia de cotas inferiores teóricas establecidas, por exemplo para o número de portas CNOT necesarias (1), que moitos procedementos de descomposición non saturan [6].

$$N_{theo}(n) = \left\lceil \frac{1}{4} \left( 4^n - 3n - 1 \right) \right\rceil \quad (1) \qquad \frac{n \, (\text{n}^0 \, \text{de qubits}) \, 2 \, 3 \, 4 \, 5}{N_{theo}(n) \, 3 \, 14 \, 61 \, 252}$$

Sen embargo, no caso do operador da QFT (para n qubits), pode ser implementado nun circuíto cuántico consistente en  $O(n^2)$  portas cuánticas [7], polo que dito límite superior será o que buscaremos reducir á hora de buscar un operador aproximado.

Hai que mencionar que existen procedementos fundamentados na eliminación de portas de fase controladas que introduzcan factores moi pequenos [8], que permiten reducir aínda

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Consultar a sección 6.3 para ver unha breve descrición da transformada de Fourier cuántica (QFT).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Consultar sección 6.1 para ver máis información acerca dalgunhas das principais portas cuánticas.

máis a cota ata  $O(n \log n)$ . En consecuencia, plantexamos inicialmente unha restrición á cota O(n) coa intención de poder chegar a intentar reducila ata  $O(n \log n)$ . Malia non ter éxito nesto último principalmente polas limitacións que expoñemos na memoria do procedemento usado, conseguimos mellorar a cota de  $O(n^2)$  tanto para 2 coma 3 qubits.

A continuación, pasaremos a describir a idea principal e o procedemento algorítmico que se recolle en [5, 9], no que nos baseamos e que buscamos reproducir para o caso concreto da QFT. Cómpre salientar que a implementación do algoritmo descrita nestas referencias está recollida nun repositorio de libre acceso condensada nun paquete denominado SQUANDER creado polos autores. Este procedemento é capaz de achegarse moito aos límites inferiores teóricos mencionados logrando descompoñer operadores arbitrarios de 3 qubits con 15 CNOTs, de 4 qubits con 63 CNOTs e de 5 qubits con 267 CNOTs.

#### 3.1. Estrutura desentrelazadora

A idea principal descrita en [5, 9] consiste en desentrelazar todos os qubits do estado que se forma ao aplicar o operador unitario arbitrario a factorizar U, sobre o estado inicial (inicializado por defecto a  $|0...0\rangle$ ).

Para levar a cabo o proceso de desentrelazamento, selecciónase un qubit, por simplicidade<sup>3</sup> na nosa implementación o menos ou máis significativo<sup>4</sup>. A idea principal en combinar
capas ou *layers* conformadas por unha porta controlada CNOT ou CZ seguidas de rotacións actuando sobre un único qubit en ambos canles cuánticos sobre os que actúa a porta
controlada. Estas *layers* son as unidades ou bloques mínimos estruturais que estarán parametrizados a priori por 6 parámetros (3 para cada rotación arbitraria situada en cada canle
cuántica na que actúa a porta controlada).

Non obstante, pódese reducir o número de parámetros de cada layer a un total de 4 tendo en conta que unha rotación arbitraria actuando sobre un único qubit pode ser descomposta como combinacións da forma  $R_z R_y R_z$  ou  $R_x R_y R_x$  e usando o feito de que as portas  $R_z$  e  $R_x$  conmutan [10] co qubit de control e controlado da porta CNOT respectivamente.

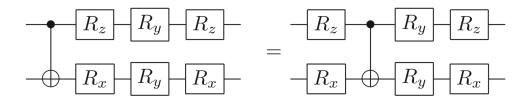


Figura 1: Simplificación sobre a estructura das layers.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Adicionalmente menciónase como o algoritmo poderíase adapatar á unha topoloxía concreta dun computador cuántico se fose necesario, por exemplo seguindo un orden de preferencia de desentrelazamento.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Consultar sección 6.2 para ver en detalle.

Notar que no caso de utilizar como porta controlada a CZ, basta con usar a descomposición das rotacións en  $R_z R_y R_z$  dúas veces e tense que a porta  $R_z$  conmuta con ambas canles cuánticas sobre as que actúa a CZ de xeito totalmente análogo ao caso previamente exposto. De agora en adiante razoarase e exemplificarase usando unha porta controlada tanto CNOT como CZ, tendo en conta que ambas son intercambiables facendo os pertinentes reaxustes na parte de rotacións.

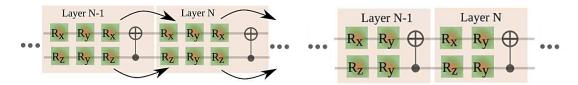


Figura 2: Simplificación en cadea de sucesivas layers para o caso de 2 qubits (Imaxe recollida en [6]).

Utilizando a simplificación descrita podemos reducir notablemente a complexidade das layers cuxa utilidade será a de desentrelazar un qubit dos demais. O qubit a desentrelazar será no que se sitúe o control das portas controladas CNOT das diferentes layers, mentres que a canle correspondente ao qubit controlada percorrerá os restantes qubits dos que se pretende desentrelazar o qubit de control.

Denominaremos como ciclo de desentrelazamento ao conxunto de k layers que desentrelazam o qubit de control escollido dos restantes k qubits. Estos ciclos deberán iterarse de xeito continuado ata producirse desentrelazamento do devandito qubit de control; i.e., requírense un certo número de ciclos para que sexa posible acadar o desentrelazamento.

Na seguinte imaxe ilústrase un exemplo de estrutura desentrelazadora de N capas totais<sup>5</sup> na que se desentrelaza coas N – 3 primeiras layers<sup>6</sup> o qubit  $|q_2\rangle$  dos restantes qubits  $|q_1q_0\rangle$  e despois coas restantes layers<sup>7</sup> se desentrelaza o qubit  $|q_1\rangle$  do último,  $|q_0\rangle$ . Notar a aparición dunha última capa de rotacións arbitrarias denotadas como U3 cuxo obxectivo<sup>8</sup> é devolver o sistema ao estado inicial.

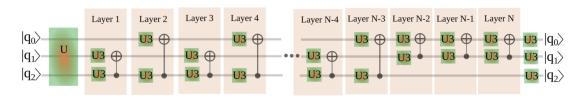


Figura 3: Exemplo de estructura de N layers ou capas totais (Imaxe recollida en [6]).

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Notar que na imaxe 3 as rotacións aparecen como U3; isto é, rotacións arbitrarias tridimensionais, aínda que chegaría con usar as simplificacións xa descritas que se ven na imaxe 2.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>As capas ou layers da 1 á N - 2 pódense pensar como que cada dúas conforman un ciclo, habendo así un total de  $\frac{N-2}{2}$  ciclos.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Enténdese que cada ciclo é en si unha layer no caso de desentrelazar 2 qubits.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>A construción do operador aproximado non pode depender do estado inicial e debe reproducir o comportamento do operador a factorizar U dado calquera estado inicial.

#### 3.2. Función de custo

Para poder lograr o desentrelazamento dun qubit dos demais constrúese unha función de custo a minimizar. Denotando por  $\overline{U}$  ao resultado de aplicar a estrutura desentrelazadora de N capas<sup>9</sup> descrita previamente sobre o operador unitario a factorizar U, podémolo organizar por bloques como segue:

 $\overline{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{U}}_{00} & \overline{\mathbf{U}}_{01} \\ \overline{\mathbf{U}}_{10} & \overline{\mathbf{U}}_{11} \end{pmatrix} \tag{2}$ 

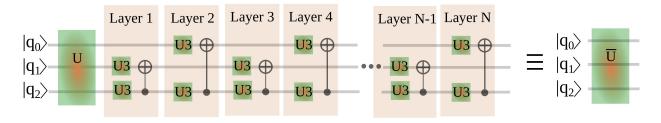


Figura 4: Esquema representativo da parte da estrutura desentrelazadora que denotamos como porta cuántica ou operador  $\overline{U}$  (Imaxe recollida en [6]).

A idea clave será ter en conta que as submatrices  $\overline{U}_{ij}$  con  $i, j \in \{0, 1\}$  describen a evolución do sistema cuántico supoñendo que o último qubit  $|q_{n-1}\rangle$  experimenta unha transición do estado  $|j\rangle$  ao  $|i\rangle$ . Se o qubit  $|q_{n-1}\rangle$  fose separable e independente dos demais; entón o operador  $\overline{U}$  podería factorizarse tensorialmente e todos os bloques de elementos de matriz  $\overline{U}_{ij}$  terían que ser iguais salvo un factor constante [6]. Polo tanto, baixo este suposto teremos un conxunto de factores constantes

$$\kappa_{ij}^{pq} \cdot \mathbb{I} = \overline{\mathbf{U}}_{ij} \cdot \overline{\mathbf{U}}_{pq}^{\dagger}, \quad \text{con } \{i, j; p, q\} \in \{0, 1\}$$
(3)

Baseándonos nesta idea e escollendo o elemento superior esquerdo do produto matricial<sup>10</sup> que denotamos por  $\tilde{\kappa}_{ij}^{pq}$ , podemos definir unha función de custo como a distancia do produto de submatrices á igualdade (3) anterior (representativa da existencia de desentrelazamento)<sup>11</sup>.

$$f_d(\overline{\mathbf{U}}) = \sum_{l,m=1}^{2^{(n-1)}} \sum_{ijpq \in (0,1)} \left| \left( \overline{\mathbf{U}}_{ij} \cdot \overline{\mathbf{U}}_{pq}^{\dagger} - \tilde{\kappa}_{ij}^{pq} \mathbb{I} \right)_{lm} \right|^2$$
 (4)

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Cómpre puntualizar que  $\overline{U}$  non recolle a capa final de rotacións dado que estas non xogan un papel no desentrelazamento do estado  $U|q_{n-1}\dots q_0\rangle$ , pois só devolven o estado xa desentrelazado ao inicial  $|q_{n-1}\dots q_0\rangle$ .

 $<sup>^{10}</sup>$ Realmente poderíase escoller un elemento de matriz calquera do produto  $\overline{\mathbf{U}}_{ij} \cdot \overline{\mathbf{U}}_{pq}^{\dagger}$  para definir a función de custo, aínda que non exploramos esta opción.

 $<sup>^{11}</sup>$ Esencialmente estamos a considerar a norma 2 sobre o operador resultante de calcular a distancia entre o produto matricial  $\overline{\mathrm{U}}_{ij}\cdot\overline{\mathrm{U}}_{pq}^{\dagger}$  e a substracción da identidade reescalada un factor de fase constante.

Podemos velo máis claramente para o caso de n=3 qubits, se buscamos desentrelazar  $|q_2\rangle$  do estado xeral  $|q_2q_1q_0\rangle$ . Unha posible representación xeral do operador  $\overline{U}$  na base canónica do espazo de Hilbert  $\mathcal{H}$  de n=3 qubits é a seguinte:

$$\overline{\mathbf{U}}_{lm} = |l\rangle\langle m| \otimes \left\{ \sum_{r,s \in \{00,01,10,11\}} u_{rs} |r\rangle\langle s| \right\}, \quad l,m \in \{0,1\}, \quad u_{rs} \in \mathbb{C}; \quad \text{sendo } |lr\rangle, \langle ms| \in \mathcal{H}$$
(5)

Se o qubit  $|q_2\rangle$  estivese separado e fose independiente dos demais, as submatrices  $\overline{U}_{lm}$  non afectarían á forma do operador sobre os espazos de Hilbert correspondentes aos qubits  $|q_1q_0\rangle$ . Para velo, avaliamos o operador sobre o estado  $|q_2q_1q_0\rangle$ 

$$\overline{\mathbf{U}}_{lm}|q_2q_1q_0\rangle = \langle m|q_2\rangle \ |l\rangle \otimes \left(\sum_{rs\in\{00,01,10,11\}} u_{rs}\langle s|q_1q_0\rangle \ |r\rangle\right),\tag{6}$$

O primeiro factor do produto tensorial é ou ben nulo ou unidade, dado que o estado inicial  $|q_2q_1q_0\rangle$  está desentrelazado. Por outra parte, o segundo factor non depende de  $q_2$ , logo é o mesmo para calquera elección de índices  $l,m\in\{0,1\}$ , equivalentemente para calquera das submatrices.

Consecuentemente, salvo factores de fase constantes as diferentes submatrices unitarias  $\overline{\mathbf{U}}_{lm}$  son iguais, polo que o produto matricial  $\overline{\mathbf{U}}_{ij} \cdot \overline{\mathbf{U}}_{pq}^{\dagger}$  debería ser a identidade salvo factores de fase constantes que denotamos previamente como  $\kappa_{ij}^{pq}$ , resultantes da combinación dos diferentes factores de fase presentes nas submatrices involucradas no produto.

## 3.3. Optimización da función de custo

A función de custo caracteriza o entrelazamento dun qubit con respecto aos demais, logo ao minimizar a función de custo buscamos un mínimo global (o cero). O proceso de optimización consiste nunha minimización iterativa na que se manteñen constantes os parámetros de todas as capas salvo unha que se optimiza e actualiza en cada paso.

Así só se utilizan poucos parámetros en cada paso de optimización (4 en cada layer ou n na capa de rotacións finais). Este procedemento secuencial permite achegarse ao mínimo global da función de custo buscando sucesivos mínimos relativos no gran espazo de parámetros que temos<sup>12</sup> e repítese ata acadar ou ben o máximo global da función de custo ou ben ata cumplir uns criterios de tolerancia entre iteracións sucesivas ou un certo umbral de converxencia; isto é, un valor da función de custo suficientemente próximo ao cero (épsilon).

No período de prácticas tratamos de implementar en Python o algoritmo para tratar de reproducir os resultados presentados en [5] para o operador da QFT. Dado que tiñamos que lograr recrear dito operador sen chegar a utilizar máis de  $n^2$  portas controladas, á hora

<sup>12</sup>Notar que dado que todos os parámetros que utiliza a estrutura desentrelazadora están asociados únicamente rotacións  $R_x$ ,  $R_y$  e  $R_z$ , estarán limitados ao intervalo  $[0, \pi]$  todos eles.

de fixar o número de ciclos que usaríamos; i.e., o número de veces que repetiríamos as layers que desentrelazarían cada qubit do resto, consideramos únicamente o conxunto de posibilidades combinatorias que permitían manter un número de portas controladas inferior á cota establecida. Exemplifiquemos co caso de n=3 qubits.

$N^{\underline{o}}$ de ciclos para desentrelazar $ q_2\rangle$ de $ q_1q_0\rangle$ (cada layer ou capa ten 2 portas controladas)	1	1	1	1	2	2	2	2	3	3
$N^{O}$ de ciclos para desentrelazar $ q_1\rangle$ de $ q_0\rangle$ (cada layer ou capa ten 1 porta controlada)	3	4	5	6	1	2	3	4	1	2
custo total ( $< 9$ ) (n <sup>o</sup> de puertas controladas utilizadas)	5	6	7	8	5	6	7	8	7	8

Tabla 1: Posibles combinacións do nº de ciclos de capas para formar a estrutura desentrelazadora con n=3 qubits. Salientamos dúas posibilidades que exemplificaremos a continuación.

Para ver máis claramente explicitamos o circuíto correspondente á primeira (figura 5) e antepenúltima (figura 6) configuración (columnas descrita na táboa 1).

Nas figuras que se presentan a continuación, cada porta cuántica de rotación que forma parte dunha layer está etiquetada como  $iX_j - k$  onde X é o parámetro correspondente á porta cuántica de rotación concreta da k-ésima layer que forma parte do i-ésimo ciclo que desentrelaza o qubit número  $|j\rangle$  dos restantes. Notar ademais que o conxunto de ciclos que desentrelazan diferentes qubits están separados por 3 barreiras, os diferentes ciclos que desentrelazan un mesmo qubit por 2 barreiras e as layers dentro dun mesmo ciclo por 1 barreira, todo isto para facilitar a comprensión estrutural do circuíto.

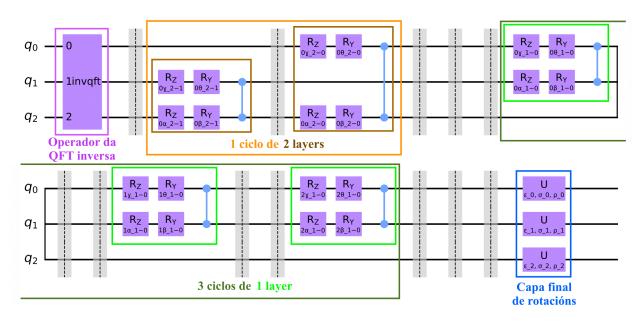


Figura 5: Estrutura desentrelazadora total usando portas CZ composta por 1 ciclo (de 2 layers) para desentrelazar  $|q_2\rangle$  de  $|q_1q_0\rangle$  e 3 ciclos (de 1 layer) para desentrelazar  $|q_1\rangle$  de  $|q_0\rangle$ .

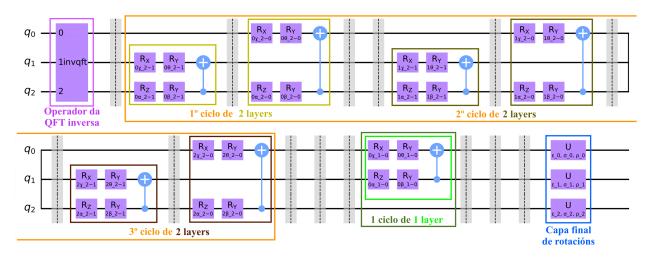


Figura 6: Estrutura desentrelazadora total usando portas CNOT composta por 3 ciclos (de 2 layers) para desentrelazar  $|q_2\rangle$  de  $|q_1q_0\rangle$  e 1 ciclo (de 1 layer) para desentrelazar  $|q_1\rangle$  de  $|q_0\rangle$ .

Notar que nas figuras presentadas, o operador inicial a factorizar<sup>13</sup> U é o da QFT inversa porque o operador aproximado que conforman o conxunto de ciclos desentrelazadores e a capa final de rotacións, que denotaremos por V, é unha aproximación para o operador inverso de U, que por ser unitario é o hermítico conxugado,  $U^{\dagger}$ .

En resumo, é indiferente utilizar o inverso ou non do operador a factorizar sempre e cando teñamos en conta que o operador aproximado que construímos é o seu inverso.

Chegados a este punto, despois de realizar diversas probas e simulacións co algoritmo implementado por nós en Python, decatámonos dun importante detalle que non se cubría apenas en [6]: Como se devolvía ao estado inicial o circuíto ou sistema cuántico coa capa final de rotacións unha vez acadabamos a converxencia desexada na función de custo?

Non sería suficiente con mandar o estado obtido desentrelazado ao inicial posto que procurabamos un operador aproximado que puidese substituir ao da QFT e por tanto que reproducise o seu comportamento dado calquer estado co que inicializásemos o circuíto. Ademais tamén notamos outros problemas asociados á implementación realizada:

- Alta inestabilidade do optimizador dependendo do punto inicial escollido no espazo de parámetros; isto é, unha falta de converxencia global do método usado.
- Gran lentitude no descenso do valor da función de custo nas sucesivas optimizacións secuenciais realizadas; é dicir, baixa orde de converxencia en xeral.

Estas dúas limitacións poderían deberse ao feito de utilizar Python para realizar a optimización mediante o paquete de Scipy, polo tipo de optimizador escollido ou mesmo por unha non eficiente implementación pola nosa parte. Tamén podería ser unha posible causa unha

 $<sup>\</sup>overline{\phantom{a}^{13}}$ Non confundir o operador inicial a factorizar U coas portas de rotación arbitrarias U (ou U3) que utiliza QisKit que aparecen nas figuras 5 e 6.

mala regularidade da función de custo.

Inicialmente tratamos de resolver o problema engadindo a capa final de rotacións ao operador  $\overline{\mathbf{U}}$ , pero isto resultaba nunha solución ineficiente: máis inestabilidade dependendo dos valores iniciais dos parámetros e maior lentidude do optimizador<sup>14</sup>. Sen embargo, en múltiples ocasións resolvía o problema por completo logrando un operador aproximado funcional, pero tamén daba lugar a casos nos que a función de custo acadaba un mínimo global nulo e aínda así non reproducía o comportamento do operador  $\mathbf{U}$  a factorizar; i.e. o operador conxunto  $\mathbf{U} \cdot V^{\dagger}$  non resultaba similar á identidade.

Para asegurarnos de poder diferenciar os mínimos globais que non reproducían o comportamento do operador a factorizar U consideramos dúas distancias diferentes no espazo de operadores asociado ao espazo de Hilbert  $\mathcal{H}$  dos qubits.

	Norm based metric	Gate fidelity
Hilbert-Schmidt	$C_{\text{HST}}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = 1 - \frac{1}{d^2} \left  \text{Tr} \left( \mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{A} \right) \right ^2$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = 1 - \frac{d}{d+1} C_{\mathrm{HST}}(\mathbf{A}, \mathbf{B})$
Frobenius	$C_{\mathrm{F}}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \frac{1}{2} \ \mathbf{B} - \mathbf{A}\ _{F}^{2} = d - \operatorname{Re}\left[\operatorname{Tr}\left(\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{B}\right)\right]$	$\overline{F}_{F}(A, B) = 1 - \frac{d}{d+1} + \frac{1}{d(d+1)} [d - f(A, B)]^{2}$

Tabla 2: Distancias métricas e medida da fidelidade <sup>15</sup> para dous operadores ou portas cuánticas A e B de dimensións  $d \times d$ .

Pódese ver que en xeral cúmprese que  $\overline{F}_{HST}(A,B) \leq \overline{F}_{F}(A,B)$  en [12]. Ambas medidas son altamente utilizadas no contexto de funcións de custo pola sinxeleza que teñen para ser avaliadas e para obter expresións análiticas do gradiente en función dos parámetros libres que correspondan.

Para tratar de paliar esta aparición de mínimos globais que carecesen de sentido, decidimos engadir un sumando á función de custo consistente nunha norma ou distancia métrica entre operadores que avaliase a distancia entre os operadores U e V ou equivalentemente entre o operador correspondente ao circuíto total  $U \cdot V^{\dagger}$  e a identidade  $\mathbb{I}$ .

$$f_{custo}\left(\overline{\mathbf{U}}, \mathbf{U}, \mathbf{V}\right) = f_d\left(\overline{\mathbf{U}}\right) + C_F\left(\mathbf{U}, \mathbf{V}\right)$$
 (7)

Con esta lixeira correción conseguimos eliminar os casos patolóxicos nos que a función de custo presentaba un mínimo que non era consistente co que buscabamos aínda que ralentizando en ocasións a rapidez do optimizador.

 $<sup>^{-14}</sup>$ Isto é esperable dado que implica un maior número de operacións para calcular o operador total U ·  $V^{\dagger}$  en cada paso da optimización.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Enténdese por *gate fidelity* unha medida comparativa entre a aplicación dunha porta cuántica e a correspondente porta ideal, para máis información ver [11].

#### 3.4. Factorización do operador QFT

Debido á alta inestabilidade do algoritmo<sup>16</sup>, non logramos factorizar o operador QFT para máis de 3 qubits. Sen embargo, conseguimos factorizar exitosamente o operador da QFT para o caso tanto de 2 qubits (que non é gran cousa, pois é esencialmente unha porta Hadamard) como para 3 qubits utilizando tanto portas CNOT como CZ.

Presentamos a continuación a forma do operador V aproximado en cada caso, así como o erro estimado da descomposición e varios exemplos nos que se compara a utilización do operador da QFT que inclúe QisKit fronte ao noso experimental para casos 2 e 3 qubits. Notar que únicamente se mostran dúas factorizacións para 2 qubits e outras dúas para 3 qubits, as que resultaron utilizar menor número de portas controladas, aínda que usando máis portas controladas tamén houbo converxencia e factorización exitosa.

Recordar que polo método descrito constrúese un operador V que é inverso<sup>17</sup> aproximadamente ao operador U a factorizar.

#### 3.4.1. 2 qubits: descomposición con portas CZ

Requeríronse polo menos 3 ciclos para desentrelazar os 2 qubits.

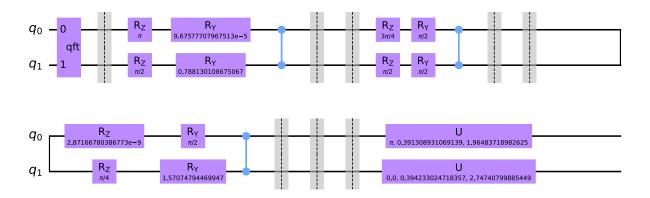


Figura 7: Ciruíto completo cos parámetros óptimos para desentrelazar o operador QFT de 2 qubits con portas CZ.

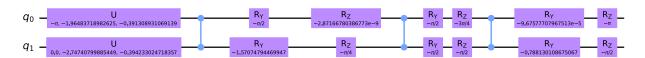


Figura 8: Forma do operador aproximado  $V_{2 \text{ qubits}}^{CZ}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Enténdase que a converxencia non era boa nin suficientemente rápida e remataba con frecuencia nun mínimo local, agás nos casos no que os valores iniciais aleatorios dados aos parámetros inicializaban a función de custo total nun valor baixo.

 $<sup>^{17}</sup>$ Todos os operadores aos que se fai referencia son unitarios, logo tomar o hermítico conxugado ou dagger (†) é equivalente a facer o inverso.

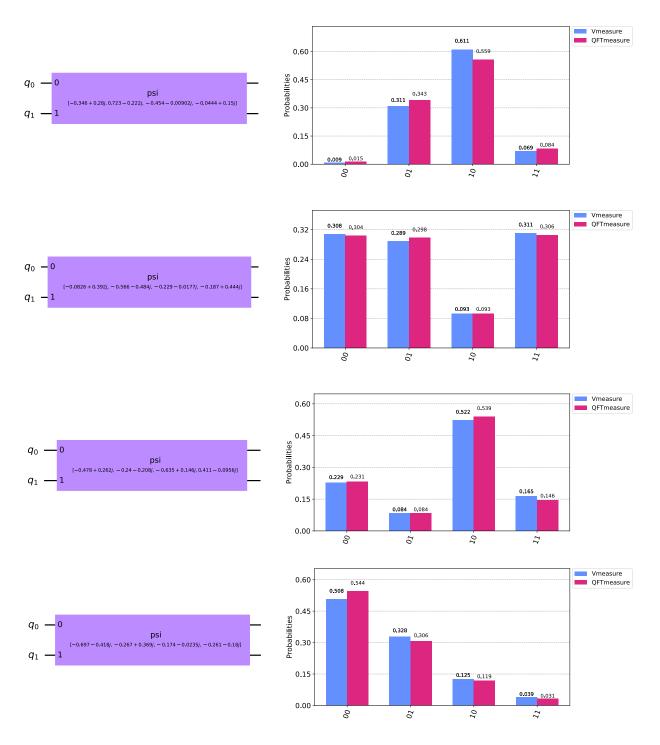


Figura 9: Comparativa de rendimiento entre o operador aproximado  $V_{2 \text{ qubits}}^{CZ}$  e o operador QFT para 4 estados iniciales aleatorios.

	Norm based metric	Gate fidelity	Función de custo	
Hilbert-Schmidt	$C_{\rm HST} = 1{,}170 \times 10^{-9}$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}} \gtrapprox 99\%$	$f_d$	$f_{custo}$
Frobenius	$C_{\rm F} = 2.34 \times 10^{-9}$	$\overline{F}_{\mathrm{F}} \gtrapprox 99\%$	$1,872 \times 10^{-8}$	$2,106 \times 10^{-8}$

Tabla 3: Erro de descomposición e custo asociado, para 2 qubits usando portas CZ.

#### 3.4.2. 2 qubits: descomposición con portas CNOT

Requeríronse polo menos 3 ciclos para desentrelazar os 2 qubits do mesmo modo que coas portas CZ.

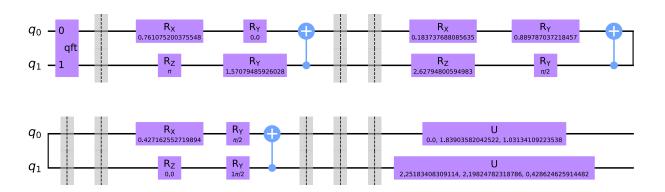
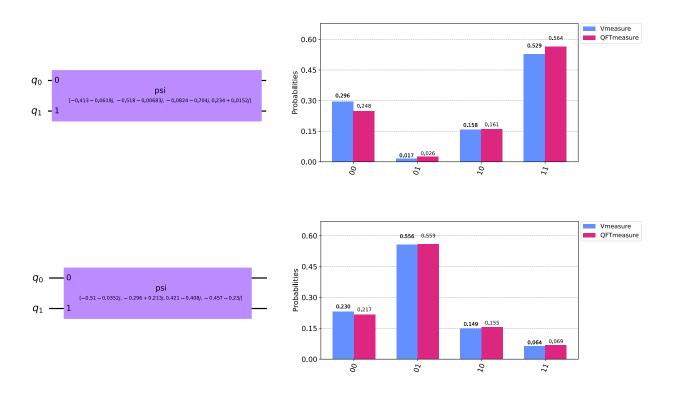


Figura 10: Ciruíto completo cos parámetros óptimos para desentrelazar o operador QFT de 2 qubits con portas CNOT.



Figura 11: Forma do operador aproximado  $\rm V_{2\;qubits}^{CNOT}.$ 



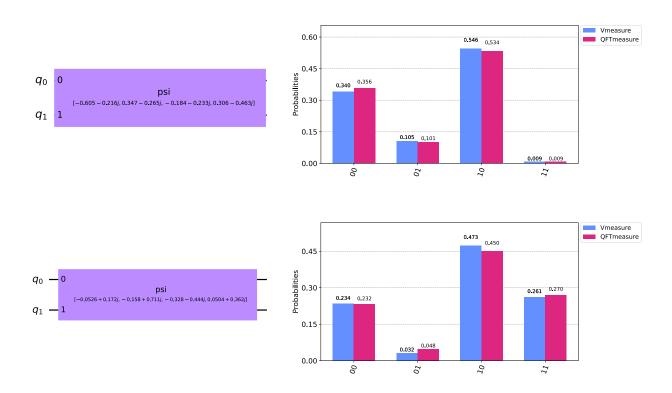


Figura 11: Comparativa de rendemento entre o operador aproximado  $V_{2 \text{ qubits}}^{\text{CNOT}}$  e o operador QFT para 4 estados iniciais aleatorios.

	Norm based metric	Gate fidelity	Función de custo	
Hilbert-Schmidt	$C_{\rm HST} = 4.629 \times 10^{-7}$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}} \gtrapprox 99\%$	$f_d$	$f_{custo}$
Frobenius	$C_{\rm F} = 1,070 \times 10^{-6}$	$\overline{F}_{\mathrm{F}} \gtrapprox 99\%$	$7,381 \times 10^{-8}$	$1,078 \times 10^{-6}$

Tabla 4: Erro de descomposición e custo asociado, para 2 qubits usando portas CNOT.

#### 3.4.3. 3 qubits: descomposición con portas CZ

A configuración que resultou máis óptima da táboa 1 foi: 3 ciclos (de 2 capas cada un) para desentrelazar un qubit dos outros dous e 1 ciclo (de 1 capa) para desentrelazar os dous qubits restantes, supoñendo un total de 7 portas controladas (3+1). Neste caso concreto atopamos 2 conxuntos de parámetros diferentes coa mesma configuración desentrelazadora que reproducían o operador QFT para 3 qubits.

#### 3.4.3.1 Configuración 1

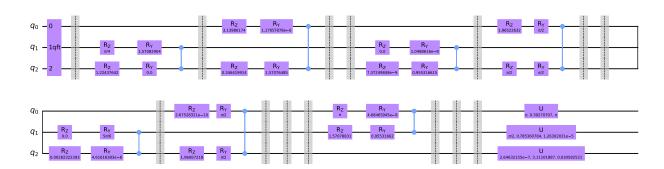


Figura 12: Ciruíto completo cos parámetros óptimos para desentrelazar o operador QFT de 3 qubits con portas CZ.

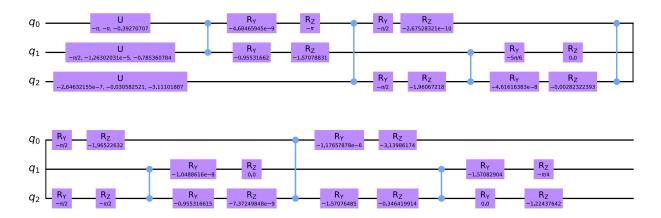


Figura 13: Forma do operador aproximado  $V_{3 \text{ qubits}}^{CZ}$ .

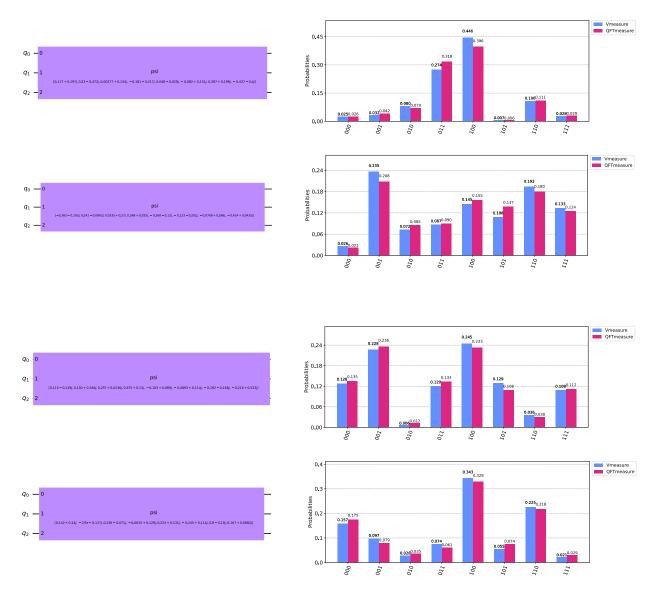


Figura 13: Comparativa de rendemento entre o operador aproximado  $V_{3~\rm qubits}^{\rm CZ}$  e o operador QFT para 4 estados iniciais aleatorios.

	Norm based metric	Gate fidelity	Función de custo	
Hilbert-Schmidt	$C_{\rm HST} = 7.522 \times 10^{-11}$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}} \gtrapprox 99\%$	$f_d$	$f_{custo}$
Frobenius	$C_{\rm F} = 3.653 \times 10^{-10}$	$\overline{F}_{\mathrm{F}} \gtrsim 99 \%$	$8,812 \times 10^{-12}$	$3,741 \times 10^{-10}$

Tabla 5: Erro de descomposición e custo asociado, para 3 qubits usando portas CZ.

#### 3.4.3.2 Configuración 2

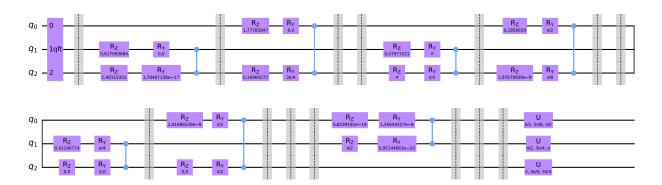


Figura 14: Ciruíto completo cos parámetros óptimos para desentrelazar o operador QFT de 3 qubits con portas CZ.

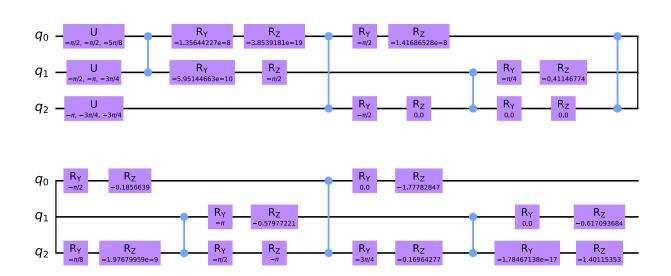
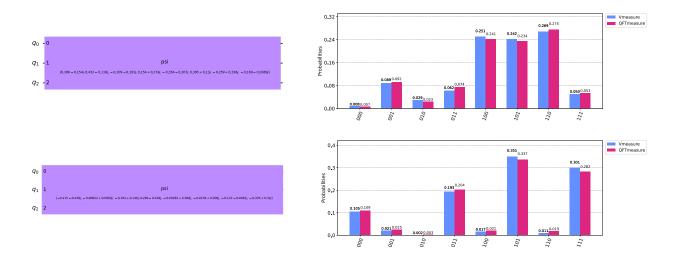


Figura 15: Forma do operador aproximado  $\rm V_{3\;qubits}^{CZ}.$ 



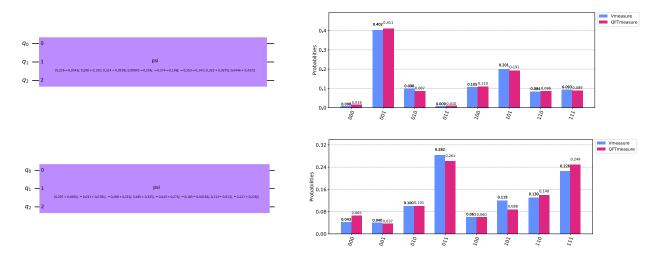


Figura 15: Comparativa de rendemento entre o operador aproximado  $V_{3~\rm qubits}^{\rm CZ}$  e o operador QFT para 4 estados iniciais aleatorios.

	Norm based metric	Gate fidelity	Función de custo	
Hilbert-Schmidt	$C_{\rm HST} = 1{,}156 \times 10^{-12}$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}} \gtrapprox 99\%$	$f_d$	$f_{custo}$
Frobenius	$C_{\rm F} = 4.628 \times 10^{-12}$	$\overline{F}_{\mathrm{F}} \gtrapprox 99\%$	$4,776 \times 10^{-15}$	$4,632 \times 10^{-12}$

Tabla 6: Erro de descomposición e custo asociado, para 3 qubits usando portas CZ.

#### 3.4.4. 3 qubits: descomposición con portas CNOT

A configuración que resultou óptima da táboa 1 foi a mesma que a exposta na sección previa.

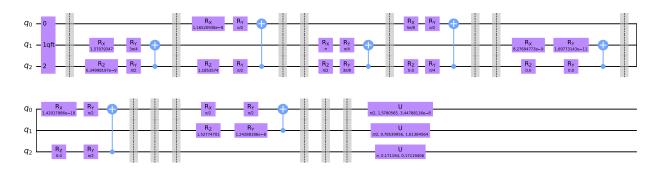


Figura 16: Ciruíto completo cos parámetros óptimos para desentrelazar o operador QFT de 3 qubits con portas CNOT.

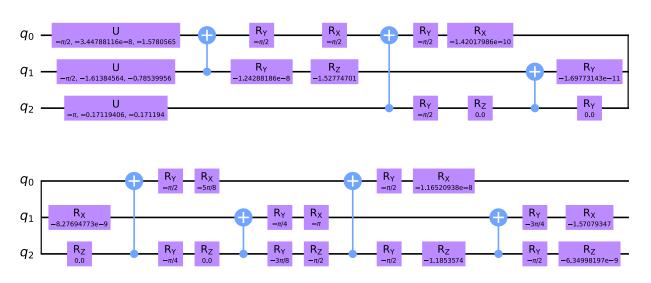
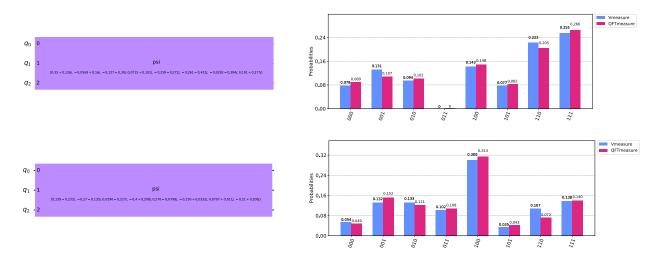


Figura 17: Forma do operador aproximado  $V_{3 \text{ qubits}}^{CNOT}$ .



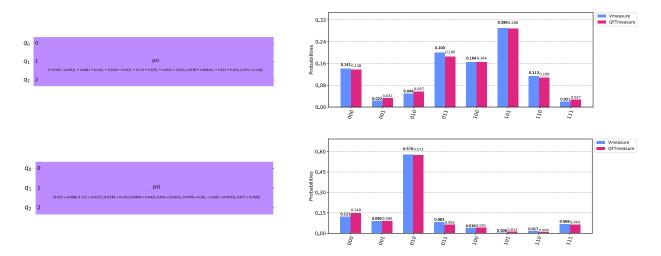


Figura 17: Comparativa de rendemento entre o operador aproximado  $V_{3~{\rm qubits}}^{\rm CNOT}$  e o operador QFT para 4 estados iniciais aleatorios.

	Norm based metric	Gate fidelity	Función de custo	
Hilbert-Schmidt	$C_{\rm HST} = 5{,}156 \times 10^{-13}$	$\overline{F}_{\mathrm{HST}} \gtrapprox 99\%$	$f_d$	$f_{custo}$
Frobenius	$C_{\rm F} = 2,073 \times 10^{-12}$	$\overline{F}_{\mathrm{F}} \gtrapprox 99 \%$	$8,170 \times 10^{-12}$	$1,024 \times 10^{-11}$

Tabla 7: Erro de descomposición e custo asociado, para 3 qubits usando portas CNOT.

#### 3.5. Conclusións e posibles futuras continuacións

A metolodoloxía implementada baseándonos no traballo presentado en [5, 6] non resulta adaptarse de forma satisfactoria para o noso propósito, obter un operador QFT sinxelo e implementable con poucas portas controladas. Hai un claro problema na escalabilidade do método usado, posto que para o caso de 4 qubits o algoritmo non chega a minimizar a función de custo. Isto é un indicativo da imposibilidade de realizar dito operador de forma aproximada con un número de portas controladas inferior a 16 polo método utilizado ou en xeral.

Hai que salientar que o método si permitiría factorizar calquera operador usando un número de capas e ciclos suficientemente alto (e por tanto de portas controladas CZ ou CNOT), pero no caso que nos concirne estamos limitados pola cota superior de  $n^2$  portas controladas.

Ademais, outras sutilezas e detalles que non abordamos así como comentarios sobre ideas que sería de interese tratar son as seguintes:

- O algoritmo usado basease nun proceso de optimización exclusivamente clásico. Podería explorarse a opción de traducir a metodoloxía a un problema variacional que se resolvese usando algorimtos híbridos de tipo clásico-cuánticos.
- A estrutura de capas ou layers proposta non se adapta facilmente a posibles topoloxías concretas de ordenadores cuánticos; i.e. o proceso de desentrelazamento dun qubit dos demais require da aplicación de polo menos unha porta controlada a cada un dos restantes qubits. Se ben é certo que mediante a introdución de portas SWAP poderíase solventar o problema de adaptabilidade a unha topoloxía de circuíto concreta, estariamos a aumentar a profundidade cuántica e complexidade do mesmo, co cal non melloraríamos a situación. Como posible solución a este problema podería ser a procura dunha estrutura de layers diferentes.
- O enfoque seguido neste proxecto baseábase exclusivamente no operador e establecendo unha función de custo con respecto ao mesmo. Sería interesante atacar o problema desde a perspectiva dos estados iniciais e resultantes; isto é, establecer unha función de custo entre a entrada e saída do circuíto que permitise reaxustar os parámetros do mesmo ata lograr que o circuíto recuperase ao final o estado inicial usado. Realizando este procedemento con múltiples estados iniciais (polo menos os da base canónica asociados ao número de qubits), podería valorarse se é posible a construción de dito operador aproximado.

En calquera caso, este proxecto pon de manifesto a importancia que pode ter obter unha factorización sinxela para operadores que son de gran utilidade e uso no contexto da emerxente computación cuántica. Unha posible extensión la liña de estudo da factorización de operadores é a construcción de metaoperadores; isto é, operadores que son paramterizados e que sería de interese poder aproximar por estruturas de portas cuánticas sinxelas.

## 4. Conexión do Grao en Física coas prácticas

Para a realización deste proxecto de prácticas tiven que formarme adecuadamente en Python, posto que no programa do dobre grao de Matemáticas e Física non se contempla o uso de Python como linguaxe de programación aínda que si doutras como Matlab e Fortran. Tamén tiven que revisitar QisKit e o funcionamento dos principais paquetes que ten cos que se constrúen e implementan os circuítos cuánticos así como algunhas nocións relativas á métodos variacionais aplicados á computación cuántica que podían ser de utilidade de cara ao proxecto inicialmente.

Nas primerias semanas foi de gran utilidade consultar tanto o QisKit online textbook [13] como o curso online impartido por Elias Fernandez-Combarro A practical introduction to quantum computing: from qubits to quantum machine learning and beyond.

A comprensión tanto do marco da computación cuántica como da idea da función de custo que se implementa en [6] que constitúe o core do proceso de descomposición en portas cuánticas sinxelas que abordamos, require de coñecementos básicos de Física Cuántica e por extensión de Álxebra Lineal e Espazos de Hilbert que se adquiren no grao.

En resumo, a conexión do proxecto de prácticas cos contidos do grao en física é clara. O estudo e desenvolvemento dun algoritmo no marco da computación cuántica require de coñecementos aos que se pode acceder facilmente coa base físico-matemática que aporta o grao. De cara a implementación do mesmo, se ben é certo que a programación non é un dos principais contidos do grao, é algo imprescindible de cara a facer probas ou simulacións sobre prácticamente calquer tema en física hoxe en día.

Outros coñecementos e activadades nas que participei durante a miña estancia no CESGA foron:

- Comprensión do funcionamento do Finisterrae III e por extensión do sistema de colas ao que accedía para executar os programas creados.
- Familiarización co funcionamento do protocolo SSH para acceder ao Finisterrae III.
- Asistencia a varias charlas relacionadas coa computación cuántica impartidas telemáticamente no CESGA.
- Visita explicativa polas instalacións do CESGA para ver princiaplmente os supercomputadores Finisterrae II e III.

Por último mencionar que no anexo en 6.4 se adxunta o código e material relacionado utilizado durante o proxecto de prácticas.

## 5. Valoración das prácticas

No referente ao meu paso polo CESGA, as prácticas resultaron ser unha moi boa experiencia e acercamento ao mundo laboral. Ademais de ter a posibilidade de aplicar os meus coñecementos teóricos e iniciarme no mundo da computación cuántica, adquirín a idea xeral de como funciona unha empresa.

Resultoume moi desafiante e divertido o feito de que se me presentase un problema xunto con documentación moi recente relativa ao mesmo, e tivese o desafío de intentar reproducilo. Tamén hai que recordar a presenza de factores externos como a COVID-19 que dificultaron notablemente o desenvolvemento do proxecto.

Persoalmente penso que ver como pouco a pouco vai progresando o proxecto, van aparecendo os primeiros resultados (aínda que sexan erróneos) e como vas superando os problemas que van xurdindo co código á vez que vas aprendendo deles é unha experiencia moi gratificante. Como estudante undergraduate non é moi frecuente que poidas traballar en temas tan recentes, como tiven oportunidade.

Finalmente, gustaríame agradecer ao meu titor Andrés Gómez Tato pola paciencia que tivo comigo e pola súa axuda coa comprensión e visión global do proxecto de prácticas; a Gonzalo Ferro Costas, pola súas aportacións con gran parte das dúbidas referentes á implementación do código realizada principalmente; a Mariamo Mussa Juane, polos materiais e numerosa documentación que me aportou durante as primeiras semanas; ao grupo de rapaces incorporados ao proxecto REACT-EU, cos que puiden comentar tamén as dúbidas que me ían xurdindo e por suposto, ao resto do persoal do CESGA que tamén me axudaron durante a miña estadía no centro especialmente a Antón Ambroa Abalo, Alejandro Feijóo Fraga e Juan Villasuso Barreiro.

#### 6. Anexo

#### 6.1. Portas cuánticas de 1 e 2 qubits fundamentais

Os circuítos cuánticos son esencialmente a realización de ou os propios operadores do espazo de Hilbert  $\mathcal{H} = \bigotimes_n \mathbb{C}^2$  de n qubits. Para poder construílos é necesario o uso de operadores unitarios máis sinxelos, as portas cuánticas. Algunhas das máis coñecidas que mencionaremos ao longo da memoria son:

Notar que a base usadas para describir as portas cuánticas será a canónica de  $\mathcal{H}$ ; i.e.

$$B_z^{\otimes n} = \{ |l\rangle \}_{l=0}^{2^n - 1}, \qquad l = \sum_{i=0}^{n-1} 2^i q_i, \qquad q_i \in \{0, 1\}$$

lacksquare Porta Z:

$$Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
 (8)

 $\blacksquare$  Porta X ou NOT:

 $\blacksquare$  Porta Y:

$$Y = i |1\rangle \langle 0| - i |0\rangle \langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
 (10)

• Porta Hadamard, H:

$$H = |+\rangle \langle 0| + |-\rangle \langle 1| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$
 (11)

Onde 
$$\mathcal{B}_x = \{ |+\rangle, |-\rangle \}$$
, con  $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle \pm |1\rangle]$ .

• Rotación en Z,  $R_z$ :

$$R_z(\lambda) = \exp\left(-i\frac{\lambda}{2}Z\right) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\lambda}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\lambda}{2}} \end{pmatrix}$$
(12)

• Rotación en X,  $R_x$ :

$$R_x(\theta) = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}X\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$
(13)

• Rotación en Y,  $R_y$ :

$$R_{y}(\theta) = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}Y\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$
(14)

• Rotación xeral, porta U ou U3:

$$q - \bigcup_{\theta, \varphi, \lambda} - U(\theta, \varphi, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -e^{i\lambda}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i(\varphi+\lambda)}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix}$$
(15)

• Porta CZ:

$$CZq_{1}, q_{0} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$
 (16)

• Porta CX ou CNOT:

$$CXq_{0}, q_{1} = I \otimes |0\rangle\langle 0| + X \otimes |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(17)$$

■ Porta SWAP:

$$g_{0} \longrightarrow SWAP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(18)$$

#### 6.2. Convención de significación para qubits de QisKit

Seguindo o convenio de QisKit, dado un estado arbitrario  $|q_{n-1} \dots q_0\rangle$ , se sitúa ao qubit menos significativo (least significant bit, LSB)  $|q_0\rangle$  ao principio do circuíto e ao máis significativo (most significant bit, MSB)  $|q_{n-1}\rangle$  ao final.

$$q_0$$
 — A — 
$$(C \otimes B \otimes A) |q_2q_1q_0\rangle = C|q_2\rangle \otimes B|q_1\rangle \otimes A|q_0\rangle,$$
 onde  $|q_2\rangle$  é o MSB e  $|q_0\rangle$  o LSB.

### 6.3. Transformada de Fourier Cuántica (QFT)

A transformada de Fourier cuántica (QFT) non é máis que a coñecida transformada de Fourier discreta clásica (DFT) aplicada a un vector de lonxitude  $N = 2^n$  (onde n é o número de qubits).

Trátase polo tanto dunha transformación lineal e unitaria que leva un vector da forma  $\vec{x} \equiv |x\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x^j |j\rangle$  noutro  $\vec{y} \equiv |y\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} y^k |k\rangle$ , onde  $\mathcal{B}_z = \{|j\rangle\}_{j=0}^{N-1}$  é a base canónica do espazo de Hilbert N dimensional, como segue

$$y^{k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \left[ \omega_{N} \right]_{j}^{k} x^{j}, \quad \Longrightarrow \quad |y\rangle = U_{\text{QFT}} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \left[ \omega_{N} \right]_{j}^{k} x^{j} |k\rangle, \qquad (20)$$

$$\operatorname{con} \left[ \omega_{N} \right]_{j}^{k} = \left[ e^{2\pi i \frac{jk}{N}} \right]_{j}^{k} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega_{N} & \omega_{N}^{2} & \omega_{N}^{3} & \cdots & \omega_{N}^{N-1} \\ 1 & \omega_{N}^{2} & \omega_{N}^{4} & \omega_{N}^{6} & \cdots & \omega_{N}^{2(N-1)} \\ 1 & \omega_{N}^{3} & \omega_{N}^{6} & \omega_{N}^{9} & \cdots & \omega_{N}^{3(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega_{N}^{N-1} & \omega_{N}^{2(N-1)} & \omega_{N}^{3(N-1)} & \cdots & \omega_{N}^{(N-1)(N-1)} \end{bmatrix}$$
(21)

Pode deducirse así a expresión xeral do operador QFT:

$$U_{QFT} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} [\omega_N]_j^k |k\rangle\langle j|.$$
 (22)

Tendo en conta de que no caso particular en que  $|x\rangle = |j\rangle$ , pode verse que

$$U_{QFT}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \left[ \omega_N \right]_j^k |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \bigotimes_{l=0}^{n-1} \left\{ |0\rangle + e^{i\frac{2\pi}{2^n}j} |1\rangle \right\}, \qquad j \in \{0, \dots, N-1\} \quad (23)$$

Temos por tanto dúas bases do espazo de Hilbert  $\mathcal{H} = \bigotimes_n \mathbb{C}^2$  de n qubits relacionadas pola QFT:

$$\mathcal{B}_{z} = \left\{ |j\rangle \right\}_{j=0}^{N-1} \qquad \longleftrightarrow \qquad \mathcal{B}_{QFT} = \left\{ U_{QFT} |j\rangle \right\}_{j=0}^{N-1}$$
 (24)

A expresión máis xeral posible para a actuación do operador  $^{18}$   $U_{\rm QFT}$  sobre un vector arbitrario será por tanto:

$$U_{QFT}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} \left[ \omega_N \right]_j^k x^j |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} x^j \left[ \bigotimes_{l=0}^{n-1} \left( |0\rangle + e^{i\frac{2\pi}{2^n}j} |1\rangle \right) \right] \right\}$$
(25)

A implementación da QFT nun circuíto cuántico admite varias realizacións equivalentes, unha delas é a seguinte<sup>19</sup> onde o estado inicial é  $|x\rangle = |x_{n-1} \dots x_1 x_0\rangle$ .

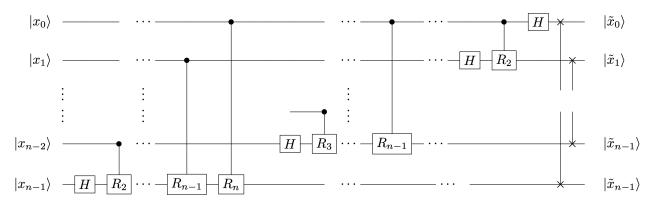


Figura 18: Esquema da implementación da transformada de Fourier cuántica sobre n qubits.

Nótese que a implementación do operador QFT require n portas Hadamard,  $\frac{(n-1)(n-2)}{2}$  rotacións contraladas e  $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$  portas SWAPS.

Pode consultarse información máis detallada acerca da mesma en [14].

 $<sup>^{18}</sup>$ Notar que o operador unitario será en esencia unha matriz de dimensións  $2^n\times 2^n.$ 

<sup>&</sup>lt;sup>19</sup>Utiliza portas Hadamard H; rotacións controladas, denotadas por  $R_{(\cdot)}$  e portas SWAP, sinaladas cun  $\times$ .

# 6.4. Repositorio cos notebooks de Python e demais ficheiros de utilidade

Pódese consultar aquí unha carpeta contendo un notebook de Python ("QGD.ipynb") con todo o código utilizado para reproducir os resultados presentados nesta memoria así como algunha documentación de repaso relacionada coa computación cuántica elaborada durante o período de prácticas e diferentes gráficas e arquivos de proba.

Os arquivos ".txt" conteñen o diccionario de parámetros dos correspondentes circuítos cuánticos que se cargan ao final do notebook.

As carpetas "2qubits\_results" e "3qubits\_results" inclúen os resultados das factorizacións amosados nesta memoria.

A carpeta "Run\_example" contén unha optimización executada no Finisterrae III cun ficheiro "launch\_3\_1\_cz\_3qubits.sh" que lanza a execución do arquivo "3qbit\_cz\_3\_1.py" que reune a execución do proceso de optimización coas funcións do notebook condensadas no arquivo "QGD\_functions.py".

## Referencias

- 1. CESGA Centro de Supercomputación de Galicia https://www.cesga.es/.
- 2. Jozsa, R. Quantum algorithms and the Fourier transform. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **454,** 323-337. https://doi.org/10.1098%5C%2Frspa.1998.0163 (ene. de 1998).
- 3. Vartiainen, J. J., Möttönen, M. y Salomaa, M. M. Efficient Decomposition of Quantum Gates. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 177902. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.177902 (17 abr. de 2004).
- 4. Shende, V., Bullock, S. y Markov, I. Synthesis of quantum-logic circuits. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* **25**, 1000-1010. https://doi.org/10.1109%5C%2Ftcad.2005.855930 (jun. de 2006).
- 5. Rakyta, P. y Zimborás, Z. Efficient quantum gate decomposition via adaptive circuit compression 2022. https://arxiv.org/abs/2203.04426.
- 6. Shende, V. V., Markov, I. L. y Bullock, S. S. Minimal universal two-qubit controlled-NOT-based circuits. *Phys. Rev. A* **69**, 062321. https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.69.062321 (6 jun. de 2004).
- 7. Jozsa, R. Quantum algorithms and the Fourier transform. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **454**, 323-337. https://doi.org/10.1098%5C%2Frspa.1998.0163 (ene. de 1998).
- 8. Nam, Y., Su, Y. y Maslov, D. Approximate quantum Fourier transform with O(n log(n)) T gates. npj Quantum Information 6. https://doi.org/10.1038%5C%2Fs41534-020-0257-5 (mar. de 2020).
- 9. Rakyta, P. y Zimborás, Z. Approaching the theoretical limit in quantum gate decomposition. *Quantum* 6, 710. https://doi.org/10.22331%5C%2Fq-2022-05-11-710 (mayo de 2022).
- 10. Iten, R., Colbeck, R., Kukuljan, I., Home, J. y Christandl, M. Quantum circuits for isometries. *Physical Review A* **93.** https://doi.org/10.1103%5C%2Fphysreva.93.032318 (mar. de 2016).
- 11. Shukla, A., Sisodia, M. y Pathak, A. Complete characterization of the directly implementable quantum gates used in the IBM quantum processors. *Physics Letters A* **384**, 126387. ISSN: 0375-9601. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960120302139 (2020).
- 12. Madden, L. y Simonetto, A. Best Approximate Quantum Compiling Problems 2021. https://arxiv.org/abs/2106.05649.

- 13. Abbas, A. et al. Learn Quantum Computation Using Qiskit http://community.qiskit.org/textbook.
- Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition 10th, 216-221. ISBN: 1107002176 (Cambridge University Press, USA, 2011).