SRTP-量子计算基础

2023 年 6 月 8 日

目录

1. 量子计算理论
2. 量子优化算法
3. 变分量子算法

量子计算背景

- **经典计算的特性**
  - n 位寄存器只能同时表示 2^n 个数中的一个
  - 电路具有较好的稳定性
- **经典计算的挑战**
  - 芯片尺寸逼近物理极限，性能提升较小
  - 数据量增大，并行计算能耗增大
- **量子计算的特性**
  - 叠加态具备高效编码性，计算并行性
  - 观测后量子态依概率坍陷至经典态
- **量子计算的挑战**
  - 量子算法设计难度较高
  - 量子设备的不稳定性，可操作的量子比特数少

量子计算理论

单量子比特

- $\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle \to$ 基态
- $\left|\psi\right\rangle = \alpha\left|0\right\rangle + \beta\left|1\right\rangle,\ \alpha, \beta \in \mathbb{C},\ |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$
- $\left|0\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \left|1\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \left|\psi\right\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$
- $\left\langle\psi\right| = \left|\psi\right\rangle^\dagger = \alpha^*\left\langle 0\right| + \beta^*\left\langle 1\right| = \begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix}$
- $\left\langle\psi_1|\psi_2\right\rangle = (\alpha_1^*\left\langle 0\right| + \beta_1^*\left\langle 1\right|)(\alpha_2\left|0\right\rangle + \beta_2\left|1\right\rangle) = \alpha_1^*\alpha_2 + \beta_1^*\beta_2$

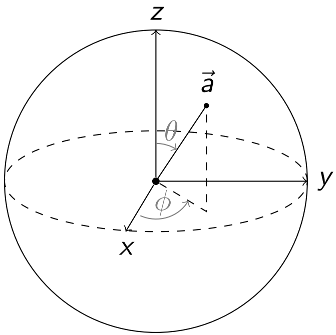
单量子比特门

- $U^\dagger U = UU^\dagger = I,\ U \in \mathbb{C}^{2\times 2}$
- $H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, H\left|0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|0\right\rangle + \left|1\right\rangle) = \left|+\right\rangle, H\left|1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|0\right\rangle - \left|1\right\rangle) = \left|-\right\rangle$
- $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \to$ 泡利矩阵

量子计算理论

布洛赫球面（Bloch Sphere）

- 量子态全局相位可以忽略
- $|\psi\rangle = {\color{red}e^{-i\alpha_1}}(\cos\frac{\theta}{2}e^{i\alpha_1}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\alpha_2}|1\rangle) = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle$
- $R_X(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}{\color{red}X}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$, $R_Y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}{\color{red}Y}} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$, $R_Z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}{\color{red}Z}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$
- $U(\theta,\phi,\lambda) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -e^{i\lambda}\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} & e^{i(\phi+\lambda)}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$



量子计算理论

双量子比特

- 张量积：

$$|0\rangle \otimes |0\rangle \to |00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ 或 $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle \to$ 基态
- $(\langle\psi_1| \otimes \langle\psi_2|)(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle) = \langle\psi_1|\phi_1\rangle \langle\psi_2|\phi_2\rangle$

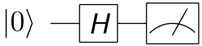
双量子比特门

- $(U_1 \otimes U_2)(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = (U_1 |\psi_1\rangle) \otimes (U_2 |\psi_2\rangle)$
- $CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
- $CNOT|00\rangle = |00\rangle, CNOT|01\rangle = |01\rangle, CNOT|10\rangle = |11\rangle, CNOT|11\rangle = |10\rangle$

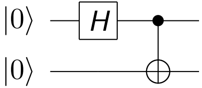
量子计算理论

量子线路

- 组成：初始量子态 + 量子门 + 观测
- 非纠缠态：可以写作张量积形式，
  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) = [\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)] \otimes |0\rangle$
- 纠缠态：不可以写作张量积形式，
  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$
- 对量子比特观测只能得到一个值，概率幅通过“频率近似概率”获得



- $|\psi\rangle = H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$



- $$\begin{aligned} |\psi\rangle &= CNOT(H \otimes I)(|0\rangle \otimes |0\rangle) \\ &= CNOT(\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \end{aligned}$$

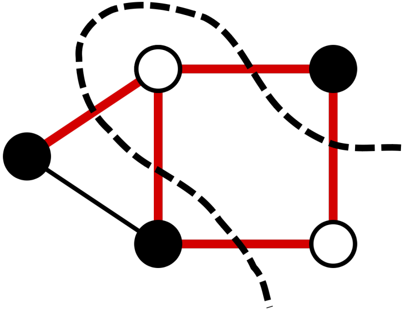
量子优化算法

优化问题示例-Max Cut

- 顶点 $\to z_i$，$i = 0, \cdots, n-1$；集合 1 取值为 $+1$，集合 2 取值为 -1
- 切割边 $\to z_i z_j = -1$，非切割边 $\to z_k z_l = 1$
-

$$\text{最小化} \quad \sum_{(j,k)\in E} z_j z_k$$

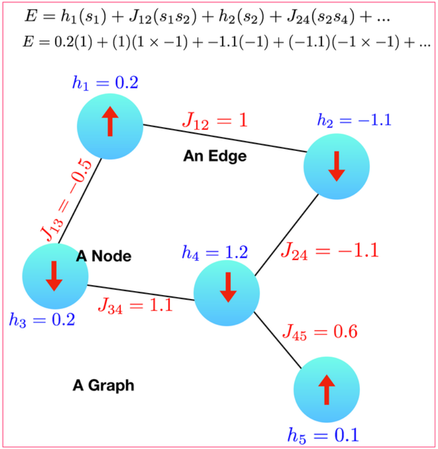
$$\text{约束条件} \quad z_j \in \{-1, 1\}, \quad j = 0, \cdots, n-1$$



量子优化算法

伊辛模型（Ising Model）

- 自旋粒子的铁磁相互作用 $\rightarrow$ 寻找系统的最小能量状态
- 自旋向上 $\rightarrow z_j = 1$，自旋向下 $\rightarrow z_j = -1$
- 能量由哈密顿量（Hamiltonian）表征 $\rightarrow H = -\sum_{j,k} J_{jk} z_j z_k - \sum_j h_j z_j$



量子优化算法

优化问题的量子形式

- $\langle 0|\, Z\, |0\rangle = 1, \langle 1|\, Z\, |1\rangle = -1$
- $\langle 010|\, Z \otimes Z \otimes I\, |010\rangle = 1 \cdot (-1) \cdot 1 = -1$
- $Z \otimes Z \otimes I \to Z_0 Z_1$
- 可行解 $x \in \{000, 001, ..., 111\}$
- 最小化 $\left\langle x \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| x \right\rangle$
- 考虑一般量子态
  $|\psi\rangle = \sum_x a_x\, |x\rangle\,,\ \sum_x |a_x|^2 = 1$
- 等价量子形式 $\to$ 最小化
  $\left\langle \psi \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| \psi \right\rangle$

$$
\begin{aligned}
\left\langle \psi \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| \psi \right\rangle &= \sum_{(j,k)\in E} \langle \psi | Z_j Z_k | \psi \rangle \\
&= \sum_{(j,k)\in E} \sum_x |a_x|^2 \, \langle x | Z_j Z_k | x \rangle \\
&= \sum_x |a_x|^2 \left\langle x \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| x \right\rangle \\
&\geq \sum_x |a_x|^2 \left\langle x_{min} \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| x_{min} \right\rangle \\
&= \left\langle x_{min} \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| x_{min} \right\rangle \sum_x |a_x|^2 \\
&= \left\langle x_{min} \middle| \sum_{(j,k)\in E} Z_j Z_k \middle| x_{min} \right\rangle
\end{aligned}
$$

量子优化算法

QUBO 模型（Quadratic Unconstrained Binary Optimization）

- 记 $q(x_0, x_1, ..., x_m)$ 为关于 x_j 的二次多项式，$x_j \in \{0, 1\}$
- QUBO 形式：

$$\begin{aligned} &\text{最小化} \quad q(x_0, x_1, ..., x_m) \\ &\text{约束条件} \quad x_j \in \{0, 1\}, \quad j = 0, ..., m \end{aligned}$$

模型转化

- 代换 $z_j = 1 - 2x_j$ 从 Ising 模型转化为 QUBO 模型

量子优化算法

绝热量子计算理论（Adiabatic Quantum Computing）

- 时变薛定谔方程 $H(t)\left|\psi(t)\right\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle$
- 绝热演化:系统一直在基态之间演化，不会跃迁到激发态，因此只需要对演化后的系统观测就可以得到优化问题的可行解
- 绝热定理:演化时间与能级间隙的平方成反比

- 记 H_0 为初始哈密顿量，H_1 为优化问题编码的哈密顿量
- 在 $[0, T]$ 内考虑 $H(t) = A(t)H_0 + B(t)H_1$，选择 $A(t)$ 与 $B(t)$ 为实值函数且满足 $A(0) = B(T) = 1, A(T) = B(0) = 0$

量子优化算法

量子退火计算机

- 限制条件下的绝热量子计算：
  - 哈密顿量选择有限
  - 演化过程不保证绝热
- $H_0 = -\sum_{j=0}^{n-1} X_j$, $H_1 = -\sum_{j,k} J_{jk} z_j z_k - \sum_j h_j z_j$
- 只需要确保足够接近最优的解对应概率幅足够大即可
- 量子退火计算机规模一般较大，D-wave Advantage>5000

D:Wave
The Quantum Computing Company™

Ocean

量子优化算法

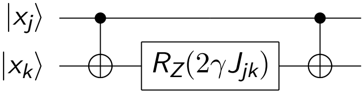
QAOA 模型（Quantum Approximate Optimization Algorithm）

- 绝热量子计算 $\rightarrow$ 量子线路模型
- 对哈密顿量演化离散化：$\left(\prod_{m=0}^{p} e^{i\Delta t[A(t_m)H_0+B(t_m)H_1]}\right)|\psi_0\rangle$，其中 $t_m = m\frac{\Delta t}{T}, p = \frac{T}{\Delta t}$
- Lie-Trotter 公式 :对于足够小的 Δt，满足 $e^{i\Delta t[A(t_c)H_0+B(t_c)H_1]} = e^{i\Delta tA(t_c)H_0}e^{i\Delta tB(t_c)H_1}$
- 构建量子线路制备 $e^{i\beta_p H_0}e^{i\gamma_p H_1}\cdots e^{i\beta_1 H_0}e^{i\gamma_1 H_1}|\psi_0\rangle$，记为 $|\beta,\gamma\rangle$，其中 $\beta = (\beta_1, ..., \beta_p), \gamma = (\gamma_1, ..., \gamma_p)$
- 如何找到最优的 $\beta,\gamma \rightarrow$ 最小化 $E(\beta,\gamma) = \langle\beta,\gamma|H_1|\beta,\gamma\rangle$

量子优化算法

量子线路实现

- $H_0 = -\sum_{j=0}^{n-1} X_j$ 对应的基态为 $|+\rangle \otimes \ldots \otimes |+\rangle$，可以通过 Hadamard 门制备
- $e^{i\beta_k H_0} = \prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\beta_k X_j} = R_X(2\beta)$
- $e^{i\gamma_l H_1} = e^{-i\gamma_l(\sum_{j,k} J_{jk} Z_j Z_k + \sum_j h_j Z_j)} = \prod_{j,k} e^{-i\gamma_l J_{jk} Z_j Z_k} \prod_j e^{-i\gamma_l h_j Z_j}$
- $e^{-i\gamma_l h_j Z_j} = R_Z(2\gamma h_j)$
- $e^{-i\gamma_l J_{jk} Z_j Z_k}$ 可用如下量子线路表示

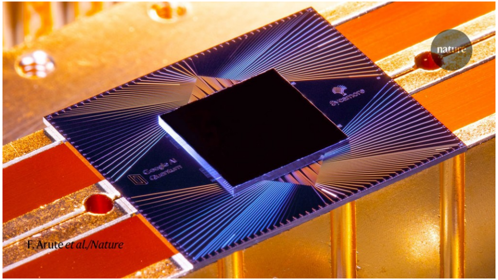


量子优化算法

日期	阶段性任务
2023 年 7 月-2023 年 8 月	量子计算理论基础（量子线路模型、绝热量子计算模型）
2023 年 8 月-2023 年 9 月	Ocean 框架，D-Wave Leap 云平台的学习与应用
2023 年 9 月-2023 年 10 月	以 Max-Cut，旅行商等组合优化问题为例，探究在 Ising, QUBO 框架下量子优化算法与经典优化算法的复杂度等指标差异

变分量子算法背景

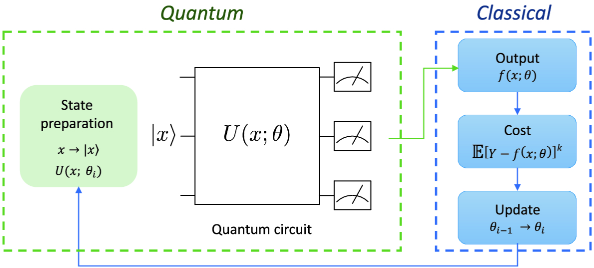
- **量子计算机的目标**：大规模，容错
- **现阶段量子计算机的限制**：
  有噪中规模量子设备（NISQ），50-100 量子比特，对环境较敏感，具有 $10^{-3} - 10^{-2}$ 的误差率
- **应用限制**：有限的量子比特数，量子比特之间的连接，量子线路的深度，有希望体现“量子优越性”



图：Google 的超导量子芯片，在 NISQ 上验证了“量子优越性”

变分量子算法背景

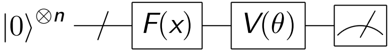
- **变分量子算法（VQA）：**
  - 参数化量子线路 + 经典优化算法
  - **优势**：通用性，适配 NISQ 物理限制
  - **挑战**：可训练性，准确性，高效性



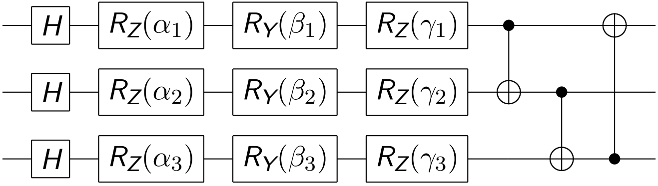
图：VQA 的基本流程

量子神经网络

- 组成：编码线路 + 网络模型 + 观测
- 观测算子 → 将观测结果映射到观测算子的不同特征值上，数学形式为厄密算子，例如 $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- 参数梯度估计 $\nabla_\theta E(\theta) = \frac{1}{2}[E(\theta + \frac{\pi}{2}) - E(\theta - \frac{\pi}{2})]$



图：量子神经网络示意图



图：隐藏层示意图

量子神经网络

基本编码方法

角度编码

- $x_i \rightarrow R_Y(x_i)\left|0\right\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{x_i}{2} & -\sin\frac{x_i}{2} \\ \sin\frac{x_i}{2} & \cos\frac{x_i}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x_i \rightarrow R_z(\arctan x_i^2) R_Y(\arctan x_i) H \left|0\right\rangle$
- **优势**：可将输入特征展开到高维空间
- **缺点**：占用的量子比特数与数据大小一致

振幅编码

- $\left|\psi\right\rangle = x_0 \left|00...0\right\rangle + x_1 \left|00...1\right\rangle + ... + x_{2^n-1} \left|11...1\right\rangle$
- **优势**：利用量子的高效编码性
- **缺点**：不能改变原始数据的特征分布

量子神经网络

简单二分类示例

$$|0\rangle \; — \boxed{R_X(x)} — \boxed{R_Z(\theta_1)} — \boxed{R_Y(\theta_2)} — \boxed{R_Z(\theta_3)} — \boxed{Z}$$

- 记 $U(x,\theta) = R_Z(\theta_3)R_Y(\theta_2)R_Z(\theta_1)R_X(x)$，则 $U(x,\theta)^\dagger = R_X(x)^\dagger R_Z(\theta_1)^\dagger R_Y(\theta_2)^\dagger R_Z(\theta_3)^\dagger$
- 计算式

$$\begin{aligned} f_\theta(x) &= \langle 0| U(x,\theta)^\dagger Z U(x,\theta) |0\rangle \\ &= \cos\theta_2 \cos x - \sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin x \end{aligned}$$

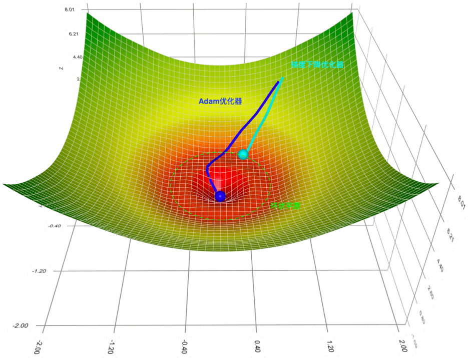
- 分类依据

$$y = \begin{cases} 1, f_\theta(x) > 0 \\ -1, f_\theta(x) < 0 \end{cases} \tag{1}$$

量子神经网络

可训练性

- 贫瘠高原现象：损失函数的优化曲面平坦，基于梯度下降法无法达到极小值
- 因素：初始参数、编码方法、网络结构、网络深度、观测算子、优化器



图：量子线路的“贫瘠高原”现象

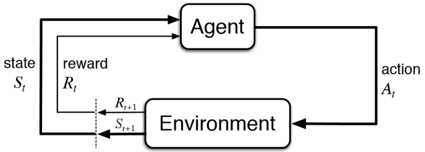
量子强化学习

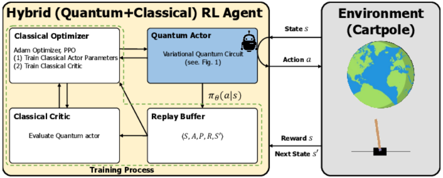
经典强化学习

- 智能体基于状态s_t，利用策略π 选择动作a_t，作用于环境并获得奖励r_t
- 目标：最大化奖励 $R_t = \sum_{t'=t}^{T} \gamma^{t'-t} r_{t'}$

量子强化学习

- 变分量子线路替换智能体模型
- 状态 s_t 进行量子态编码



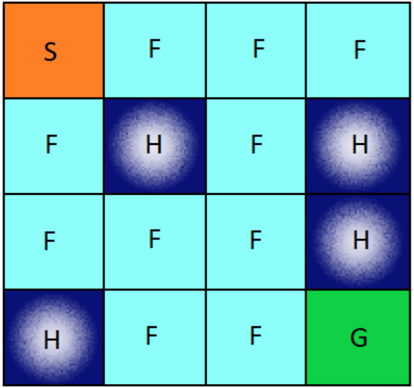


量子强化学习

强化学习示例

- 16 个离散状态
- 可行动作：向上、向下、向左、向右

位置	奖励
洞	-0.2
目标	1.0
其他	-0.01

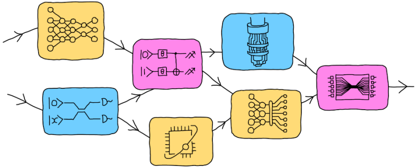


编程框架与量子计算云平台

- 编程框架：Python(Qiskit,Pennylane,Pytorch,Tensorflow...)
- 量子计算云平台： IBM Quantum Experience, Xanadu Cloud, ...
- 实验平台： 理想量子模拟器、含噪量子模拟器、真实量子计算机

Qiskit

Elements for building a quantum future



PENNYLANE

量子强化学习

日期	阶段性任务
2023 年 7 月-2023 年 8 月	量子计算理论基础（量子线路模型、变分量子算法）
2023 年 8 月-2023 年 9 月	Qiskit 或 Pennylane 框架，Pytorch 或 Tensorflow 框架，IBM Quantum Experience 云平台的学习，构建初步的量子-经典混合计算模型
2023 年 9 月-2023 年 10 月	以 Frozen Lake 离散状态环境为例，探究经典强化学习方法，构建初步的量子 Q-Learning 算法

The End