# 基于 TDD 的量子模型检测中的可达性分析

## 硕士学位论文答辩

高丁超
导师： 应圣钢

中国科学院软件研究所

2024 年 4 月 17 日

# 目录

# 目录

**标题:** 基于 TDD 的量子模型检测中的可达性分析

**总结:**

问题: 如何在量子系统中验证命题。

解决方案: 采用量子模型检测。

挑战: 原有的方法随着量子比特数量的增加，资源需求指数级增长。

方法: 引入新的数据结构 TDD 对量子算法进行表示，同时实现了优化算法进一步减少了时间消耗。

## 量子计算的关键概念

**量子比特（Qubits）：** the quantum version of the classic binary

**叠加态（Superposition）：** $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$

**纠缠（Entanglement）：**$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$

**量子门（Quantum Gates）**

# 量子门操作例子

**单量子门例子：**

$$X=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}, Y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}, Z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}, H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}$$

**多量子门例子：** $\text{CNOT} = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\end{bmatrix}$

**测量，比如** $Z$ **基测量：** **状态为** $|0\rangle$ **输出** $1$，**状态为** $|1\rangle$ **输出** $-1$。

# 量子计算例子

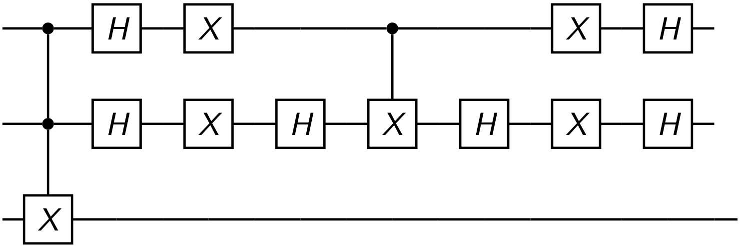


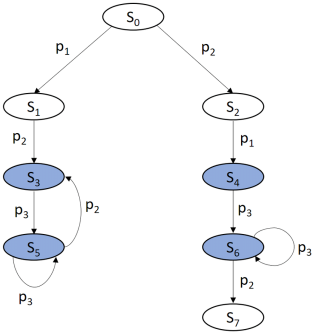

图: Grover_3 算法的电路。

# 量子迁移系统

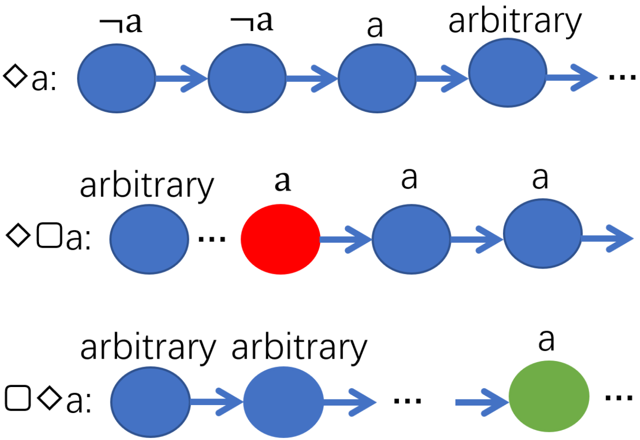
**迁移系统 (transition system)：** $(S, I, \Sigma, T)$

$$\text{where}\begin{cases} x = x_1, \cdots, x_n \\ y = y_1, \cdots, y_n \\ \sigma = \sigma_1, \cdots, \sigma_m \end{cases}$$

**量子迁移系统：** $(\mathcal{H}, \mathcal{H}_0, Act, \{U_\alpha, \alpha \in Act\})$



# 可达性问题



# 量子模型检测例子

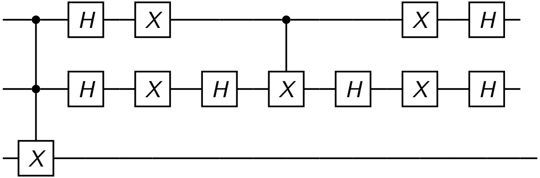



图: Grover_3 算法的电路。

oracle 为 ccx，即 $O|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|f(x) \oplus y\rangle, f(x) = x_1 \wedge x_2$。

**model:** $(\mathcal{H}_8, S = span\{|++-\rangle, |11-\rangle\}, \{1\}, \mathcal{T}_1)$, $\mathcal{T}_1 = (2|\Psi\rangle\langle\Psi| - I)O$

**property:** $\mathcal{T}_1(S) = S$

# 张量决策图（TDD）

**TDD 定义**：由节点集 $V$、边集 $E$、索引函数 $index$、值函数 $value$、低高边映射 $low/high$ 和权重 $w$ 组成。

- 节点集 $V$ 分为非终端节点 $V_N$ 和终端节点 $V_T$，且有唯一根节点 $r_{\mathcal{F}}$。
- 边集 $E$ 包含所有低边 $(v, low(v))$ 和高边 $(v, high(v))$。
- 索引函数 $index$ 分配索引，值函数 $value$ 赋予终端节点复数值，$w$ 为边赋权重，特别是根边权重 $w_{\mathcal{F}}$。

# TDD 例子

$$P = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

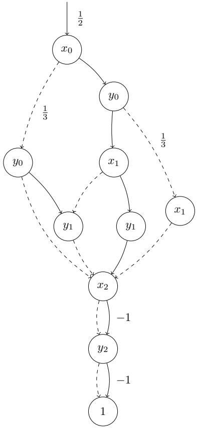



图: 可以用 10 个 TDD 节点表示一个 $8*8$ 的矩阵。其中 TDD 虚线表示低点，实线表示高边。

# 相关工作效率比较

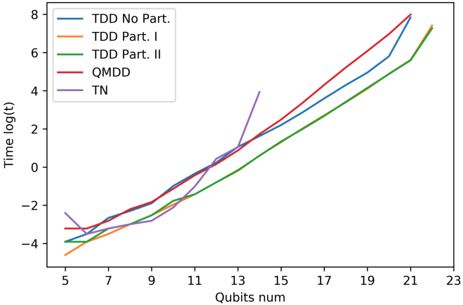



图: 应用不同技术对 QFT 算法进行模拟的时间对比

TDD No part,TDD part I, TDD part II 为不同的 TDD 收缩算法。
QMDD 为量子多值决策图，是一种常用的模型检测方法。
TN 为 Google 的 tensro network，是一种常用的张量方法。

# 相关工作-QMDD

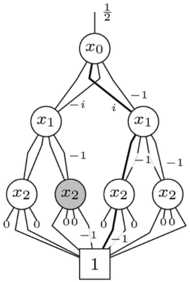



图: 一个 QMDD 的示例。

TDD 只有高边和低边，表示更简洁。

# 目录

# 解决方案简介：

**基本方法**：将转移关系和初态转化为 TDD 表示，然后计算系统的状态转移。

**改进算法**：

- **addition partition:** 寻找依赖最多的索引项，从而分割线路。
- **contraction partition:** 通过预设的参数进行线路分割。

**创新点**：

- 通过 TDD，可以自动化的验证更大规模的量子算法。
- 通过 C++ 重构，实现了比过去 TDD 更好的运行效率。

## adddition partition

- 将量子电路转换为索引依赖图 G。
- 通过图 G 的连通度选择索引进行电路分割。

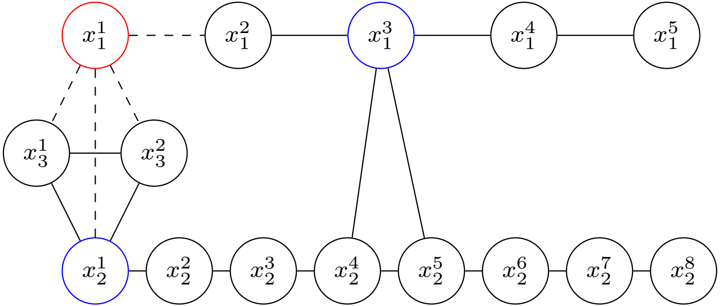



图: Grover_3 电路的索引依赖图。对索引项 $x_3^1, x_3^2$ 进行线路分割，效果更好。

# Contraction partition

- 确定预设参数 k1 和 k2。
- 分割电路，每部分包括最多 k1 个量子比特，连接最多 k2 个多比特门。

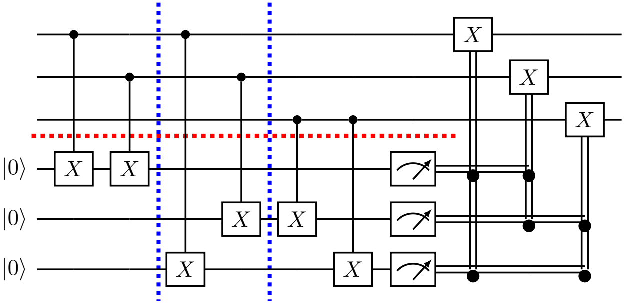



图: 对 bit flip 电路进行划分，其中 k1=3,k2=2。

# 工作成果

| benchmark | basic | addition | contraction |
|---|---|---|---|
| Grover 20 | $\sim$5 分 | $\sim$4 分 | $\sim$4 秒 |
| Quantum Fourier Transform 20 | $\sim$20 分 | $\sim$11 分 | $<$1 秒 |
| Quantum Random walk 20 | $\sim$6 分 | $\sim$4 分 | $\sim$15 秒 |
| Bernstein-Vazirani 100 | $\sim$7 秒 | $\sim$7 秒 | $\sim$0.4 秒 |
| GHZ 500 | $\sim$3 秒 | $\sim$1.5 秒 | $\sim$1.7 秒 |

表: 对不同量子算法计算一步迁移的时间消耗

- 对于有特殊结构的算法，如 GHZ 算法，addition partiton 有更好的执行效率。
- 对于一般的电路，contraction partition 的执行效率更好。

# 工作成果

- 通过 C++ 重构 TDD，改进了内存管理，从而加快了计算效率。

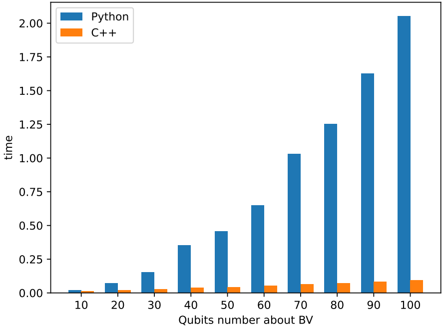



图: 用 python 和 c++ 不同版本的 TDD 运行 Bernstein-Vazirani 算法的时间效率比较

# 未来计划

- 应用等价性，可以化简数据结构。
- 结合优化算法与 C++ 的优势，进一步提高执行效率。

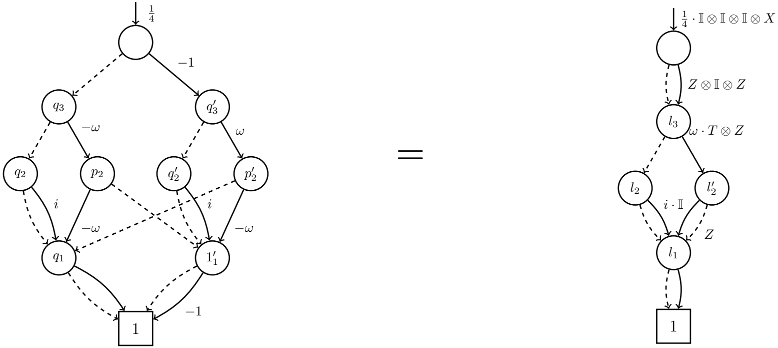



图: Local Invertible Map-DD

# 目录

# 目录

# 谢谢