# Методи Компенсації Повороту Фази у Разі Реалізації Трьокубітного Вентиля Тоффолі

Андрій Терещенко докторантура інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України Київ, Україна teramidi@ukr.net

Валерій Задірака відділ оптимізації обчислень інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України Київ, Україна zvk140@ukr.net

# Phase Rotation Compensation Methods in Case of Implementation of Three-Qubit Toffoli Gate

Andrii Tereshchenko dept. of doctoral studies V.M.Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS Kyiv, Ukraine teramidi@ukr.net

Анотація—у роботі розглянуто методи компенсації поворотів фаз для визначених початкових станів квантових схем. Особливістю розглянутих методів є те, що компенсації не впливають на фази результатів для інших початкових станів. У роботі розглянуті різні реалізації вентиля Тоффолі, для отримання яких були проведені компенсації поворотів фаз згідно запропонованих методів. Великий набір реалізацій вентиля Тоффолі (та інших універсальних вентилів) на основі різних базових вентилів дозволяє оптимізувати частини великих квантових схем. Такими схемами є квантові схемі реалізації операцій багаторозрядної арифметики. (Abstract)

Abstract—The work considers the methods of compensating phase rotates for defined initial states of quantum circuits. A feature of the considered methods is that the compensations do not affect the phases of the results for other initial states. In this paper, various implementations of the Toffoli gate are considered, for which phase rotation compensations were carried out according to the proposed methods. A large set of Toffoli gate implementations (and other universal gates) based on various basic gates allows to optimize parts of large quantum circuits. Such circuits are circuits for implementing multi-digit arithmetic operations. (*Abstract*)

Ключові слова—вентиль Тоффолі, універсальний вентиль, реверсивні обчислення, квантова модель обчислень, квантова схема, поворот фази, переніс класичних обчислень у квантову модель, багаторозрядна арифметика (key words)

Keywords—gate Toffoli, universal gate, reversible computation, quantum computational model, quantum circuit, phase rotate, transfer of classical calculations to the quantum model, multi-digit arithmetic (key words)

## I. Вступ

На даний час розроблено багато алгоритмів [1-3], які є ефективними для послідовної та паралельної моделі обчис-

Valerii Zadiraka

dept. of numerical methods of optimization V.M.Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS Kyiv, Ukraine zvk@ukr.net

лень. Однією з актуальних задача є задача переносу класичних алгоритмів у квантову модель обчислення. З одного боку це дозволяє зекономити час, використовуючи вже існуючи методи, з іншого боку, алгоритм має бути реалізовано у квантовій моделі обчислень [4-5] для того, щоб можна було порівняти його з іншими алгоритмами. Універсальними інструментами для переносу класичних алгоритмів, включаючи реалізації операцій багаторозрядної арифметики, у квантову модель обчислень є вентилі Тоффолі [6], Переса [7] і т.д. Для реалізації ефективних квантових схем необхідно мати широкий набір реалізацій універсальних вентилів з використанням різних базових вентилів. Це дозволяє для різних частин квантової схеми отримувати різну ефективність, використовуючи різні реалізації вентилів Тоффолі, Переса і т.д. Різні реалізації мають один недолік, який полягає у тому, що результат може мати поворот фази, який є основною відмінністю реалізацій квантових алгоритмів від класичних алгоритмів. Поворот фази має вплив на результат всієї схеми, що не є бажаним. Отримання результату для потрібних початкових станів у необхідній фазі додає складності. У роботі проаналізовані методи корегування повороту фаз у разі отримання реалізацій вентиля Тоффолі.

### II. Постановка задачі та позначення

Обчислення вентиля Тоффолі має результати, які представлені у матричному вигляді на рис. 1. Будемо називати модифікаціями вентиля Тоффолі такі квантові схеми, результати обчислення яких відрізняється від результатів обчислення вентиля Тоффолі (рис. 1) поворотом фази для деяких початкових станів.

Для таких модифікацій розробити методи компенсації поворотів фази, які не повинні впливати на фази результатів інших початкових станів. Однокубітні вентилі X (або NOT), T (поворот фази на  $\pi/4$ ), T' (поворот фази на  $-\pi/4$ ), S (поворот фази на  $\pi/2$ ), S' (поворот фази на  $-\pi/2$ ), Z (поворот фази на  $\pi$ ); двокубітні вентилі: CX (або CNOT) – controlled-X, RX – rotate X, CRX – controlled-RX, RY – rotate Y, CRY – controlled-RY, CSX – controlled- $\sqrt{X}$  (controlled-V), CZ – controlled-Z; трьокубітний вентиль CCX – controlled-X (вентиль Тоффолі); чотирикубітний вентиль CCCX – controlled-controlled-Controlled-X (вентиль Тоффолі для 4-х кубітів) [8].

# III. РЕАЛІЗАЦІЯ ВЕНТИЛЯ ТОФФОЛІ

На рис. 1 показано результат обчислення вентиля Тоффолі за допомогою бібліотеки програм Qiskit, яка розроблена для мови програмування Python. Матриця на рис. 1 є більш зручною для аналізу та демонстрації, бо результатом обчислення вентиля Тоффолі є зміна станів трьох кубітів  $|011\rangle$  та  $|111\rangle$  між собою, інші стани не змінюються. Це відповідає індексації кубітів схеми, коли контрольований кубіт є найстаршим у трьокубітній схемі на рис. 2, що є більш зручним для подальшого аналізу.

1	r1	0	0	0	0	0	0	ך0
	0	1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	1	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0	0	0	1
	0	0	0	0	1	0	0	0
	0	0	0	0	0	1	0	0
	0	0	0	0	0	0	1	0
	L0	0	0	1	0	0	0	01

Рис. 1.Вентиль Тоффолі у матричному вигляді у форматі Qiskit

Відомою є модифікація реалізації вентиля Тоффолі [9] для квантової моделі обчислень, яка використовує п'ять двокубітних вентилів і представлена на рис. 2. Основна ідея полягає у тому, що вентилі controlled-V та controlled-V\* виконують поворот фази у прямому ( $\pi/2$ ) та зворотному ( $-\pi/2$ ) напрямку на осі X для різних початкових станів схеми на рис. 2.



Рис. 2. . Симуляція вентиля Тоффолі на основі двокубітних вентилів

Індексація кубітів відбувається справа наліво, тобто стан найстаршого кубіту буде у крайній лівій позиції. Так для схеми на трьох бітах зі станом  $|011\rangle$  найстарший кубіт має стан  $|0\rangle$ . Нумерація кубітів починається з нуля, тому індекс найстаршого кубіта буде дорівнювати двом. На рис. 2 нумерація кубітів відбувається зверху вниз, тобто два верхніх кубіта будуть контролюючими, а ніжній контрольованим і його стан буде змінюватися на протилежний, тільки тоді, коли стани верхніх кубітів є  $|1\rangle$ . У різних джерелах на схемах також використовується індексація кубітів знизу вгору та справа наліво для позначення станів.

Для початкових станів (011) та (111) спрацьовують послідовно два вентилі controlled-V. Вентиль controlled-V\* не спрацьовує тому, що вентиль controlled-NOT міняє стан 1) на стан 0) перед початком контролюючого кубіта (з індексом 1) вентиля controlled-V\*. Обчислення схеми відбувається зліва направо. Виконання вентилів controlled-V два рази повертає фазу на  $\pi/2$ , що дає сумарний поворот на  $\pi$  до осі X та відповідає операції NOT (або X) і стан кубіта змінюється з  $|1\rangle$  на  $|0\rangle$ , або з  $|0\rangle$  на  $|1\rangle$ . На сфері Блоха операція NOT (або X) відповідає переміщенню або з найвищої точки (північний полюс – стан |0)) до найнижчої точки (південний полюс - 1)) по сфері, роблячи поворот на осі Х, або з найнижчої точки до найвищої точки. Для всіх інших початкових станів (000), (001), (010), (100), (101), (110) будуть спрацьовувати вентилі у послідовності controlled-V та controlled-V\* з поворотом фази спочатку на  $\pi/2$ , а потім на  $-\pi/2$ , або вентилі controlled-V\* та controlled-V, з поворотом фази спочатку на  $-\pi/2$ , а потім на  $\pi/2$ , що буде повертати схему у початковий стан і фазу.

#### IV. МЕТОДИ КОМПЕНСАЦІЇ ПОВОРОТІВ ФАЗ

# А. А. Аналіз квантових схем на наявність повороту фази

Будемо використовувати IBM Composer [10], який має великий набір вентилів, для симуляції реалізації вентиля Тоффолі та перевірки коректності результату. Серед доступних вентилів є вентиль controlled- $\sqrt{X}$ . Вентиль  $\sqrt{X}^{T}$ присутній, але, на жаль, не має версії, яка має контрольований вхід. Замість вентилів  $\sqrt{X}$ ,  $\sqrt{X}^{T}$  використаємо вентилі controlled-RX( $\pi/2$ ) та controlled-RX( $-\pi/2$ ). Реалізація вентиля Тоффолі на основі таких вентилів має наступну реалізацію на рис. 3, яка відрізняється від реалізації на рис. 2 тим, що вентиль controlled-V для 0-го та 2-го кубітів переміщено на початок схеми у ліву позицію. Цей вентиль (для кубітів 0 та 2) відрізняється від інших вентилів на рис. 2 тим, що його переміщення на будь-яку позицію схеми не впливає на результат схеми на рис. 3.



Рис. 3. Результати обчислення модифікації реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRX, CX для початкових станів |011) та |111)

Реалізація вентиля Тоффолі на рис. 3 має недолік, який полягає у тому, що результати обчислення схеми для початкових станів  $|011\rangle$  та  $|111\rangle$  мають поворот фази на  $3\pi/2$ . Поворот фази можна дослідити за допомогою симулятора IBM Composer [10]. Результати обчислення всіх комбінацій за схемою на рис. 3 надано у матричному вигляді у форматі Qiskit на рис. 4, де можна побачити, що поворот фази на  $3\pi/2$  відповідає значенням -i в матриці.

۲1	0	0	0	0	0	0	ך 0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-i
0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0
LO	0	0	-i	0	0	0	0

Рис. 4. . Результати обчислення модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі у матричному вигляді (з врахуванням повороту фази)

У разі реалізації квантових схем найбільша складність виникає у отриманні результату у необхідній фазі. Далі покажемо метод, який компенсує поворот фази на  $3\pi/2$ .

Розглянемо спочатку наступні дві леми, доведення яких є тривіальним, але ці леми є дуже важливими.

# В. В. Методи компенсації повороту фази на π/2 та 3π/2 для початкового стану |11>

Лема 1. Для двокубітної схеми для початкового стану  $|11\rangle$  поворот фази на  $\pi/2$  може бути отримано за допомогою двох вентилів СХ, двох вентилів Т (поворот фази на  $\pi/4$ ) та одного вентиля Т' (поворот фази на  $-\pi/4$ ).

Схема показана на рис. 5, а результат обчислення схеми наведено на рис. 6.



Рис. 5. Схема повороту фази на  $\pi/2$  для початкового стану  $|11\rangle$ 

[1	0	0	0
0	1	0	0
0	0	1	0
Lo	0	0	i.

Рис. 6. Поворот фази на  $\pi/2$  для стану  $|11\rangle$  у матричному вигляді

Лема 2. Для двокубітної схеми для початкового стану  $|11\rangle$  поворот фази на  $3\pi/2$  може бути отримано за допомогою двох вентилів СХ, одного вентиля Т (поворот фази на  $\pi/4$ ) та двох вентилів Т' (поворот фази на  $-\pi/4$ ).

Схема показана на рис. 7, а результат обчислення схеми наведено на рис. 8.



Рис. 7. . Поворот фази на  $3\pi/2$  для початкового стану  $|11\rangle$ 



Рис. 8. . Поворот фази на  $3\pi/2$  для початкового стану  $|11\rangle$ 

С. С. Метод компенсації повороту фази на  $3\pi/2$  для початкових станів  $|011\rangle$  та  $|111\rangle$ 

Якщо поворот фази на  $\pi/2$  розглядати як поворот фази на  $-3\pi/2$ , то лему 1 можна використати для леми 3.

Лема 3. Компенсація повороту фази на  $3\pi/2$  модифікації реалізації вентиля Тоффолі на основі трьох вентилів CRX (controlled-RX), двох вентилів CX (controlled-X) для початкових станів |011) та |111) може бути виконана за допомогою двох вентилів T (поворот фази на  $\pi/4$ ) та одного вентиля T' (поворот фази на  $-\pi/4$ ).

Доведення. Вентилі СХ, Т, Т`, які показані додатково на рис. 9 з правого боку схеми та виділено синім прямокутником, дозволяють компенсувати фазу на  $3\pi/2$  (лема 1).



Рис. 9. Компенсація повороту фази на 3π/2 результатів для початкових станів [011) та [111) за схемою обчислення

Виявляється, що вентилі СХ, які знаходяться на схемі лівіше від доданих вентилів та виділені зеленим кольором, можуть бути використані замість доданих. Остаточно отримуємо наступну схему, яка представлена на рис. 10.



Рис. 10. Реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRX, CX, T, T'

Лему доведено.

# D. D. Метод компенсації повороту фази на π для початкового стану |111>

Наступний метод компенсації повороту фази розглянемо для модифікації реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY та CX, яка наведена на рис. 11. Недоліком такої модифікації є те, що для початкового стану  $|111\rangle$  виникає поворот фази на  $\pi$ , як показано на рис. 12.



Рис. 11. Обчислення результату модифікації реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів СRY, СХ для початкового стану |111>

Лема 4. Компенсація повороту фази на  $\pi$  модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі трьох вентилів CRY (controlled-RY), двох вентилів CX (controlled-X) може

бути виконана за допомогою одного вентиля S (поворот фази на  $\pi/2$ ), одного вентиля S' (поворот фази на  $-\pi/2$ ), двох вентилів T (поворот фази на  $\pi/4$ ) та одного вентиля T' (поворот фази на  $-\pi/4$ ).

Доведення. Результат обчислення модифікації (див. рис. 11) надано на рис. 12.

г1	0	0	0	0	0	0	ך 0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	-1
0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0
LO	0	0	1	0	0	0	0 ]

Рис. 12. Результат обчислення модифікації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, CX у матричному вигляді у форматі Qiskit

Компенсацію повороту фази для такої схеми реалізації для початкового стану [111] можна розділити на два кроки.

На першому кроці додаймо вентилі S та S`, як показано на рис. 13, що дозволяє отримати схему з результатами, як у схеми на рис. 3, в якій присутній поворот фази на  $3\pi/2$ для початкових станів |011) та |111).



Рис. 13.. Перший крок компенсації повороту фази модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, CX

На другому кроці використаємо лему 1 та отримаємо модифікацію, зображену на рис. 14, та результати обчислення якої відповідають реалізації вентиля Тоффолі.



Рис. 14. Схема реалізації вентиля Тоффолі на основі венитлів CRY, CX, S, S<sup>•</sup>, T, T<sup>•</sup>

Лему доведено.

# *E. E. Метод компенсації повороту фази на π для початкового стану* |101).

Для отримання наступної модифікації використаємо схему на рис. 11 для заміни вентиля CRY для 0-го та 2-го кубітів вентилями RY ( $\pi/4$ ), CX, RY ( $-\pi/4$ ) та отримаємо наступну схему на рис. 15.



Рис. 15. Модифікація схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX

Дана схема відрізняється від схеми реалізації вентиля Тоффолі тим, що у разі обчислення схеми з початковим станом  $|101\rangle$  виникає поворот фази на  $\pi$ . Таку схему ще називають вентилем Марголуса [11], який представлено у матричному вигляді на рис. 16.

٢1	0	0	0	0	0	0	ך0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	-1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0
L0	0	0	1	0	0	0	01

Рис. 16.. Вентиль Марголуса у матричному вигляді у форматі Qiskit

Лема 5. Компенсація повороту фази на  $\pi$  модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі двох вентилів СRY (controlled-RY), двох вентилів RY (rotate-Y), двох вентилів CX (controlled-X) може бути виконана за допомогою двох вентилів CZ (controlled-Z), одного вентиля S, одного вентиля S', двох вентилів T та одного вентиля T'.

Доведення. Компенсацію повороту фази для такої схеми розділимо на три кроки.

На першому кроці за допомогою двох вентилів CZ (controlled-Z) вентиль Марголуса може бути трансформований у схему, яка показана на рис. 17, 18.



Рис. 17. Модифікація схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ та присутнім поворотом фази на π результату для початкового стану |011>

<b>r</b> 1	0	0	0	0	0	0	ך0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0
LO	0	0	-1	0	0	0	0]

Рис. 18. Модифікації реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів СRY, RY, CX, CZ у матричному вигляді у форматі Qiskit

На другому кроці схему на рис. 17 за допомогою вентилів S та S' трансформує у схему, яка показана на рис. 19, та яка має результати, наведені на рис. 20.



Рис. 19. Модифікація схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ, S, S` та присутнім поворотом фази на  $\pi/2$  для початкових станів |011) та |111)

г1	0	0	0	0	0	0	ך0
0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	i
0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	1	0
L0	0	0	i	0	0	0	0]

Рис. 20. Модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ, S, S` у матричному вигляді у форматі Qiskit

Схема на рис. 20 має поворот фази на  $\pi/2$  у разі обчислення схеми для початкових станів  $|011\rangle$  та  $|111\rangle$ . Такий поворот фази може бути компенсований за рахунок додавання фази  $-\pi/2$  (або  $3\pi/2$  для отримання фази  $2\pi$ ).

На третьому кроці використаємо лему 2 та остаточно отримаємо схему, зображену на рис. 21, та, результати обчислення якої відповідають реалізації вентиля Тоффолі.



Рис. 21. Реалізація вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ, S, S`, T, T` (варіант 1)

Аналогічного результату можна досягти на основі леми 1 та заміни вентилів S на S', S' на S, T на T', T' на T. Отримаємо схему на рис. 22.



Рис. 22. Реалізація вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ, S, S`, T, T` (варіант 2)

## Лему доведено.

Модифікація схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів RY, CRY, CX, CZ, яка має поворот фази на  $\pi$ для початкового стану  $|011\rangle$  може бути трансформована у схему, яка має поворот фази на  $\pi$  для початкового стану  $|111\rangle$  за допомогою двох додаткових вентилів Z (поворот фази на  $\pi$ ). Модифікація схеми такої реалізації показана на рис. 23.



Рис. 23. Модифікація схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX, CZ, Z та присутнім поворотом фази на  $\pi$  для початкового стану [111].

Модифікації схеми реалізації вентиля Тоффолі на основі вентилів CRY, RY, CX (рис. 15, 17, 19, 23) не є оптимальними, але, як уже було зазначено раніше, вони можуть бути використані для реалізації вентилів Тоффолі на чотирьох кубітах (та більших порядків) заміною вентилів CX вентилями ССХ (СССХ і т.д.) та додаванням вентилів для компенсації поворотів фази. Методи компенсація поворотів фаз для вентилів більших порядків у рамках даної роботи не розглядаються.

#### V. Висновки

У роботі розглянуто методи компенсації поворотів фаз для визначених початкових станів. Особливістю методів є те, що компенсації не впливають на фази результатів для інших початкових станів. У роботі показано, яким чином можуть бути використані запропоновані методи для компенсації поворотів фаз для отримання реалізацій вентилів Тоффолі на трьох кубітах. Методи компенсації поворотів фази надані у вигляді лем. Методи можуть бути використані не тільки для реалізації вентиля Тоффолі, а й для компенсації фаз для визначених початкових фаз більш складних квантових схем. Розглянуті методи можуть бути також використані для отримання великої кількості реалізацій універсальних вентилів таких як Тоффолі, Переса і т.д., які базуються на різних базових вентилях, що дозволяє оптимізувати частини великих квантових схем. Такими схемами можуть бути схеми реалізації операцій бгаторозрядної арифметики у квантовій моделі обчислень.

#### **ЛІТЕРАТУРА REFERENCES**

- [1] Zadiraka, V.K., Tereshchenko, A.M. Calculating the Sum of Multidigit Values in a Parallel Computational Model. Cybern Syst Anal (2022).
- [2] A. Tereshchenko, V. Zadiraka, "Algorithm for calculation the carry and borrow signs in multi-digit operations in the parallel computational model", International Journal of Computing, 22(1), 21-28. (2023).
- [3] Tereshchenko A., Zadiraka V. Generating Big Numbers for Testing Multi-Digit Arithmetic Algorithms. Cybernetics and Computer Technologies, 2021, ISSUE 2, P. 39-56.
- [4] Draper, T. G. (2000). Addition on a quantum computer. arXiv preprint quant-ph/0008033.
- [5] Larasati, H.T.; Awaludin, A.M.; Ji, J.; Kim, H. Quantum Circuit Design of Toom 3-Way Multiplication. Appl. Sci. 2021, 11, 3752. https://doi.org/10.3390/app11093752
- [6] T. Toffoli "Reversible Computing", in Automata, Languages and Programming, eds.J. W. de Bakker and J. van Leeuwen (Springer, New York, 1980), p. 632; Technical Memo MIT/LCS/TM-151, MIT Lab. for Comp. Sci. (unpublished).
- [7] A. Peres, "Reversible logic and quantum computers", Phys. Rev. A 32, 3266 (1985).
- [8] https://en.wikipedia.org/wiki/List\_of\_quantum\_logic\_gates#Barenco
- [9] Richard Cleve. Quantum Information Processing. Quantum Algorithms (I). Institute for Quantum Computing & Cheriton School of Computer Science University of Waterloo September 22, 2021 [RC]
- [10] https://quantum.ibm.com/composer
- [11] Barenco, Adriano; Bennett, Charles H.; Cleve, Richard; DiVincenzo, David P.; Margolus, Norman; Shor, Peter; Sleator, Tycho; Smolin, John A.; Weinfurter, Harald (1995-11-01). "Elementary gates for quantum computation". Physical Review A. 52 (5). American Physical Society (APS): 3457–3467. arXiv:quant-ph/9503016.