

南 京 师 范 大 学

毕 业 设 计（论 文）

（2021 届）



题 目:	目标量子态生成方法的研究与实现
学 院:	计算机与电子信息学院/人工智能学院
专 业:	计算机科学与技术
姓 名:	杨 川
学 号:	07170316
指导教师:	段博佳

南京师范大学教务处 制

摘 要

量子机器学习的广阔应用前景受到了众多学者的关注，利用量子计算机特有的量子优势，量子机器学习可以完成许多传统计算机中人工智能所无法完成的任务。在科学实践中，量子态在被观测后会坍缩成某一本征态而无法恢复，这给实验带来了不小困扰，因此，找到一种根据已有目标量子态生成出与之相同（或相近）量子态的方法，显得尤为重要。

本文利用量子生成对抗网络模型，开展目标量子态的生成实验，试图为解决这一问题提供新的思路与方法，并且完成了单量子比特纯态的生成。

在具体的工作中，本文在前人的研究基础上，利用百度量浆等开发工具，给出了模型的初步设计，包括判别器与生成器的量子线路设计，模型目标函数的定义。并在 Jupyter Notebook 上开展模拟实验，通过调整学习率、迭代次数等训练参数的方式，分析找出模型生成量子态保真度不高的原因。在此基础上，采用优化线路、组合搭配等方法，给出了四种优化后的量子生成对抗网络模型。通过实验，找出其中生成单量子比特纯态保真度最高、效果最佳的一个模型，并将其与优化前的模型作对比分析。此外，本文还给出了模型训练的可视化过程，优化了模型的目标函数，使得对于模型收敛过程的判断更加简洁明了。

关键词：量子计算；量子生成对抗网络；目标量子态；量子线路

Abstract

The broad application prospects of quantum machine learning have attracted the attention of many scholars. Using the unique quantum advantages of quantum computers can quantum machine learning accomplish many tasks that artificial intelligence in traditional computers unable to. In scientific practice, the quantum state will collapse into a certain eigenstate after being observed and then cannot be recovered, which has brought a lot of trouble to the experiment. Therefore, finding a way to generate many quantum states that are the same (or similar) as the existing target quantum state is particularly crucial.

This paper uses the Quantum Generative Adversarial Networks to carry out target quantum state generation experiment, trying to provide new ideas and methods for solving this problem and completing the single-qubit pure state generation.

More specifical, based on previous research, this paper uses development tools such as Baidu PaddlePaddle to give the actual design of the model, including the quantum circuit design of the discriminator and generator, with the definition of the model function. This paper also carries out simulation experiments on Jupyter Notebook by adjusting the training parameters such as learning rate, iteration number, etc., to find out the reason for the low fidelity of the quantum state generated by the model. On this basis, four optimized Quantum Generative Adversarial Networks are given using methods such as optimizing and combing different quantum circuits of the discriminator and generator. Through experiments, we found one out of the four optimized models with the highest fidelity and best effect for generating single-qubit pure state, and compared it with the model before optimization. In addition, this article also gives the visualization process of model training and optimizes the model function, which makes the judgment of the model convergence process more concisely and clearly.

Key words: quantum computing; quantum generative adversarial network; target quantum state; quantum circuit

目 录

摘 要.....	2
Abstract.....	3
图表清单.....	6
注释表.....	8
缩略词.....	8
第一章 绪论	9
1.1 课题背景及意义	9
1.2 课题研究现状	10
1.2.1 生成对抗网络概要	10
1.2.2 量子生成对抗网络概要	11
1.2.3 课题国内外研究现状	11
1.3 论文主要工作	12
1.4 论文结构	13
第二章 量子算法理论基础	14
2.1 量子计算	14
2.1.1 量子比特	14
2.1.2 量子比特门	15
2.1.3 量子线路	16
2.2 量子力学引论	17
2.2.1 线性代数	18
2.2.2 POVM 测量	18
2.3 变分量子线路	19
2.4 本章小结	20
第三章 模型设计与目标量子态的生成	21
3.1 量子线路设计	21
3.1.1 生成器量子线路设计	22
3.1.2 判别器量子线路设计	23

3.2 目标函数设计	24
3.3 目标量子态生成实验	25
3.3.1 实验环境	25
3.3.2 实验过程	26
3.3.3 量子态数据与分析	28
3.4 小结	32
第四章 模型优化与目标量子态的提高	33
4.1 量子线路优化	33
4.1.1 生成器量子线路优化	33
4.1.2 判别器量子线路优化	34
4.1.3 优化后的四种组合模型	35
4.2 目标函数优化	37
4.3 目标量子态生成实验	38
4.3.1 实验过程	38
4.3.2 量子态数据与分析	39
4.4 小结	44
第五章 总结与展望	45
5.1 论文研究工作总结	45
5.2 进一步的工作展望	46
参考文献	47
致 谢	49

图表清单

图 2 - 1 受控 U 门	16
图 2 - 2 受控非门的两种表示	17
图 2 - 3 表示测量的量子线路符号	17
图 2 - 4 量子变分线路流程图	19
图 3 - 1 量子生成对抗网络模型整体线路流程图	21
图 3 - 2 复制未知经典比特线路图	22
图 3 - 3 复制未知量子比特线路图	22
图 3 - 4 QGAN-o 生成器量子线路图	23
图 3 - 5 QGAN-o 判别器量子线路图	24
图 3 - 6 制备已有的目标量子态的线路	26
图 3 - 7 LR=0.1 时, QGAN-o 模型训练可视化过程	31
图 3 - 8 LR=0.5 时, QGAN-o 模型训练可视化过程	31
图 4 - 1 删减优化后的 QGAN 生成器线路	33
图 4 - 2 增加优化后的 QGAN 生成器线路	34
图 4 - 3 删减优化后的 QGAN 判别器线路	34
图 4 - 4 增加优化后的 QGAN 判别器线路	35
图 4 - 5 QGAN- γ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现	35
图 4 - 6 QGAN- δ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现	36
图 4 - 7 QGAN- ζ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现	36
图 4 - 8 QGAN- η 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现	37
图 4 - 9 QGAN- γ 未优化目标函数在学习率 LR=0.1 下的实验可视化过程	42
图 4 - 10 QGAN- γ 未优化目标函数在学习率 LR=0.2 下的实验可视化过程	42
图 4 - 11 QGAN- γ 模型优化目标函数后在学习率 LR=0.1 下的实验可视化过程	43
图 4 - 12 QGAN- γ 模型优化目标函数后在学习率 LR=0.2 下的实验可视化过程	43

表 3 - 1 学习率 $LR=0.1$, QGAN-o 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表 ..	28
表 3 - 2 学习率 $LR=0.5$, QGAN-o 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表 ..	29
表 3 - 3 固定迭代次数, QGAN-o 模型不同学习率对应的距离和保真度表	30
表 3 - 4 学习率较小时, QGAN-o 模型不同迭代对应的距离和保真度表	30
表 4 - 1 四个优化模型在训练参数一下对应的距离和保真度表	40
表 4 - 2 四个优化模型在训练参数二下对应的距离和保真度表	40
表 4 - 3 学习率 $LR=0.1$, QGAN- γ 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表 ..	40
表 4 - 4 学习率 $LR=0.2$, QGAN- γ 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表 ..	41

注释表

符号	符号含义
$ \psi\rangle$	量子态
α, β	概率幅
U	作用于量子态的酉算子或酉矩阵
U^\dagger	U 的共轭转置
I	单位矩阵
H	Hadamard 量子门
U_{CN}	受控非门
X, Y, Z	Pauli X,Y,Z 矩阵
M_m	测量算子
$\langle M \rangle$	Hermitian 算子
G_θ, θ_{gen}	生成器的参数
D_ϕ, ϕ_{disc}	判别器的参数

缩略词

缩略词	全称
GAN	Generative Adversarial Network
QGAN	Quantum Generative Adversarial Network
POVM	Positive Operator-Valued Measure
PQC	Parameterized Quantum Circuits
NISQ	Noisy Intermediate-Scale Quantum

第一章 绪论

本章介绍了本文选题的研究背景及研究意义，分析了生成对抗网络和量子生成对抗网络的研究现状及应用前景，概括出本文所做的主要工作，给出了本文的整体结构。

1.1 课题背景及意义

随着信息技术和量子力学的不断发展，量子计算机逐渐进入人们的视野。Shor 量子因子分解^[1]和 Grover 量子搜索^[2]这两类算法的发现展示了量子计算从根本上超越经典计算机的计算能力；由中国科学技术大学潘建伟团队成功构建的 76 个光子量子计算原型机求解数学算法高斯玻色取样只需 200 秒^[3]，展现了量子计算机的强大性能；量子计算可以快速破解 RSA 密码系统的能力，让人们意识到掌握量子计算技术在信息安全领域的重要性^[4]。这些都展现了量子计算未来发展的无限潜能。可以说，量子计算是当下信息技术领域最热门最前沿的研究方向。

在机器学习方面，相较于经典计算机，量子计算机能够高效地产生非典型的模型，比经典计算机有着更出色的表现，量子系统的这一特点被称为量子优势^[4]。

目前，在科学实验中，存在这样一个问题：量子态在被观测后会坍缩成某一本征态而无法恢复，这给实验带来了不小困扰。因此，找到一种根据已有目标量子态生成出与之相同（或相近）量子态的方法，显得尤为重要。

同时，生成对抗网络（Generative Adversarial Network, GAN）是生成模型的一种，是深度学习在近些年中的一个重要发展。生成对抗网络中生成器和判别器进行非合作博弈，其最大的特点就是，在二者达到纳什均衡时，生成器就具备了生成真实数据的能力^[5]。自然地，可以想到利用生成对抗网络的这一特点来进行目标量子态的生成，只不过此时，所搭建的不是传统的生成对抗网络，而是量子生成对抗网络（Quantum Generative Adversarial Network, QGAN），所生成的不是经典数据，而是量子态。

就生成对抗网络这一方面而言，量子生成器（quantum generator）相较于经典生成器（classical generator）有更强大的能力：量子处理器（quantum information processors）使用 $\log N$ 个量子比特表示 N 维空间向量，在对稀疏矩阵的处理上可以达到 $O(\text{poly}(\log N))$ 的时间复杂性，这意味着，在对高维数据集的处理上，量子生成对抗网络比传统的生成对抗网络有更高的性能^[6]。

从实践的角度来看，量子生成对抗网络利用其生成真实数据的能力，根据已有的目标量子态生成出与之相同或相近的量子态，进而从深度学习的角度为目标量子态的生成提供了一种方法，为量子态在观测后坍缩成为本征态而无法恢复这一问题提供了一种新的解决方式，更好地方便科学实验的有效开展。

从计算性能的角度来看，借助量子系统的计算优势，量子生成器在高维数据的处理上有着经典生成器无法比拟的优势，对量子生成对抗网络的研究也可以为经典生成对抗网络如何在高维度计算方面突破性能瓶颈提供新的思路和方法，从而促进经典生成对抗网络的进一步发展。

1.2 课题研究现状

本节将分别给出有关经典生成对抗网络与量子生成对抗网络的研究现状，包括经典生成对抗网络的发展与应用，量子机器学习理论的提出与发展，量子生成对抗网络的提出与研究现状。

1.2.1 生成对抗网络概要

生成对抗网络（Generative Adversarial Network, GAN）是生成模型的一种，是深度学习在近些年中的一个重要发展。它分为两个部分：生成器（generator）和判别器（discriminator）。生成器接受随机的噪声信号，以此为输入来生成所期望得到的数据。判别器接收并判断得到的数据是否来自真实数据，通常输出一个 $P(x)$ ，用来表示输入数据 x 是真实数据的概率。

GAN 采用了纳什均衡（Nash equilibrium）的思想，纳什均衡是指在包含两个或两个以上参与者的非合作博弈（Non-cooperative game）中，假设每个参与者都知道其他参与者均衡策略的情况下，在没有参与者可以通过改变自身策略使自身受益时的一个概念。我们可以把 GAN 的训练过程视为生成器和判别器的博弈过程。在双方博弈过程中，不论生成器的策略是什么，判别器最好的策略就是尽量判别出真实数据和生成数据；而无论判别器的策略是什么，生成器最好的策略就是尽量使判别器无法判别出来。因此博弈的两个当事人的策略组合及其相应的结果就构成了纳什均衡。当真实数据的样本足够多，双方的学习能力足够强时，最终会达到纳什均衡。此时，生成器就具备了生成真实数据的能力，而判别器也无法区分出生成数据和真实数据了^[5]。

生成对抗网络有这样几个特点：一是可以与神经网络做深度融合，二是不依

赖于先验假设，三是可以生成接近真实的数据^[5]。

1.2.2 量子生成对抗网络概要

量子生成对抗网络 (Quantum Generative Adversarial Network, QGAN) 与经典生成对抗网络采用的思路和方法类似，同样具有生成器和判别器，也同样采用纳什均衡的思想。

具体来说，在 QGAN 中，假设已有的目标量子态都来自一个混合态，它们属于同一个系综，其密度算符记为 ρ 。生成器的参数记为 G ，其输入是一个噪声数据，可用一个系综 ρ_z 来表示。每次取出一个随机噪声样本 $|z\rangle$ ，通过生成器后得到生成量子态 $|x\rangle = G|z\rangle$ 。对于生成器，期望生成的 $|x\rangle$ 与目标量子态 ρ 相近；对于判别器，则期望判别器通过具体的测量可以判断输入的量子态是已有的目标态还是生成的量子态。生成器和判别器进行非合作博弈，在达到纳什均衡时，QGAN 就具备了根据已有目标量子态生成出与之相同或相近量子态的能力^{[6][15]}。

1.2.3 课题国内外研究现状

近几年来，国内外对于 GAN 及其应用已有不少研究。

2014 年 10 月，Ian J. Goodfellow 等人于题为 *Generative Adversarial Networks* 的论文中提出了一个通过对抗过程估计生成模型的新框架——生成对抗网络，提出了 GAN 的工作方式和基本原理^[5]。

2016 年，Phillip Isola 等人于题为 *Image-to-Image Translation with Conditional Adversarial Networks* 的论文中利用生成对抗网络技术提出了图像翻译的 pix2pix 模型，用一个统一的框架解决了各类图像翻译问题。该模型简洁优雅，并使用 CGAN (Conditional Generative Adversarial Networks) 处理了一系列的转换问题^[7]。

2017 年，Ting-Chun Wang 等人于题为 *High-Resolution Image Synthesis and Semantic Manipulation with Conditional GANs* 的论文中对 pix2pix 模型进行了改进，提出了一种使用多尺度的生成器和判别器等方式生成高分辨率图像的模型——pix2pixHD 模型，实现了对于同一个输入产生不同的输出的交互式的语义编辑方式^[8]。

2018 年，Ting-Chun Wang 等人于题为 *Video-to-Video Synthesis* 的论文中，在对 pix2pix 和 pix2pixHD 改进的基础上提出了 Vid2Vid 模型，通过加入光流信息作为约束来实现高分辨率视频的生成，进而解决了视频到视频转换过程中前后帧

不一致的问题^[9]。

受到 GAN 的启发，人们提出了量子版本的生成对抗网络模型——QGAN。

2017 年，J Biamonte, P Wittek, N Pancotti 等人发表题为 *Quantum machine learning* 的论文。在结合人工智能技术和量子物理理论的基础上，初步提出了一系列关于量子机器学习的理论^[10]。

之后，Nathan Wiebe, Vedran Dunjko, Scott Aaronson, Carlo Ciliberto 等人从经典和量子多个角度研究量子机器学习，提出了量子机器学习可能拥有的广泛研究前景和一系列问题，使得量子机器学习得到了进一步的发展^[11-14]。

2018 年，Seth Lloyd 等人发表题为 *Quantum Generative Adversarial Learning* 的论文；Benedetti M 等人发表题为 *Adversarial quantum circuit learning for pure state approximation* 的论文，提出了 QGAN 的基本模型与工作原理^{[6][15]}。

2019 年 1 月，清华大学交叉信息学院的孙麓岩教授团队发表题为 *Quantum generative adversarial learning in a superconducting quantum circuit* 的论文，利用量子电路实现了生成式对抗网络^[16]。

目前，经典生成对抗网络的应用主要集中在图像和视频处理方面，量子生成对抗网络在应用方面还比较薄弱，本文在该方向上进行了补充，利用量子生成对抗网络进行目标量子态的生成。这一方面可以为量子态在被观测后坍缩成某一本征态而无法恢复的问题提供一个新的解决方法；另一方面，在改进优化量子生成对抗网络模型以提高生成态保真度的过程中，也对模型进行了更深层次的研究。

1.3 论文主要工作

本文利用已构建的量子生成对抗网络对目标量子态的生成展开研究，完成了单量子比特纯态的生成，并对模型进行优化。所做的主要工作如下：

第一，量子生成对抗网络的构建。在学习掌握了量子计算的基础知识和经典生成对抗网络原理的已有基础上，给出了量子生成对抗网络模型的具体设计，并基于百度 PaddlePaddle 工具集在 Jupyter notebook 平台上完成了模型的构建。

第二，利用构建的量子生成对抗网络进行目标量子态（单量子比特纯态）的生成实验。多次调整不同的训练参数，依次进行训练实验，记录所得数据，分析并给出结论，在此基础上对量子生成对抗网络做进一步的研究。

第三，对量子生成对抗网络做进一步的优化。根据第二步分析数据得到的结

论优化生成器和判别器的量子线路，组合出多种不同的优化模型，通过实验找出生成量子态保真度最高的一个。对目标函数做进一步的改进，简化对于模型收敛过程的判别。

1.4 论文结构

本文共分为五章，各章主要内容如下：

第一章：介绍课题的研究背景及意义、国内外相关的研究现状，阐明目标量子态生成所使用的模型——量子生成对抗网络，说明了本文所做的主要工作及行文组织结构。

第二章：介绍了量子计算的理论基础，包括量子比特，量子比特门，线性代数的数理基础以及常用的量子线路。对量子生成对抗网络所主要采用的构造方法（变分量子线路法）进行了详细的介绍。

第三章：设计模型完成目标量子态的生成实验。设计实现生成器量子线路，判别器量子线路，详细描述了模型各部分所采用的损失函数，完成量子生成对抗网络的设计与实现，并利用其进行单量子比特纯态的生成实验，对实验数据进行分析与研究。

第四章：优化模型提高了目标量子态的生成保真度。在第三章的基础上，通过调整量子门组合等方式优化生成器和判别器的量子线路，搭配出四种优化后的 QGAN 模型，通过实验找出其中生成效果最好的一个，对其做进一步研究，将得到的数据与优化前的模型作对比分析。优化目标函数，简化了对于模型收敛过程的判别。

第五章：总结全文所做的工作，对未来的工作方向进行讨论。

第二章 量子算法理论基础

本文通过构建 QGAN 模型来实现目标量子态的生成。本章介绍的量子计算是模型构建和目标量子态生成的理论基础。2.1 节的量子计算是量子线路搭建的基础知识，包括量子比特和量子比特门。2.2 节介绍量子力学引论，包括线性代数和 POVM 测量，其中线性代数的部分主要介绍了量子算法在设计时所需要遵循的数学规则，测量部分则涉及到对量子算法输出的处理。2.3 节介绍了 QGAN 模型整体设计中的一个重要思想方法——参数化的变分量子线路。

2.1 量子计算

量子力学是一个数学框架或一套构造物理学理论的规则，量子计算的研究对象是用量子力学系统能够完成的信息处理任务。量子力学的规则其实并不复杂，但却让人感到违反直观，而量子计算与量子信息的一个目标就是增进人们对于量子力学在直观上的把握。本小节主要介绍几个量子计算中常用的基本概念^{[4][17]}。

2.1.1 量子比特

比特 (bit) 是经典计算和信息理论的基本概念。同样，量子计算和量子信息也建立在称为量子比特 (quantum bit 或 qubit) 的概念基础上。正如经典比特有一个或 0 或 1 的状态一样，量子也有一个状态，同样是用实际物理系统来实现的。量子比特的两个可能的状态是 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ ，用 Dirac 记号 “ $|\rangle$ ” 来表示。和经典比特不同的是，量子比特的状态可以落在 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 之外，也就是说，量子比特可以是状态的线性组合，称为叠加态^[4] (superposition)。例如：

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2-1)$$

其中 α 、 β 是复数。换句话说，量子比特的状态是二维复向量空间中的一个向量，特殊的 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 状态称为计算基态 (computational basis state)，是构成这个向量空间的一组正交基^[4]。

在经典计算机中，我们可以通过检验一个比特，来确定它的状态是 0 还是 1，但是在量子计算机中，由于用来实现量子比特的实际物理系统的特点，当对一个量子态进行测量的时候会发生坍缩 (collapsing)，它会变为对应于某个测量基的一个特定状态，因而我们无法通过检查某一个量子比特而知道它的状态，即无法得到 α 和 β 的值。量子力学告诉我们，我们只能得到量子状态的有限信息，在测量量子比特时，我们得到 0 的概率为 $|\alpha|^2$ ，得到 1 的概率为 $|\beta|^2$ ，由于概率的一

定是 1，则有

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (2-2)$$

其中， α 和 β 称为概率幅（amplitude），这种把量子比特的状态划归到到长度 1 的要求称为归一化。从几何意义上来说，这可以看作为二维复向量空间中的单位向量^[4]。

正是由于量子态坍缩的特点给实验造成了困扰，所以本文试图利用构建量子生成对抗网络来生成与目标态相同或者相近的量子态，来为这一困扰提供新的解决方案。

2.1.2 量子比特门

经典计算机的线路由连线和逻辑门构成，连线负责传输信息，逻辑门负责处理信息，即把信息从一种形式转换为另一种。例如非门将 0, 1 两个状态互换。类似的，我们可以定义出量子非门，其作用是线性的，会将状态

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2-3)$$

变到 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 状态角色互换的新状态，

$$\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle \quad (2-4)$$

基于这样的线性性质，量子非门可以方便地用矩阵形式表示。定义一个 X 矩阵来表示非门（用记号 X 来表示是由历史原因造成的）如下：

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2-5)$$

同样地，我们可以把量子态 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 也写成向量形式

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (2-6)$$

其中， α 和 β 分别对应 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的幅度。由此，量子非门的输出就是

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} \quad (2-7)$$

因此，对于单量子比特的量子门可以由 2×2 的矩阵给出，对用作量子门的矩阵要求满足酉性（unitary），即 $U^\dagger U = I$ ，其中， U^\dagger 是 U 的共轭转置， I 是 2×2 的单位阵。同时，酉性限制也是对量子门的唯一限制^[4]。

下面给出本文第三、四章会常用到的几个量子门^[4]。一个是 Z 门

$$Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2-8)$$

它的作用是保持 $|0\rangle$ 不变，而翻转 $|1\rangle$ 的符号变为 $-|1\rangle$ 。另一个是 Hadamard 门

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2-9)$$

这个门也可被视作为非门的平方根，它把 $|0\rangle$ 变到 $|0\rangle$ 至 $|1\rangle$ 的中间状态 $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ ，将 $|1\rangle$ 变到同样是 $|0\rangle$ 至 $|1\rangle$ 的中间状态 $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ ，要注意的是，两次应用 Hadamard 门到一个状态等于什么都没有做，因为 H^2 不是非门而是单位阵。还有一个是受控非（control-NOT 或者 CNOT）门

$$U_{CN} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2-10)$$

这个门有两个输入量子比特，分别是控制量子比特和目标量子比特，若控制量子比特置 0，则目标量子比特保持不变；若控制量子比特置 1，则目标量子比特翻转。用方程的形式可以表示为

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, |01\rangle \rightarrow |01\rangle, |10\rangle \rightarrow |11\rangle, |11\rangle \rightarrow |10\rangle \quad (2-11)$$

因此，受控非门也能被看作是一类推广的异或门。

2.1.3 量子线路

与经典线路不同，量子线路有以下三个特点需要注意：一、量子线路不允许出现回路，即从线路一部分到另一部分的反馈，也就是说量子线路是无环的（acyclic）；二、量子线路不允许出现扇入操作（FANIN），因为该操作会导致单连线包括所有输入位的按位或（bitwise OR），这显然是不可逆的，也是非酉的；三、量子线路不允许出现扇出操作（FANOUT），即不允许产生一比特的多个拷贝，因为量子力学禁止量子比特的复制^[4]。也正是因为第三个特点，无法直接复制目标态得到生成态，所以本文通过量子生成对抗网络模型来进行目标量子态的生成。

下面给出三个常用的量子门线路^[4]，首先是受控 U 门如图 2-1 所示：

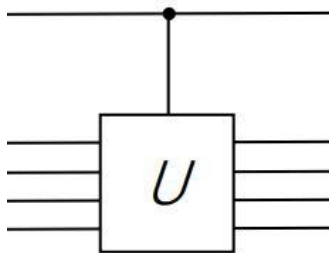


图 2-1 受控 U 门

另一个是单量子比特 U 门，定义如下：

$$\begin{bmatrix} c_{00} & c_{01} \\ c_{10} & c_{11} \end{bmatrix}, UU^\dagger = I \quad (2-12)$$

接着是受控非门的两种表示，如图 2-2 所示：

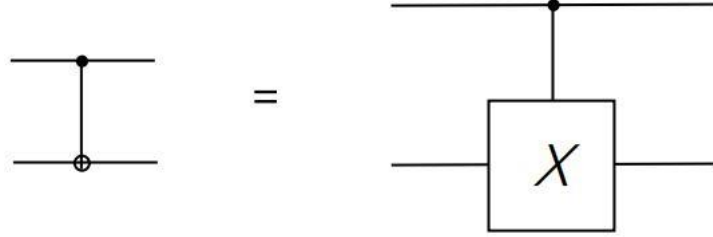


图 2-2 受控非门的两种表示

最后是用来测量量子线路的仪表符号，如图 2-3 所示。

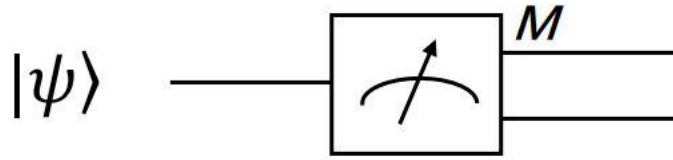


图 2-3 表示测量的量子线路符号

量子线路是所有量子过程的有效模型，包括计算，通信，量子噪声等等^[4]。

2.2 量子力学引论

量子力学的假设是经过长期的尝试与失败后推导而来的，经过了发明者大量的猜测和摸索。初步了解量子力学的假设可以更好地有助于理解量子计算中的数学理论基础。以下为四个主要的假设^{[4][17]}：

假设一：任何一个孤立物理系统都与一个复内积向量空间（Hilbert 空间）相联系，这个空间称为系统状态空间。系统完全由状态向量所描述，这个向量是系统状态空间的一个单位向量。

假设二：一个封闭量子系统的演化可以由一个可逆酉(unitary)变换来刻画。

假设三：对量子状态进行测量将使其坍缩到与测量结果相容的特定（宏观）状态，并且测量结果的概率与状态向量展开式的系数的复平方成正比。

假设四：复合物理系统的状态空间是分物理系统状态空间的张量积，若将分系统编号为 1 到 n，系统 i 的状态被置为 $|\psi_i\rangle$ ，则整个系统的总状态为 $|\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_i\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle$ 。

2.2.1 线性代数

线性代数研究的基本对象是向量空间 (vector space)。特别地, 由所有 n 元复数 (z_1, \dots, z_n) 构成的称为向量空间 C^n 。在该空间上, 可以定义向量加、标量乘, 复数乘等运算。向量空间中向量的标准量子力学符号为 $|\psi\rangle$, 其中 ψ 是该向量的标号^[4]。

向量空间 V 与 W 之间的线性算子 (linear operator) 定义为任意对输入是线性的函数: $A: V \rightarrow W$, 其满足如下公式:

$$A\left(\sum_i a_i |\psi\rangle\right) = \sum_i a_i A(|\psi\rangle) \quad (2-13)$$

理解线性算子的最方便途径就是通过它们的矩阵表示^[4] (matrix representation)。

下面给出四个常用的 Pauli 阵, 他们都是 2×2 的矩阵, 并各有记号表示^[4]。

$$\sigma_0 \equiv I \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-14)$$

$$\sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-15)$$

$$\sigma_2 \equiv \sigma_y \equiv Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad (2-16)$$

$$\sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2-17)$$

2.2.2 POVM 测量

量子测量假设, 即假设三, 涉及两个要素。首先, 它给出一个描述测量统计特性的规则, 即分别得到不同测量结果的概率。其次, 他给出描述测量后系统状态的规则, 不过这里的重点是系统得到不同结果的概率。例如, 仅在结束阶段对系统进行一次测量的实验就是这种情况, 称为 POVM (positive operator-valued measure, 半正定算子值测量)^[4]。

假设测量算子 M_m 在状态为 $|\psi\rangle$ 的量子系统上进行测量, 得到结果为 m 的概率由 $p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$ 给出, 如果定义 $E_m \equiv M_m^\dagger M_m$, 则根据假设三和线性代数的知识可知, E_m 是满足 $\sum E_m = I$ 和 $p(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$ 半正定算子, 于是算子集合 E_m 足以确定不同测量结果的概率, 算子 E_m 称为与测量相联系的 POVM 元, 完整的集合 $\{E_m\}$ 称为一个 POVM^[4]。

2.3 变分量子线路

参数化量子线路（Parameterized quantum circuits, PQCs）提供了在嘈杂中型量子（Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ）时代^{[18][19]}实现算法和证明量子优势的具体方法。PQC 通常由固定门（如受控非门）和可调门（如量子位旋转门）组成^[20]。

我们假设计算机是一个封闭的量子系统。在 n 个量子位的情况下，其状态可以描述为在复数内积向量空间 \mathcal{C}^{2^n} 中的一个单位向量^[21]，计算总是从在计算基础上的简单准备状态开始。例如状态 $|0\rangle^{\otimes n}$ ，将单一运算符 U 应用于产生新状态 $U|0\rangle$ 的初始状态，这里可以测量出可观察量的值，其物理观测值与 Hermitian 算子相关。Hermitian 算子定义如下^[20]：

$$\langle M \rangle = \sum_i \lambda_i p(\lambda_i) \quad (2-17)$$

其中， λ_i 是第 i 个特征值， p 是其对应本征空间上的投影。

图 2-4^[20]展示了一个基于 PQC 的监督学习模型的组成部分^[20]。

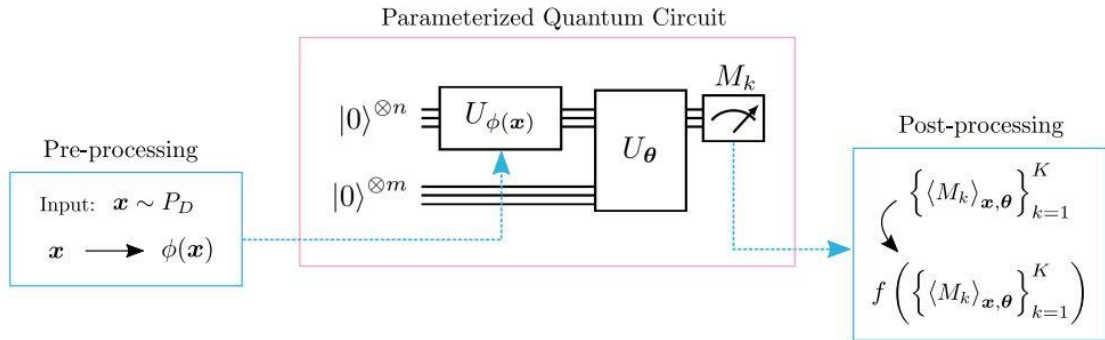


图 2 - 4 量子变分线路流程图

首先，从训练集中采样数据向量，并通过经典的预处理对其进行转换。其次，将变换后的数据点映射到编码器电路 $U_{\Phi(x)}$ 的参数中。然后，可变电路 U_θ （可能作用于扩展的量子位寄存器）实现模型的核心操作。接下来，根据测量值估计出一组期望值 $\{\langle M_k \rangle_{x, \theta}\}_{k=1}^K$ ^[18]。

然后将后处理函数 f 应用于此集合，以便为任务提供合适的输出。例如，如果

要执行回归任务, 则 f 可以是类型 $\sum_k w_k \{\langle M_k \rangle_{x, \theta}\}$ 的线性组合, 并带有附加参数 w_k 。注意, 这里可以参数化和训练的模型包含所有组件, 包括预处理和后处理部分^[20]。

2.4 本章小结

本章介绍了量子计算的数学描述基础框架。首先介绍了量子比特、量子比特门, POVM 测量和一些常用的量子线路, 这是后文构建和优化量子生成对抗网络模型中生成器和判别器量子线路的基础。接着介绍了四个量子力学的基本假设以及线性代数在量子计算中的应用, 这是后文设计模型构建算法和目标量子态生成训练算法的基础。最后介绍了参数化的变分量子线路, 这是后文设计量子生成对抗网络模型整体框架时所主要采用的一个思想方法。再有了这些基础之后, 本文接着进行 QGAN 模型的构建, 以实现目标量子态的生成。

第三章 模型设计与目标量子态的生成

为了实现量子态的制备，首先需要设计出可以实现目标量子态生成的模型，本文采用量子生成对抗网络模型完成单量子比特纯态的生成。本章主要通过 3.1 节中的量子线路设计和 3.2 节中的目标函数设置这两个主要方式完成量子生成对抗网络模型的构造。通过改变训练次数、学习率等参数记录下不同的实验数据，采用绘制图表和对比研究等方法分析所得数据，从而对生成出来的单量子比特纯态做进一步的研究。

3.1 量子线路设计

生成器和判别器是量子生成对抗网络中的两个核心部件。与传统的生成对抗网络不同的是，量子生成器利用连线和量子门生成的是量子态。相同的是，生成器和判别器同样采用非合作博弈策略和纳什均衡思想，通过定义的 loss 函数来判别其是否达到纳什均衡。在模型达到纳什均衡时，模型中的生成器就具备了目标量子态的生成能力。本节设计出的量子线路实现的是单量子比特纯态的生成。

为了与第四章优化后的 QGAN 模型区别，将本章设计的 QGAN 模型记为 QGAN-o。

首先给出 QGAN-o 模型的整体线路流程设计，如图 3-1 所示^[16]。该模型整体采用了 2.3 节中参数化变分量子线路的思想方法。记生成器的参数为 G_θ ，生成器对输入的噪音数据进行处理，输出生成量子态。记判别器的参数为 D_ϕ ，判别器对生成的量子态和目标量子态进行判别，输出其判定的生成态为真的概率^[16]。

通过生成器和判别器的博弈来训练模型。当模型达到纳什均衡时，生成器就具备了生成目标量子态的能力。

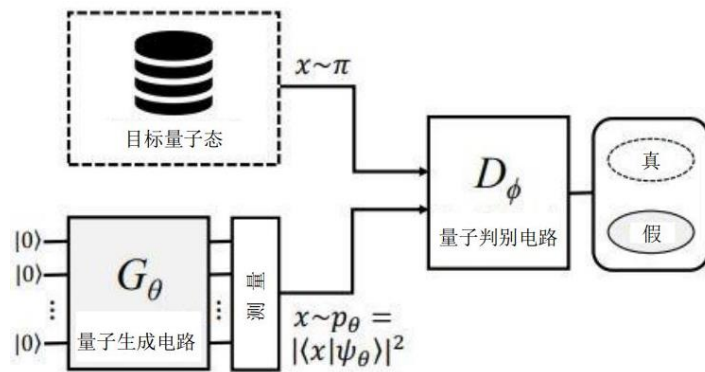


图 3-1 量子生成对抗网络模型整体线路流程图

接下来详细介绍生成器和判别器的量子线路设计。

3.1.1 生成器量子线路设计

自然地，我们由经典比特的复制过程切入。经典比特的复制可以用经典的受控非门完成，如图 3-2 所示^[4]。其线路分别将处于未知状态待复制的比特 x 和初始化为 0 的中间缓存比特输入到该受控非门，输出的结果则为两个比特，都处于相同的状态 x 。

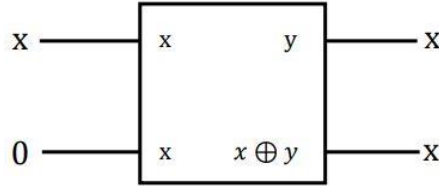


图 3 - 2 复制未知经典比特线路图

类似地，我们尝试着用相同的方法来进行量子比特的生成，线路如图 3-3 所示^[4]。

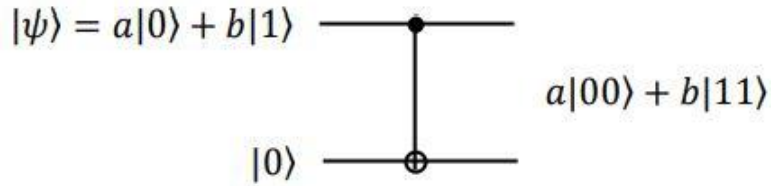


图 3 - 3 复制未知量子比特线路图

该线路还是利用受控非门来进行未知状态的复制，但与经典线路不同的是，这里复制的是一个量子态 $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ ，其输入的量子比特可以写作公式

$$[a|0\rangle + b|1\rangle]|0\rangle = a|00\rangle + b|10\rangle \quad (3-1)$$

受控非门的作用是当第一个量子比特为 $|1\rangle$ 时，将第二个量子比特取反，结果就是 $a|00\rangle + b|11\rangle$ 。这个线路在复制量子态 $|\psi\rangle = |0\rangle$ 或者量子态 $|\psi\rangle = |1\rangle$ 的情形下，是可以做到的，因为用量子线路来复制编码为 $|0\rangle$ 或者 $|1\rangle$ 的信息是可能的。但是对于一般状态 $|\psi\rangle$ 而言，则有公式

$$|\psi\rangle|\psi\rangle = a^2|00\rangle + ab|01\rangle + ab|10\rangle + b^2|11\rangle \quad (3-2)$$

与 $a|00\rangle + b|11\rangle$ 相比较，可以看到，除非 $ab = 0$ ，复制线路不能复制输入的量子状态，这一特点被称为量子的不可克隆（non-cloning）定理^[4]。

因此，根据上述所讨论的内容，我们可以设计出这样一个生成器线路，它主

要有三个 U 门（2-12），和两个受控非门（2-10）组成。其可以通过受控非门完成单量子比特纯态的复制，如图 3-4 所示^[24]。

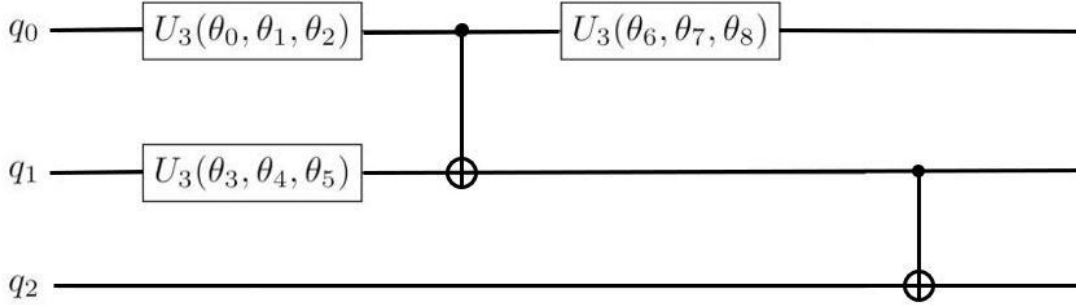


图 3 - 4 QGAN-o 生成器量子线路图

3.1.2 判别器量子线路设计

根据 3.1.1 中的生成器线路，我们接着设计判别器线路。判别器对输入的数据进行判别，由此得到一个量子态 $|\phi\rangle$ ，当判别器接收到的输入是目标态时，则有公式

$$|\phi\rangle = D(|\psi\rangle \otimes |000\rangle) \quad (3-3)$$

当判别器接收到的输入是生成态时，则有公式

$$|\phi\rangle = D(G \otimes I)|000\rangle \quad (3-4)$$

此外，对于判别器得到的量子态，还需要采用 pauli-Z 门（2-17）对第三个量子比特 q_2 进行测量，从而得到判别器认为输入是目标态的概率，也就是判别器对于输入量子态的判断结果。

在这一过程中，首先有公式

$$M_z = I \otimes I \otimes \sigma_z \quad (3-5)$$

其次，便可以得到测量结果 $output_{disc}$ 的表达公式为

$$output_{disc} = \langle \phi | M_z | \phi \rangle \quad (3-6)$$

所以，测量结果为目标态的概率 P 的表达公式为

$$P = \frac{1}{2}(output_{disc} + 1) \quad (3-7)$$

根据上述描述，可以得到判别器线路如图 3-5 所示^[24]。由于量子线路与传统线路不同的一点——量子线路不可以有反馈，所以这里设计的判别器目的只是通过给定的输入，测量生成器生成结果为目标态的概率 P。

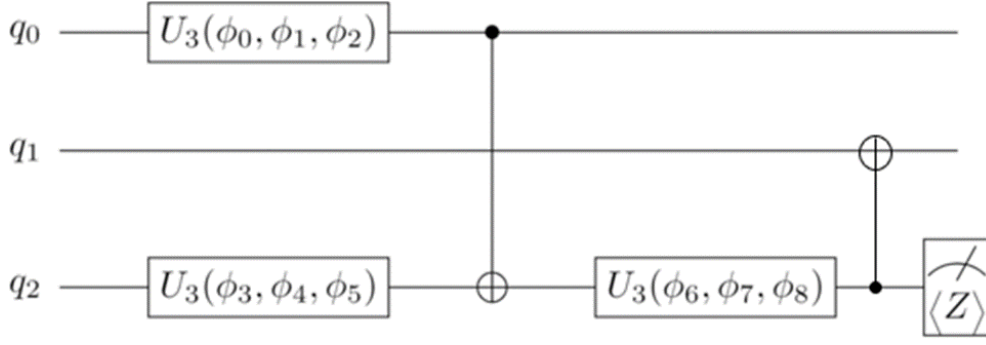


图 3 - 5 QGAN-o 判别器量子线路图

3.2 目标函数设计

在经典的生成对抗网络中，我们的设计期望是得到一个优秀的生成器，但是只有优秀的判别器才能准确判断生成器是否优秀。所以，在这个过程中，训练的理想结果是判别器无法准确识别出数据是来自真实数据还是生成器生成的数据。因此，在经典的生存成对抗网络中，通常采用交替训练的方式。先固定住生成器，训练判别器，然后再固定住判别器，训练生成器，不断反复。当两者性能都足够强时，GAN 模型就会收敛，生成器和判别器会达到纳什均衡。可以用下面的目标函数来判断二者否达到纳什均衡^[5]：

$$\min_G \max_D V(G, D) = \min_G \max_D E_{x \sim P_{data}} [\log D(x)] + E_{z \sim P_z} [\log(1 - D(G(z)))] \quad (3-8)$$

其中，G 和 D 分别表示生成器和判别器的线路参数。

而在量子生成对抗网络中，虽同样也采用了纳什均衡的思想，也同样通过判别器和生成器的训练达到纳什均衡，但是如何判断两者是否达到纳什均衡，是分别对生成器和判别器定义各自的损失函数来实现的。

首先根据图 3-1 整体 QGAN-o 模型流程中提到的，给出生成器的线路参数为 θ_{gen} ，判别器的线路参数为 ϕ_{disc} ，则可以定义生成器的损失函数 L_G 为^[24]

$$L_G = -P_G(\theta_{gen}, \phi_{disc}) \quad (3-9)$$

其中， P_G 是输入量子态为生成态时公式 3-7 的表达式。它表示的是生成器能够生成目标量子态的完美程度，其取值空间 $loss \in [-1, 0]$ 。当 loss 取值为 0 时，表示生成器生成的生成态效果较差；当 loss 取值为 -1 时，表示生成器生成的生成态效果较好。

接着, 根据生成器的损失函数 L_G 定义出判别器的损失函数 L_D 为^[24]

$$L_D = P_G(\theta_{gen}, \phi_{disc}) - P_T(\phi_{disc}) \quad (3-10)$$

其中, P_G 是输入量子态为生成态时公式 3-7 的表达式; P_T 是输入量子态为目标态时, 公式 3-7 的表达式。它表示的是判别器能够判断输入量子态是目标态还是生成态的准确程度, 其取值空间 $loss \in [-1, 1]$ 。当 $loss$ 取值为-1 时, 表示判别器可以完美区分目标态和生成态; 当 $loss$ 取值为 0 时, 表示判别器无法区分目标态和生成态; 当 $loss$ 取值为 1 时, 表示判别器对于目标体和生成态的区分颠倒。

因此, 若想要完成单量子比特纯态的生成, 我们可以通过训练生成器和判别器, 观察其各自损失函数 $loss$ 的取值情况。当 QGAN 模型达到纳什均衡时, 生成器损失函数的 $loss$ 值会收敛于-1, 判别器损失函数的 $loss$ 值会收敛于 0。

3.3 目标量子态生成实验

在完成了模型设计后, 则可开始量子态的制备工作。本小节利用构建好的 QGAN-o 模型进行单量子比特纯态的生成实验。本节主要介绍生成实验各步骤, 并对实验生成单量子比特纯态的数据进行分析。

3.3.1 实验环境

实验测试环境如下: 处理器为 Intel(R) Core(TM)i7-7500U @2.70GHz 2.90GHz; 内存为 2.00GB; 操作系统为 VMware14pro 虚拟机中的 Linux CentOS 7 64bit; 实验运行软件平台为 Jupyter Notebook; 所用到的开发工具集是百度量桨 Paddle Quantum。

Jupyter Notebook 是基于网页的用于交互计算的应用程序。其可被应用于全过程计算: 开发、文档编写、运行代码和展示结果, 主要由网页应用和文档组成。简而言之, Jupyter Notebook 以网页的形式打开, 可以在网页页面中直接编写代码和运行代码, 代码的运行结果也会直接显示在代码块下。如在编程过程中需要编写说明文档, 可在同一个页面中直接编写, 便于作及时的说明和解释^[22]。

Paddle Quantum (量桨) 是基于百度飞桨开发的量子机器学习工具集, 支持量子神经网络的搭建与训练。量桨建立起了人工智能与量子计算的桥梁, 不但可以快速实现量子神经网络的搭建与训练, 还提供易用的量子机器学习开发套件与量子优化、量子化学等前沿量子应用工具集, 并提供多项自研量子机器学习应用^[23]。

3.3.2 实验过程

本节中，假设已有的目标量子态是一个单量子比特纯态，且生成器接受的输入为 $|0\rangle$ ，则制备已有的目标量子态的线路如图 3-6 所示^[24]。

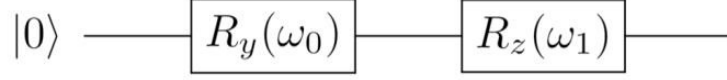


图 3-6 制备已有的目标量子态的线路

具体的过程如下：

设已有的目标量子态为 $|\psi\rangle$ ，生成器采用三量子比特线路，其中第 0 个量子比特认为是生成的量子态（详见 3.1.1 节），则生成器生成的量子态为 $|x\rangle = G|000\rangle$ 。判别器对数据进行判别并得到量子态 $|\phi\rangle$ （详见 3.1.2 节）。接着定义好损失函数（详见 3.2 节），然后交替训练判别器和生成器。

根据上述的过程，我们开展实验。首先，结合设计出来的生成器和判别器线路，定义 QGAN-o 模型。具体的定义步骤参见如下所示的算法 3-1^[24]：

算法 3-1 QGAN-o 模型的定义

```

输入：卷积层 paddle.nn.Layer，生成器参数 theta，判别器参数 phi
初始化：self.theta=theta, self.phi=phi
1: def generator(self, theta)
2:     构造生成器的量子线路（详见 3.1.1 节内容）
3: end def
4: def discriminator(self, phi)
5:     构造判别器的量子线路（详见 3.1.2 节内容）
6: end def
7: def disc_target
8:     discriminator(self, phi)
9:     计算判别器对目标态的判断结果
10: end def
11: def disc_gen
12:     得到生成器生成的量子态
13:     discriminator(self, phi)
14:     计算判别器对生成态的判断结果
15: end def
16: def forward(model_name)
    
```

```

17:     if model_name=='gen'
18:         计算生成器的损失函数
19:     else
20:         计算判别器的损失函数
21: end def
22: def get_target_state
23:     将目标态用密度矩阵表示
24: end def
25: def get_generated_state
26:     将生成态用密度矩阵表示
27: end def
输出: QGAN-o(self)

```

在完成了上述的量子生成对抗网络的实现之后,使用 PaddlePaddle 对构建的 QGAN-o 模型进行训练,完成单量子比特纯态的生成。具体的训练过程参见如下所示的算法 3-2^[24]:

算法 3-2 单量子比特纯态的生成训练过程

```

输入: 目标量子态 target, 量子生成对抗网络 self
初始化: 学习率 LR, 总迭代 ITR, 判别器迭代 ITR1, 生成器迭代 ITR2
1: for itr0 in range(ITR)
2:     记录判别器 loss 值的变化
3:     for itr1 in range(ITR1)
4:         训练判别器
5:     end for
6:     记录生成器 loss 值的变化
7:     for itr2 in range(ITR2)
8:         训练生成器
9:     end for
10: end for
11: 得到生成量子态 gen
12: 计算两个量子态 (gen, target) 之间的距离 distance
13: 计算两个量子态 (gen, target) 的保真度 fidelity
输出: 生成量子态 gen, 距离 distance, 保真度 fidelity

```

在利用 QGAN-o 模型完成了目标态的生成后,我们可以对该训练过程进行可

视化处理，利用 Python 所提供的 IPython.display 包，绘制 Loss 曲线变化过程，结果见 3.3.3 节中的图 3-7 与图 3-8。

3.3.3 量子态数据与分析

根据 3.3.2 中算法 3-2 的训练过程，确定参数学习率 $LR=0.1$ ，依次改变参数 ITR，ITR1，ITR2，记录下目标量子态与生成量子态之间的距离 distance 和生成量子态的保真度 fidelity，以及训练模型所花费的时间 time cost。其中，距离 distance 是通过比较目标量子态和生成量子态之间的密度矩阵 ρ_{target} 和 ρ_{gen} 得到的，具体公式如下：

$$distance = tr[(\rho_{target} - \rho_{gen})^2] \quad (3-11)$$

生成量子态的保真度 fidelity 是调用量浆中已定义的函数 state_fidelity() 得到的。由此，汇总实验数据可得到表 3-1 如下：

表 3-1 学习率 $LR=0.1$ ，QGAN-o 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表

No.	ITR	ITR1	ITR2	distance	fidelity	time cost
1	5	10	25	0.560703865	0.697638747	0:24
2	5	20	50	0.496119322	0.708706617	0:48
3	10	10	25	0.500695378	0.707129339	0:43
4	10	20	50	0.499908544	0.707139232	1:31
5	15	10	25	0.499837237	0.707170041	1:05
6	15	20	50	0.499998175	0.707107428	2:29

分析表 3-1 中数据，整体来看，随着迭代次数的增多，也就是训练次数的增多，距离和保真度会分别稳定在 0.4999 和 70.71%，可以说在一定程度上生成了与目标态较为相近的量子态，但是保真度仍然有很大的提升空间。具体来看，将实验 No.2 与其他五次实验对比，不难发现，虽然第二次实验的训练次数不是最多的，但所生成的量子态却是最接近目标态的，这说明距离和保真度并没有随着训练次数的增多而有着明显的线性变化，QGAN-o 模型也没有随着迭代次数的增多而达到较好的纳什均衡。

由此，为了找出保真度线性变化不明显，无法进一步提高的原因，我们令学习率 $LR=0.5$ ，用同样的方法，再次进行实验，得到数据如表 3-2 所示：

表 3-2 学习率 LR=0.5, QGAN-o 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表

No.	ITR	ITR1	ITR2	distance	fidelity	time cost
1	5	10	25	0.498913758	0.707491994	0:22
2	5	20	50	0.427401257	0.735673802	0:45
3	10	10	25	0.499999283	0.707107036	0:45
4	10	20	50	0.461684232	0.721203766	1:28
5	15	10	25	0.499999999	0.707106784	1:04
6	15	20	50	0.485280876	0.712400716	2:09

分析表 3-2 中的数据, 整体来看, 即使在调高了学习率 LR 到 0.5 之后, 距离和保真度依旧没有太大的变化。随着训练次数的增多, 模型生成量子态的与目标态之间的距离和保真度还是分别稳定在 0.49 和 71% 附近。具体的来看, 实验 No.2 和实验 No.4 还是出现了刚在学习率 LR=0.1 时同样的问题, 虽然这两次的训练次数不是最多的, 但其所生成的量子态比其他四次实验生成的量子态要更加接近目标态。

表 3-1 和表 3-2 都固定了学习率, 依次改变迭代次数, 但是生成态的保真度并没有得到较大提升, 因此, 在造成保真度不高的原因里, 我们可以初步排除掉迭代次数这一因素。

为了进一步探讨生成态保真度不高的现象究竟是由于学习率还是线路设计造成的, 我们固定迭代次数, 改变学习率, 继续试验。观察表 3-1 和 3-2 中的数据, 我们发现当迭代次数 ITR=5, ITR1=20, ITR2=50 这一数值时, 生成态的保真度最高, 所以我们将迭代次数固定在 ITR=15, ITR1=20, ITR2=50, 依次改变学习率 LR=0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 记录下生成量子态与目标态的距离和保真度, 得到表 3-3 (见第 30 页) 中的内容。

但是在学习率设置得较小时, 更新得比较慢, 这个时候需要更多的迭代次数才能到一个比较好的结果。也就是说, 在学习率较小的时候, 迭代次数和学习率是有一定关联的, 不能简单地固定一个改变另一个。因此只分析表 3-3 中的内容是不够的, 我们需要在学习率较小的时候增加总迭代次数 (为了保证模型每一次的迭代都是充分的, 改变总迭代的同时需要保持 ITR1=20, ITR2=50 不变)。对比观察生成结果, 综合分析得出结论, 所以补充上表 3-4 中的数据。

表 3-3 固定迭代次数, QGAN-o 模型不同学习率对应的距离和保真度表

No.	LR	distance	fidelity	time cost
1	0.01	1.112293984	0.545075493	0:45
2	0.02	1.031634563	0.577419370	0:45
3	0.05	0.561641887	0.697241168	0:44
4	0.1	0.496119322	0.708706618	0:48
5	0.2	0.499332965	0.707343235	0:45
6	0.5	0.427401258	0.735673802	0:45

表 3-4 学习率较小时, QGAN-o 模型不同迭代对应的距离和保真度表

No	LR	ITR	distance	fidelity	time cost
1	0.01	5	1.112293984	0.545075493	0:45
2	0.01	10	1.045331085	0.572387948	1:08
3	0.01	15	0.854200382	0.626047882	2:37
4	0.02	5	1.031634563	0.577419370	0:45
5	0.02	10	0.678649535	0.669315398	1:40
6	0.02	15	0.546122608	0.697151505	2:33
7	0.05	5	0.561641887	0.697241168	0:44
8	0.05	10	0.500840672	0.707091464	1:45
9	0.05	15	0.499839527	0.707169861	2:35

通过分析表 3-3 和表 3-4 的数据, 可以发现, 在学习率低于 0.1 时, 随着学习率和迭代次数的提高, 生成态保真度的提高变化显著。但当学习率大于 0.1 时, 这一变化就不那么显著了, 生成态的保真度依旧没有办法突破 75%。所以在保真度无法进一步提升这个问题上, 我们可以初步排除掉学习率这一因素。

那么可以推测, 生成态保真度不高可能是由于线路设计造成的, 所以在接下来的第四章, 将着重对生成器和判别器的量子线路进行优化, 观察是否可以提高生成态的保真度, 验证我们的猜想。

接着, 观察一下 QGAN-o 模型训练过程可视化的结果, 图 3-7 和图 3-8 分别给出了在 QGAN-o 模型在学习率 LR=0.1 与 LR=0.5 下的可视化过程。

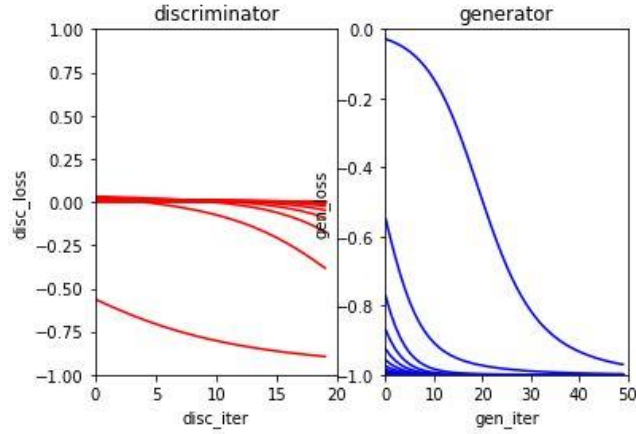


图 3 - 7 LR=0.1 时，QGAN-o 模型训练可视化过程

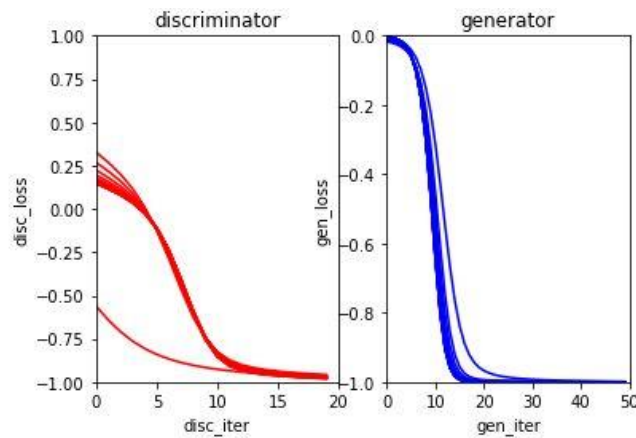


图 3 - 8 LR=0.5 时，QGAN-o 模型训练可视化过程

其中，纵坐标为损失函数的 loss 取值，横坐标为判别器和生成器各自的内部迭代次数；红线从下至上依次表示为判别器损失函数 loss 值随着总迭代次数增加的变化；蓝线从上至下依次表示为生成器损失函数 loss 值随着总迭代次数增加的变化。

观察图 3-7 和图 3-8 发现，生成器和判别器损失函数收敛幅度变化在某一段过快，就是说，在这些段中，生成态的生成效果受训练次数影响较大；而其余段变化又过于平缓，也就是说，在这些段中，生成态的生成效果受训练次数影响较小。这可能也是造成表 3-1 实验 No.2 和表 3-2 实验 No.2 中出现训练次数不高但生成态保真度最高的原因。

图 3-7 中，在学习率 LR=0.1 时，生成器损失函数 loss 值最终收敛到-1，判别器损失函数 loss 值最终收敛到 0，可以说达到了纳什均衡，但是效果不佳。因为其线段左端，也就是训练一开始的时候，收敛并不明显，且某段变化过程过快。

图 3-8 中, 在学习率 $LR=0.5$ 时, 生成器损失函数 $loss$ 值最终收敛到-1, 判别器损失函数 $loss$ 值最终收敛到-1 而不是 0。这说明, 模型并没有达到纳什均衡, 这进一步的解释了为何模型生成的生成态保真度不够高, 表明模型还有很大的优化空间。

综上所述, 在本文的第四章, 将对 QGAN-o 模型中的生成器和判别器的量子线路进行优化, 解决上述问题。并在此基础上, 优化目标函数, 简化对于模型是否收敛的判别, 从而优化量子生成对抗网络模型, 进一步简化目标量子态的生成过程。

3.4 小结

本章首先给出 QGAN-o 模型的整体流程图, 重点介绍了其中生成器和判别器的量子线路设计。并根据线路图, 定义了各自的损失函数, 阐明其意义。接着给出了 QGAN-o 模型构建算法 3-1 和利用 QGAN 模型生成单量子比特纯态的训练算法 3-2, 然后在 Jupyter Notebook 平台上利用百度量桨提供的集成工具完成模型设计的代码实现, 利用模型开展目标量子态的生成实验。

对于实验结果中出现的生成态保真度不高的现象, 分析数据, 找寻可能原因。我们首先固定学习率, 改变迭代次数, 排除掉迭代次数的影响; 再固定迭代次数, 改变学习率, 排除掉学习率的影响, 从而初步推断可能是由于量子线路设计造成的, 这为第四章的进一步优化模型以提高目标量子态保真度奠定了基础。

第四章 模型优化与目标量子态的提高

为了进一步提高目标量子态的生成保真度，实现效果更佳的量子态制备，需要对量子生成对抗网络模型进行改进优化。本章介绍模型的优化方法并对模型优化后生成的目标量子态进行分析研究。本章主要通过缩减和增加量子门线路的方式优化生成器和判别器量子线路，再两两组合搭配构建出四种不同的 QGAN 模型，通过实验找出其中生成单量子比特纯态保真度最高的一个。此外，还优化了目标函数的设计，简化对于模型是否达到纳什均衡的判别，从而进一步化简了目标量子态的生成过程。最后给出了优化后生成单量子比特纯态的数据结果，也给出了该结果和第三章优化前模型生成单量子比特纯态数据的对比与分析。

4.1 量子线路优化

根据 3.3.3 中的实验分析得知，构建的 QGAN-o 模型生成的目标态保真度之所以无法突破 75%，达不到较高保真度可能是由于线路设计造成的。所以本节主要对生成器量子线路进行优化，并相应地调整判别器线路：分别增加或删减量子门。将优化后的判别器和生成器两两组合搭配出四种不同的 QGAN 模型，再开展试验，找出其中一个可以够达到最优纳什均衡的模型，以提高单量子比特纯态生成的保真度。

4.1.1 生成器量子线路优化

根据 3.1.1 中的内容，由于我们的目标是对一个单量子比特纯态进行生成实验，根据量子的不可克隆定理，对于一个量子比特而言，复制线路是可行的，所以我们考虑根据图 3-2 的线路模型进行修改优化。

首先对图 3-3 中的线路进行删减优化，去除 q_1 和 q_2 之间的受控非门，得到图 4-1 中删减优化后的 QGAN 生成器线路图^[24]。

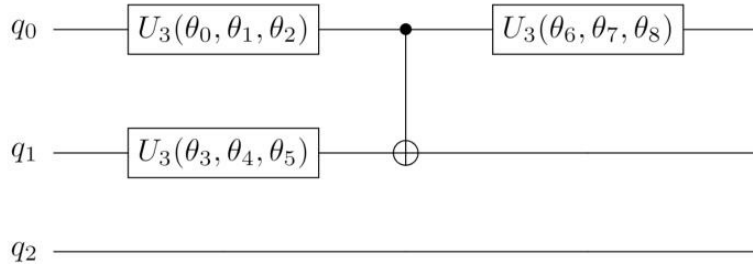


图 4-1 删减优化后的 QGAN 生成器线路

此时，生成器改为采用二量子比特线路，依旧认为第 0 个量子比特为生成的

量子态。对于生成器中的噪声先验，用另一个系综 ρ_z 表示产生噪声样本的方式，用 $|z\rangle$ 表示噪声样本，生成器把 $|z\rangle \sim \rho_z$ 中抽取的噪声样本映射到新的态 $|x\rangle$ ，则有公式

$$|x\rangle = G|z\rangle \quad (4-1)$$

图 4-1 中生成器的作用可将公式 4-1 具体表达为公式

$$|x\rangle = G|00\rangle \quad (4-2)$$

其中 $|x\rangle$ 是生成器生成的量子态。

增加量子线路可以增强量子之间的纠缠效应，从而有更多的量子资源使用，增加其表现空间^[4]，也可能达到优化的效果。所以接下来对图 3-3 中的线路进行增加优化，将原来第二个 q_1 控制 q_2 的受控非门改为一个 q_0 控制 q_2 的受控非门，得到图 4-2 中增加优化后的 QGAN 生成器线路^[24]。

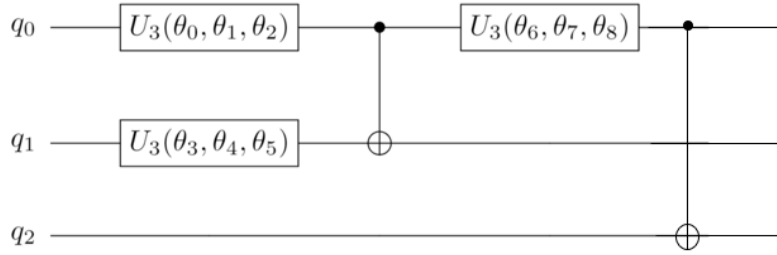


图 4-2 增加优化后的 QGAN 生成器线路

而此时，图 4-2 中增加优化后的生成器的作用可将公式 4-1 具体表达为公式

$$|x\rangle = G|000\rangle \quad (4-3)$$

其中 $|x\rangle$ 是生成器生成的量子态。

4.1.2 判别器量子线路优化

我们用同样的思路考虑对于判别器量子线路的优化。首先考虑删减优化，判别器可以去除掉 q_2 控制 q_1 的受控非，也改为两量子比特线路，如图 4-3 所示^[24]。

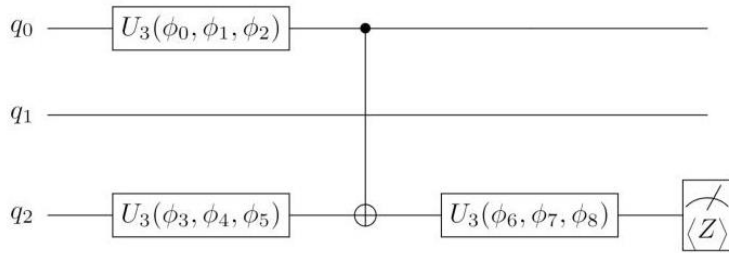


图 4-3 删减优化后的 QGAN 判别器线路

此时原 3.1.2 节中的公式 3-3 应为

$$|\phi\rangle = D(|\psi\rangle \otimes |00\rangle), \quad (4-4)$$

其余则保持不变。

接着同样尝试对量子判别器进行增加线路优化，增加一个 q_1 控制 q_2 之间的受控非，如图 4-4 所示^[24]：

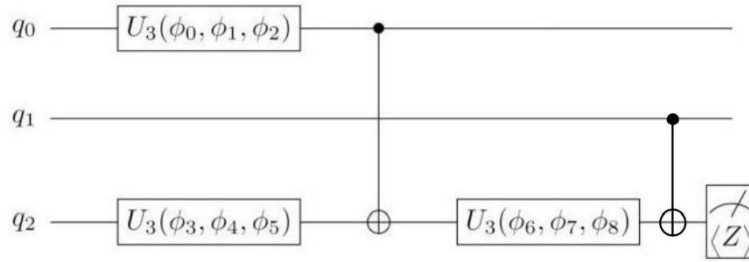


图 4-4 增加优化后的 QGAN 判别器线路

此时公式 4-4 应为

$$|\phi\rangle = D(|\psi\rangle \otimes |000\rangle) \quad (4-5)$$

其余则保持不变。

4.1.3 优化后的四种组合模型

接着，将优化后的生成器和判别器量子线路两两组合搭配，可以得到四种不同的 QGAN 模型。

记删减优化的量子生成器（图 4-1）与删减优化的量子判别器（图 4-3）组合的 QGAN 模型为 QGAN- γ 。其在 Jupyter notebook 中利用百度量桨提供的开发工具完成的代码表示为图 4-5^[24]：

```
def generator(self, theta):
    """
    生成器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*theta[:3], 0)
    cir.u3(*theta[3:6], 1)
    cir.cnot([0, 1])
    cir.u3(*theta[6:], 0)
    return cir

def discriminator(self, phi):
    """
    判别器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*phi[:3], 0)
    cir.u3(*phi[3:6], 2)
    cir.cnot([0, 2])
    cir.u3(*phi[6:], 0)
    return cir
```

图 4-5 QGAN- γ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现

记删减优化的量子生成器（图 4-1）与增加优化的量子判别器（图 4-4）组合

的 QGAN 模型为 QGAN- δ 。其在 Jupyter notebook 中利用百度量桨提供的开发工具完成的代码表示为图 4-6^[24]：

```
def generator(self, theta):
    """
    生成器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*theta[:3], 0)
    cir.u3(*theta[3:6], 1)
    cir.cnot([0, 1])
    cir.u3(*theta[6:], 0)

    return cir

def discriminator(self, phi):
    """
    判别器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*phi[:3], 0)
    cir.u3(*phi[3:6], 2)
    cir.cnot([0, 2])
    cir.u3(*phi[6:], 0)
    cir.cnot([1, 2])

    return cir
```

图 4-6 QGAN- δ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现

记增加优化的量子生成器（图 4-2）与删减优化的量子判别器（图 4-3）组合的 QGAN 模型为 QGAN- ζ 。其在 Jupyter notebook 中利用百度量桨提供的开发工具完成的代码表示为图 4-7^[24]：

```
def generator(self, theta):
    """
    生成器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*theta[:3], 0)
    cir.u3(*theta[3:6], 1)
    cir.cnot([0, 1])
    cir.u3(*theta[6:], 0)
    cir.cnot([0, 2])

    return cir

def discriminator(self, phi):
    """
    判别器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*phi[:3], 0)
    cir.u3(*phi[3:6], 2)
    cir.cnot([0, 2])
    cir.u3(*phi[6:], 0)

    return cir
```

图 4-7 QGAN- ζ 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现

记增加优化的量子生成器（图 4-2）与增加优化的量子判别器（图 4-4）组合的 QGAN 模型为 QGAN- η 。其在 Jupyter notebook 中利用百度量桨提供的开发工具完成的代码表示为图 4-8^[24]：

```

def generator(self, theta):
    """
    生成器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*theta[:3], 0)
    cir.u3(*theta[3:6], 1)
    cir.cnot([0, 1])
    cir.u3(*theta[6:], 0)
    cir.cnot([0, 2])

    return cir

def discriminator(self, phi):
    """
    判别器的量子线路
    """
    cir = UAnsatz(3)
    cir.u3(*phi[:3], 0)
    cir.u3(*phi[3:6], 2)
    cir.cnot([0, 2])
    cir.u3(*phi[6:], 0)
    cir.cnot([1, 2])

    return cir

```

图 4-8 QGAN-η 模型中生成器与判别器量子线路的代码实现

本章 4.3 节将依次对这四种不同的 QGAN 模型开展单量子比特纯态的生成实验,分析对比结果,找出四个模型中生成量子态保真度最高、效果最好的一个。

4.2 目标函数优化

经典的生成对抗网络通过一个目标函数（公式 3-8）来确定模型是否达到纳什均衡,而第三章 3.2 节中设计的 QGAN-o 模型分别给生成器和判别器设计了不同的损失函数用于判断是否模型是否收敛。类似地,若将其改为如经典 GAN 模型中统一的一个目标函数,则可以简化这一判别过程,从而更佳高效快捷地实现目标量子态的制备。因此,从这个角度出发,对目标函数进行优化,将生成器损失函数和判别器损失函数二者合二为一。

首先是训练样本,即我们想要统计信息的样本,通过取相应的坐标基矢后的波函数,用态矢描述这些样本,这些样本(态矢)以一定的概率复合起来构成的整体就是量子系综,称为混合态,由密度算符 σ 表示^[4]。

对于生成器,由(公式 4-1)和(公式 4-2)可知,生成器生成样本的系综的密度算符 ρ 有公式

$$\rho = G\rho_z G^\dagger \quad (4-6)$$

判别器依旧负责给定态矢,其测量结果用于表明类别,形式上,可用第二章 2.2.2 节介绍的 POVM 表示,有公式

$$I = P + F, \quad (4-7)$$

其中, P 对应训练样本, F 对应生成样本^[6]。

QGAN 模型的训练目标则是让生成器能尽可能欺骗判别器，两者进行非合作博弈，最终使生成器完美地生成数据，判别器无法辨别真实数据和生成数据，这一过程可以抽象化用数学公式表示为

$$\min_G \max_D \text{loss}(\text{success}) \quad (4-8)$$

首先考虑最大化过程，很显然，当 T 为迹内算符的正部分投影时，目标函数最大，有公式^[25]

$$T = P_+ = \sum_{\lambda_+ > 0} |\lambda_+\rangle \langle \lambda_+| \quad (4-9)$$

其中， λ_+ 为 $\sigma - \rho$ 的正值本征矢。将公式 4-7 和公式 4-9 代入公式 4-8 可得公式如下^[25]：

$$\text{loss}(\text{success}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{Tr}[P_+(\sigma - \rho)] = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \text{Tr}[|\sigma - \rho|] \quad (4-10)$$

观察公式 4-10，不难发现，通过迭代训练，当 $\sigma = \rho$ 时，模型将收敛，达到纳什均衡，此时 loss 值为 $\frac{1}{2}$ 。

4.3 目标量子态生成实验

接下来，在 Jupyter notebook 上通过修改代码完成上述模型的优化，完成目标量子态的生成实验，记录所得量子态数据并与 3.3 节中的作对比分析。

4.3.1 实验过程

首先，针对本章 4.1 和 4.2 中的改进内容，需要对应地将 3.3.2 中的算法 3-1 做出如下改动，见算法 4-1^[24]：

算法 4-1 改进后 QGAN 模型的定义

输入：卷积层 `paddle.nn.Layer`，生成器参数 `theta`，判别器参数 `phi`

初始化：`self.theta=theta`，`self.phi=phi`

1: `def generator(self, theta)`

2: 构造生成器的量子线路（详见 4.1.1 节内容）

3: `end def`

4: `def discriminator(self, phi)`

5: 构造判别器的量子线路（详见 4.1.2 节内容）

6: `end def`

```

7: def disc_target
8:     discriminator(self, phi)
9:     计算判别器对目标态的判断结果
10: end def
11: def disc_gen
12:     得到生成器生成的量子态
13:     discriminator(self, phi)
14:     计算判别器对生成态的判断结果
15: end def
16: def forward(model_name)
17:     定义模型统一的损失函数（详见 4.2 节）
18: end def
19: def get_target_state
20:     将目标态用密度矩阵表示
21: end def
22: def get_generated_state
23:     将生成态用密度矩阵表示
24: end def
输出：优化后的 QGAN 模型

```

接着，我们开展单量子比特纯态的生成实验。

先在四个优化模型 QGAN- γ 、QGAN- δ 、QGAN- ζ 和 QGAN- η 中找出生成效果最好的一个，再将其与优化前的 QGAN-o 模型作对比分析，比较所得量子态度的不同之处，对目标量子态的生成做进一步研究。具体分析内容见 4.3.2 节。

4.3.2 量子态数据与分析

根据 3.3.3 节中表 3-1，表 3-2 和表 3-3 中所展示的量子态的数据不难发现，当学习率 $LR=0.1$ ，迭代次数 $ITR=15$ ， $ITR1=20$ ， $ITR2=50$ 的时候，生成的量子态保真度较高。所以我们固定学习率 $LR=0.1$ ；迭代次数 $ITR=15$ ， $ITR1=20$ ， $ITR2=50$ （记为训练参数一），对 4.1.3 节中的四个优化后的模型 QGAN- γ 、QGAN- δ 、QGAN- ζ 和 QGAN- η 开展单量子比特纯态生成实验，依次记录下所得距离和保真度数值，得到表 4-1 的内容：

表 4-1 四个优化模型在训练参数一下对应的距离和保真度表

No.	model	distance	fidelity	time cost
1	QGAN- γ	0.016958549	0.995220206	2:09
2	QGAN- δ	0.499998175	0.707107429	2:17
3	QGAN- ζ	0.499632221	0.707236827	2:10
4	QGAN- η	0.152633511	0.857004275	2:16

为了排除实验的偶然性,再次选取学习率 $LR=0.2$; 迭代次数 $ITR=5$, $ITR1=20$, $ITR2=50$ (记为训练参数二)。再次进行实验,记录数据,得到表 4-2 中的内容:

表 4-2 四个优化模型在训练参数二下对应的距离和保真度表

No.	model	distance	fidelity	time cost
1	QGAN- γ	0.058307183	0.982640755	0:46
2	QGAN- δ	0.499933296	0.707343234	0:44
3	QGAN- ζ	0.505256495	0.705251353	1:05
4	QGAN- η	0.186205405	0.837864209	0:49

综合表 4-1 和表 4-2 的数据,可以发现,在四个 QGAN 模型中,将删减优化后的量子生成器和删减优化后的量子判别器组合在一起的 QGAN- γ 模型生成的量子态最接近于目标态,保真度最高,效果最好。这可能是因为,实验的目标态为单量子比特纯态,更适用于简单、纠缠少的量子线路。

所以,我们选取 QGAN- γ 模型做更进一步的研究。

为了与 3.3.3 节中的 QGAN-o 模型进行对比,我们固定学习率,修改迭代次数,记录下当学习率 $LR=0.1$ 时,不同迭代次数下对应的目标态与生成态之间的距离和保真度数据,见表 4-3:

表 4-3 学习率 $LR=0.1$, QGAN- γ 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表

No.	ITR	ITR1	ITR2	distance	fidelity	time cost
1	5	10	25	0.197868663	0.935783297	1:09
2	5	20	50	0.076721445	0.975745997	1;13
3	10	10	25	0.057627728	0.981347359	1:37
4	10	20	50	0.022813541	0.993383703	2:45

No.	ITR	ITR1	ITR2	distance	fidelity	time cost
5	15	10	25	0.023939902	0.993080290	2:12
6	15	20	50	0.016958549	0.995220206	2:45

将表 4-3 中的数据与表 3-1 的对比, 在同一学习率下, 优化后的 QGAN- γ 模型生成量子态的保真度有了较大的提高。相较于未优化的 QGAN-o 模型生成态保真度的最高临界值只有 73%, 优化后的 QGAN- γ 模型在训练充分的情况下, 可以达到 99.5% 的高保真度, 与目标量子态很接近了。此外, 对比六次实验结果可以发现, 随着训练次数的增加, 距离和保真度也呈现出明显的线性变化规律, 这说明优化线路后的 QGAN- γ 模型线路设计更加合理, 相比于优化前的模型, 可以达到较好的纳什均衡, 这也证实了第三章中所做的推测。

接着, 调整 QGAN- γ 模型的学习率 $LR=0.2$, 再次进行实验, 记录数据, 得到表 4-4 中的内容:

表 4-4 学习率 $LR=0.2$, QGAN- γ 模型不同迭代次数对应的距离与保真度表

No.	ITR	ITR1	ITR2	distance	fidelity	time cost
1	5	10	25	0.075620057	0.976192399	0:23
2	5	20	50	0.058307183	0.982640755	0:47
3	10	10	25	0.024141873	0.993120956	1:08
4	10	20	50	0.005189759	0.998699317	1:32
5	15	10	25	0.018516763	0.994865528	1:17
6	15	20	50	0.001472625	0.999631775	2:28

对比表 4-3 与表 4-4 中 No.1, No.2, No.3 这三列数据, 可以看出, 表 4-3 中前三次实验所得的距离值要明显低于表 4-4 中前三列对应的距离值, 表 4-4 中前三次实验所得的保真度要明显高于表 4-3 中对应的保真度。这说明在训练次数不足以使模型完全收敛达到纳什均衡的情况下, 学习率取值的高低对模型生成态的保真度有较大影响。这时, 模型的学习率取值越高, 模型收敛的速度越快, 所生成的单量子比特纯态与目标态的距离越短, 保真度越高。对比表 4-3 与表 4-4 中 No.4, No.5, No.6 这三列数据, 可以发现, 表 4-4 中后三次实验所得的距离值和保真度与表 4-3 中后三列对应的数据并没有太大差别。这说明, 在模型收敛达到纳什均衡时, 学习率取值的高低不再对保真度有较大影响, 其作用变化为对于时

间开销方面的影响，学习率较高的模型比学习率低的模型所需时间开销略低。

整体综合表 4-3 与表 4-4 的数据来看，可以得出结论：优化后的 QGAN- γ 模型生成单量子比特纯态的保真度相较于优化前的 QGAN-o 模型大有提高，可以较好的完成单量子比特纯态的制备任务。

接着，我们看一下 QGAN- γ 模型未优化目标函数前生成量子态的可视化过程，见图 4-9 和图 4-10。其中，纵坐标为损失函数的 loss 取值，横坐标为判别器和生成器各自的内部迭代次数；红线从下至上依次表示为判别器损失函数 loss 值随着总迭代次数增加的变化；蓝线从上至下依次表示为生成器损失函数 loss 值随着总迭代次数增加的变化。

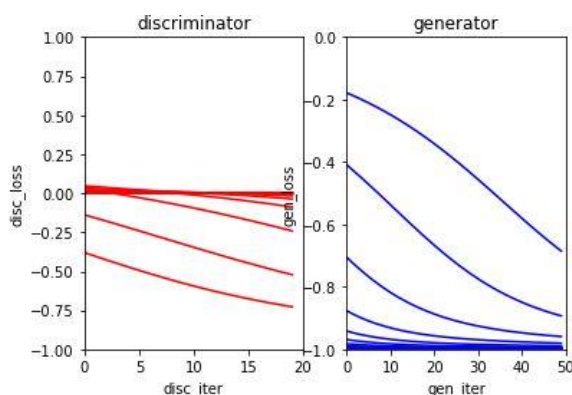


图 4 - 9 QGAN- γ 未优化目标函数在学习率 LR=0.1 下的实验可视化过程

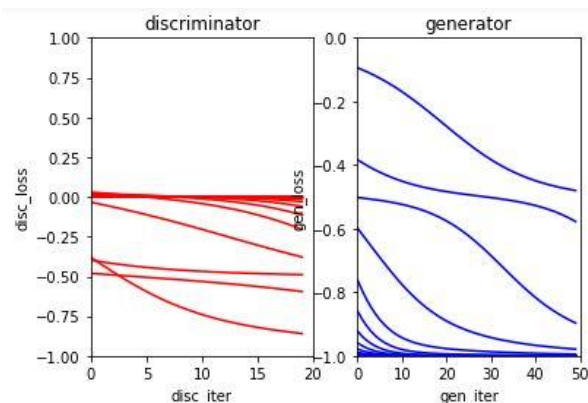


图 4 - 10 QGAN- γ 未优化目标函数在学习率 LR=0.2 下的实验可视化过程

将图 4-9，图 4-10 与图 3-7，图 3-8 对比，发现 QGAN- γ 模型相较于 QGAN-o 模型，所达到的纳什均衡更加完美，其收敛过程也更加平缓，没有变化过快或者变化过慢的段落。这说明其线路设计更合理，减小了迭代次数对于实验的影响。优化后的模型更佳适合目标量子态的生成。

最后，根据 4-2 节中的内容对目标函数进行优化，可以通过观察优化目标函数后 QGAN- γ 模型损失函数的取值变化，更直观的感受模型训练不断收敛达到纳什均衡的过程，见图 4-11 和图 4-12：

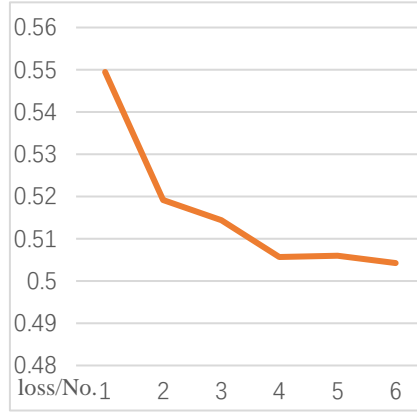


图 4 - 11 QGAN- γ 模型优化目标函数后在学习率 LR=0.1 下的实验可视化过程

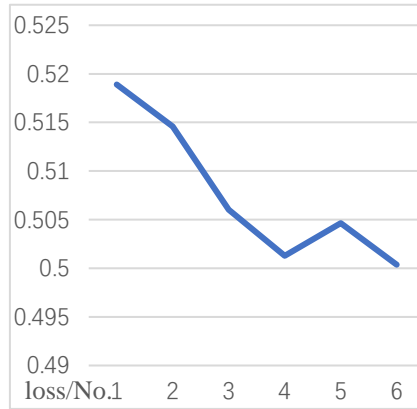


图 4 - 12 QGAN- γ 模型优化目标函数后在学习率 LR=0.2 下的实验可视化过程

将图 4-11 和图 4-12 与图 4-9 和图 4-10 对比，相较于通过观察生成器和判别器各自的损失函数变化图，改进后损失函数生成的可视化过程更加直观简洁。优化前需要分析观察四张图的模型收敛过程，优化后只需要两张图，数量上缩减了一半；内容上，优化前图中 1 条线表示 1 次迭代过程，一张图上有多条线表示模型完整的训练迭代；优化后一个点表示一次迭代过程，只需要一条线就可以表示整个模型的完整训练过程，更加简洁明了。

观察图 4-11 和图 4-12 可以看出，多次训练后，模型的 loss 值逐渐收敛到 0.5，达到纳什均衡。但是，改进前模型在收敛达到纳什均衡时，其损失函数 loss 值能够完美准确地分别收敛到 -1 和 0。而改进后，虽然损失函数也能较好地判别模型是否收敛且更为简洁，但是在模型达到收敛时，其 loss 却无法准确地收敛到 0.5，

与其仍有一小段距离，这说明，优化后损失函数的准确性略微逊色于优化前的，这也是日后工作可以着重改进的一个方向。

4.4 小结

本章针对第三章出现的问题，对模型进行优化，提高了目标量子态的生成效果，进而找出了目标量子态生成的较优方法——QGAN- γ 模型。

本章所做的具体工作总结如下：

（1）针对生成器和判别器量子线路设计，通过缩减或增加量子门的方式调整优化，给出了修改后的图示以及对应表达公式的修改。在此基础上组合搭配出四种优化后的 QGAN 模型——QGAN- γ 、QGAN- δ 、QGAN- ζ 和 QGAN- η ，并且通过实验找出了其中生成单量子比特纯态保真度最高、效果最好的 QGAN- γ 模型。

（2）优化目标函数。将原本生成器和判别器各自的损失函数合二为一，简化模型。给出了训练可视化过程，并且与优化前的损失函数作对比，阐明优化前后各自的优缺点，进一步简化目标量子态的生成过程。

（3）改变各种训练参数对 QGAN- γ 模型做进一步研究，并将所得到的量子态数据结果与第三章优化前所得量子态的数据作对比分析，从而对目标量子态的生成做进一步研究。

第五章 总结与展望

量子力学的发展引领量子计算的不断突破，人工智能的发展更是掀起信息技术的阵阵创新热潮。本文选取量子机器学习中量子生成对抗网络的内容，利用其完成了单量子比特纯态的生成，详细介绍了模型设计与优化，对实验过程和所得数据给出了详细阐述和分析，为日后多量子比特目标态的生成奠定了一定基础。

5.1 论文研究工作总结

2014 年 10 月，Ian J. Goodfellow 等人在题为 *Generative Adversarial Networks* 的论文中提出生成对抗网络模型，给出了该模型的工作方式和基本框架。随后在 2018 年，Lloyd, S. 和 Weedbrook, C. 等人根据经典生成对抗网络的思想，提出了量子版的生成对抗网络模型，在 Benedetti, M., Grant, E., Wossnig, L. 和 Severini, S. 等人的研究中，该模型得到进一步的发展。

对于经典生成对抗网络的应用主要集中在图像视频处理上，而量子生成对抗网络仍处于不断发展的过程中，其应用正在不断完善。本文在前人研究的基础上，利用量子生成对抗网络模型，进行目标量子态的生成实验，试图生成与目标态相同或者相近的量子态，以解决科学实践中由于量子态在被观测后坍缩无法恢复而导致的难以分析实验数据的问题，并且完成了单量子比特纯态的生成。

以下是对本论文所做工作的总结。

(1) 本文列举了国内外学者对于经典生成对抗网络以及量子生成对抗网络研究上的一些成果。对比各个文献发现在目标量子态的生成这一研究方面，量子生成对抗网络可以有较好的应用。本文在此基础上对其进行了较为详细的阐述。

(2) 本文列举出了量子生成对抗网络所需要的理论性基础知识。介绍了量子计算的基本概念，包括量子比特，量子比特门以及 POVM 测量等等，并在此基础上介绍了本文搭建 QGAN 模型所采用的主要方法——变分量子线路法。

(3) 在对量子计算的基础知识有了一定掌握之后，本文在前人研究的基础上，给出了量子生成对抗网络模型的构建算法以及利用其进行单量子比特纯态生成的训练算法。其中，模型构建包括生成器和判别器的线路设计，目标函数的定义与其实际意义。接着，根据模型构建和训练过程算法，在 Jupyter Notebook 上开展实验，并对得到的量子态数据进行分析与研究。

(4) 优化量子生成对抗网络以提升目标量子态的生成效果。对生成器和判别

器线路进行缩减和增加改进,组合出四种优化后的模型,并通过实验找出其中生成目标态效果最好的一个,解决模型在实验过程中所得到生成态保真度不高的问题;对目标函数进行统一合并,简化模型是否达到纳什均衡的过程判定,从而进一步简化量子态的制备过程。在优化模型后再次开展实验,对比优化前和优化后的所生成的量子态数据,分析总结出目标量子态生成的较优方法。

5.2 进一步的工作展望

本文在已有的基础上,利用量子生成对抗网络模型进行目标量子态的生成,取得一定成果。但是本文只完成了单量子比特纯态的生成,对于将来工作的发展,还有以下几方面可以继续进行研究:

(1) 模型线路的进一步优化。通过改进生成器与判别器的线路,设计出更加高效的模型线路,实现双量子比特目标态甚至多量子比特目标态的生成。

(2) 目标函数的进一步优化。本文将原有的两个损失函数合二为一,使得判断模型是否达到纳什均衡更加简洁明了,但在一定程度上失去了一定的准确性。可以对目标函数做进一步优化,争取在保证简洁的同时又可以提高其准确性。

(3) 对训练过程算法优化,从而缩减模型训练时间花销。本文并没有对 QGAN 模型训练的算法给出优化,在如何优化算法进一步提高目标量子态的生成效率这个方向上还有较大的研究空间和较好的研究价值。

参考文献

- [1] Peter W.Shor. Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring. In:Proc of the 35th Annual IEEE Symp on Foundations of Computer Science C[J].1994: 124~134.
- [2] Grover L K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: Proc. of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing, New York: ACM[J].1996: 212-219.
- [3] Zhong H S , Wang H , Deng Y H , et al. Quantum computational advantage using photons[J]. 2020. 10.1126/science.abe8770
- [4] 尼尔森.庄著. 量子计算和量子信息(一)——量子计算部分(赵千川). 北京:清华大学出版社[M]. 2003:3~185.
- [5] Goodfellow I J , Pouget-Abadie J , Mirza M , et al. Generative Adversarial Networks[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2014, 3:2672-2680.
- [6] Lloyd S , Weedbrook C . Quantum Generative Adversarial Learning[J]. Physical Review Letters, 2018, 121(4):040502.1-040502.5.
- [7] Isola P , Zhu J Y , Zhou T , et al. Image-to-Image Translation with Conditional Adversarial Networks[J]. 2017: arXiv:1611.07004
- [8] Ting-Chun Wang, Ming-Yu Liu, Jun-Yan Zhu, Andrew Tao, Jan Kautz, Bryan Catanzaro. High-Resolution Image Synthesis and Semantic Manipulation with Conditional GANs[J]. 2017. 10.1109/CVPR.2018.00917
- [9] Ting-Chun Wang, Ming-Yu Liu, Jun-Yan Zhu, Guilin Liu,Andrew Tao, Jan Kautz, Bryan Catanzaro. Video-to-Video Synthesis[J]. 2018.arXiv:1808.06601v2
- [10] J Biamonte, P Wittek, N Pancotti, P Rebentrost, N Wiebe, S Lloyd. Quantum machine learning[J]. 2017. 10.1038/nature23474
- [11] Ciliberto C, Herbster M, Ialongo A D, et al. Quantum machine learning: a classical perspective[J]. Proceedings Mathematical Physical & Engineering Sciences, 2018, 474(2209):20170551.
- [12] E. Farhi and H. Neven, Classification with quantum neural networks on near term

- processors[J]. arXiv:1802.06002.
- [13] Wiebe N . Key questions for the quantum machine learner to ask themselves[J]. New Journal of Physics, 2020. 10.1088/1367-2630/abac39
- [14] Vedran Dunjko. A non-review of Quantum Machine Learning: trends and explorations[J]. 2020. 10.22331/qv-2020-03-17-32
- [15] Benedetti M , Grant E , Wossnig L , et al. Adversarial quantum circuit learning for pure state approximation[J]. 2018. 1806.00463
- [16] Jinfeng Zeng, Yufeng Wu, Jin-Guo Liu, Lei Wang and Jiangping Hu. Learning and Inference on Generative Adversarial Quantum Circuits[J]. 2019. 1808.03425
- [17] 段博佳. 分组密码算法和杂凑函数的 Grover 量子搜索分析研究[D]. 江苏: 南京航空航天大学, 2010
- [18] John Preskill, Quantum computing in the NISQ era and beyond[J], 2017 Quantum 2, 79. arXiv:1801.00862v3
- [19] Masoud Mohseni, Peter Read, Hartmut Neven, Sergio Boixo, Vasil Denchev, Ryan Babbush, Austin Fowler, Vadim Smelyanskiy, and John Martinis, Commercialize quantum technologies in five years[J], 2017, Nature 543,171-174.
- [20] Benedetti M , Lloyd E , Sack S, et al. Parameterized quantum circuits as machine learning models[J]. 2019. arXiv:1906.07682v2
- [21] 陈彦辉. 量子算法模拟与设计[D]. 吉林:吉林大学, 2005.
- [22] The Jupyter Notebook.平台简介[EB/OL] <https://jupyternotebook.readthedocs.io/en/stable/notebook.html>
- [23] Institute for Quantum Computing, Baidu.百度量桨使用说明与安装简介[EB/OL]https://github.com/PaddlePaddle/Quantum/blob/master/README_CN.md
- [24] Institute for Quantum Computing, Baidu.量子生成对抗网络[EB/OL]https://github.com/PaddlePaddle/Quantum/blob/master/tutorial/machine_learning/QGAN_CN.ipynb
- [25] Pierre-Luc D D , Nathan K . Quantum generative adversarial networks[J]. Physical Review A, 2018. DOI:10.1103/PhysRevA.98.012324

致 谢

大学四年的本科生活就这样飞快地过去了，很开心能够在南师大度过人生中难忘的四年。

首先，要感谢我毕业设计的指导老师段博佳。非常感谢段老师一直以来的鼓励与帮助！感谢老师在我考研复习的时候给予我的理解与鼓励！感谢老师在我找工作的时候给予的关怀！更要感谢老师对于我毕业设计所给予的指导与帮助！从选题一开始，就感受到段老师细致的讲解与耐心的解答。毕业设计的过程中老师给我分享了很多有益的学习资料，指导我开展实验，一遍又一遍不厌其烦地帮我修改所需要完成的各类文稿。段老师严谨细致的致学精神和认真负责的工作态度使我不断进步。很幸运可以在段老师的指导下完成我本科的毕业设计。祝愿段老师事业有成，桃李天下！

感谢计电院的吉根林院长、鲍培明老师和黄为民老师在计算机专业方面授予我的学科知识与技能，感谢老师们让我感受到计算机的魅力与学习的乐趣。感谢社发院白莉老师和外文院邵珊老师在人文社科方面给予我的启迪。

感谢我的同学与朋友。感谢沈翌婷同学，很开心能够在大学里遇见你，感谢你在我找工作时给予我的帮助，感谢你大学四年来给我带来的欢声笑语。感谢我的朋友们，感谢吕天宸和董馨月在我平凡日子里增添的美好时光。

最后，特别要感谢我的父母和家人！感谢我父母一直以来的养育，支持与鼓励！感谢表妹陪伴我一起成长！

谢谢大家，祝大家生活愉快。