

# 基于张量决策图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 5 月 14 日



# 目录

- 1 背景介绍
- 2 基于张量决策图的量子模型检测
- 3 实验结果
- 4 学位论文修改情况

# 目录

## 1 背景介绍

## 2 基于张量决策图的量子模型检测

## 3 实验结果

## 4 学位论文修改情况

# 研究背景

- 量子计算机硬件的快速发展
  - ▶ 规模化拓展方面：
    - IBM: Condor 1121 超导量子比特; 中科大: 九章三号 255 光量子比特。
  - ▶ 容错计算方面：
    - IonQ: 29 离子阱算法比特; QuEra: 48 中性原子量子比特。

# 研究背景

- 量子计算机硬件的快速发展
  - ▶ 规模化拓展方面：
    - IBM: Condor 1121 超导量子比特; 中科大: 九章三号 255 光量子比特。
  - ▶ 容错计算方面：
    - IonQ: 29 离子阱算法比特; QuEra: 48 中性原子量子比特。
- 现有验证方法
  - ▶ 模型检测自动化程度高, 但存在资源爆炸的问题
  - ▶ 定理证明处理复杂问题有明显优势, 但自动化程度低

# 基于张量决策图的量子模型检测中的可达性分析

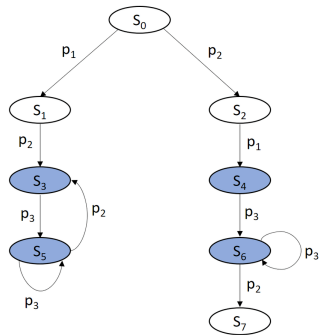
- 问题：如何在量子系统中验证命题。
- 解决方案：采用量子模型检测。
- 挑战：原有的方法随着量子比特数量的增加，资源需求指数级增长。
- 方法：引入新的数据结构 TDD 对量子算法进行表示，同时实现了优化算法进一步减少了时间消耗。

# 量子迁移系统

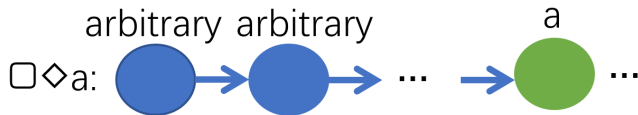
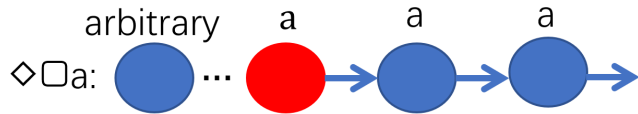
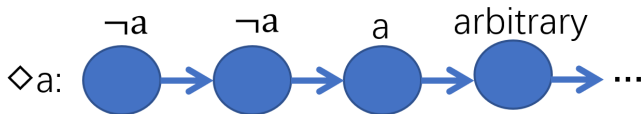
- 迁移系统 (transition system):  $(S, I, \Sigma, T)$

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

- 量子迁移系统:  $(\mathcal{H}, S, \Sigma, T)$



# 可达性问题





# 量子模型检测例子

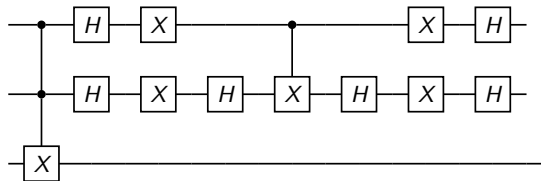


图: Grover\_3 算法的电路。

- oracle 为 ccx, 即  $O|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|f(x) \oplus y\rangle, f(x) = x_1 \wedge x_2$ 。
- **model:**  $(\mathcal{H}_8, S = \text{span}\{|++-\rangle, |11-\rangle\}, \{1\}, \mathcal{T}_1), \mathcal{T}_1 = (2|\Psi\rangle\langle\Psi| - I)O$
- **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

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

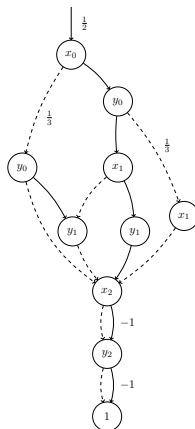


图: 可以用 10 个 TDD 节点或者一个  $8 \times 8$  的矩阵表示子空间  $S = \text{span}\{|++-\rangle, |11-\rangle\}$  投影算子。其中 TDD 虚线表示低点, 实线表示高边。

# 目录

- #### 4 学位论文修改情况

# 解决方案简介：

- 研究问题：减缓量子模型检测中的资源消耗
- 基本方法：将转移关系和状态空间转化为 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。
  - ▶ 基于窗函数对 TDD 分割：
  - ▶ 用子空间近似 TDD 表示  $|\psi\rangle$

# 理论支撑

对于  $(\mathcal{H}, S, \Sigma, \mathcal{T})$  有:

## 定理

设  $\mathcal{T}$  是一个量子操作。则

- 1  $\mathcal{T}(\bigvee_i S_i) = \bigvee_i \mathcal{T}(S_i)$ 。
- 2 若  $\mathcal{T} = (\mathcal{T}_\sigma)_{\sigma \in \Sigma}$  且每个  $\mathcal{T}_\sigma$  有 Kraus 算符和表示  $\mathcal{T}_\sigma = \{E_{\sigma j_\sigma}\}$  则  $\mathcal{T}(S) = \text{span}\left(\bigcup_{\sigma, j_\sigma} \{E_{\sigma j_\sigma} |\psi\rangle : |\psi\rangle \in S\}\right)$ 。

# 子空间

- 通过投影算子  $P$  最左侧非零路径所对应的归一化状态  $|v_i\rangle$ ，求解空间的基分解
- 通过施密特正交化方法，向  $S_1$  中添加  $S_2$  正交基中不在  $S_1$  子空间的基，得到  $S_1 \vee S_2$  的正交基

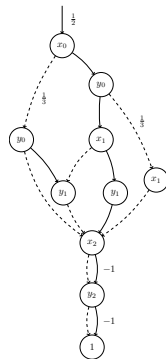


图: 子空间

$S = \text{span}\{|++-\rangle, |11-\rangle\}$  投影算子的 TDD 表示

# 子空间

- 通过投影算子  $P$  最左侧非零路径所对应的归一化状态  $|v_i\rangle$ , 求解空间的基分解
- 通过施密特正交化方法, 向  $S_1$  中添加  $S_2$  正交基中不在  $S_1$  子空间的基, 得到  $S_1 \vee S_2$  的正交基

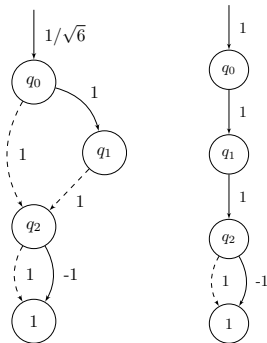


图:  $|v_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |0\rangle |+\rangle |-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\rangle |0\rangle |-\rangle$ ,  $|v_2\rangle = |11-\rangle$  的 TDD 表示

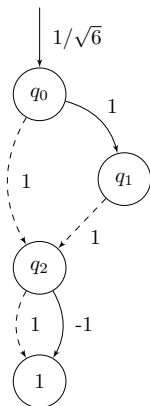


# 窗函数分割

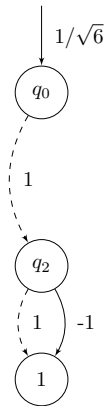
函数对于同一输入，始终满足以下条件：

- $w_1 + \cdots + w_k = 1$
- 对任意  $i \neq j$ ,  $w_i \cdot w_j = 0$

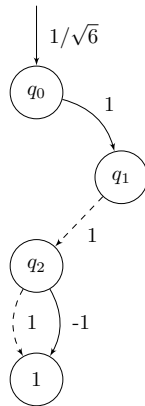
# 窗函数分割



(a)  $|v_1\rangle$  的 TDD 表示



(b)  $|v_1\rangle$  在  $w_1 = \bar{q}_0$  下的 TDD 表示



(c)  $|v_1\rangle$  在  $w_2 = q_0$  下的 TDD 表示

# 用子空间近似 TDD 表示 $|\psi\rangle$

- 特定量子态  $|\psi\rangle$ ，能够通过包含它的适当子空间来近似  $|\psi\rangle$ 。
- 例如通过  $\{|00-\rangle, |01-\rangle, |10-\rangle\}$  近似表示  $|v_1\rangle$

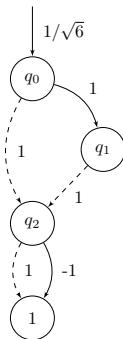


图:

$$|v_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |0\rangle |+\rangle |-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\rangle |0\rangle |-\rangle$$

的 TDD 表示

## addition 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。

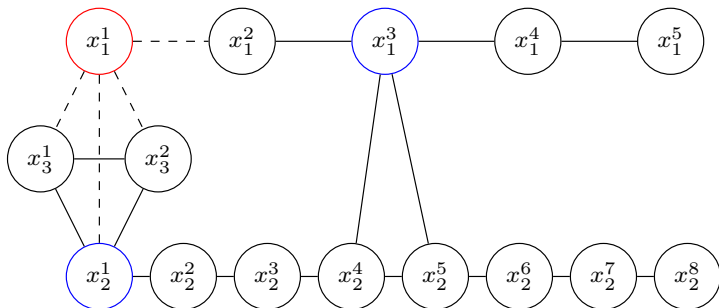


图: Grover\_3 电路的索引依赖图。对索引项  $x_3^1, x_3^2$  进行线路分割, 效果更好。

## Contraction partition

- 确定预设参数  $k_1$  和  $k_2$ 。
- 分割电路，每部分包括最多  $k_1$  个量子比特，连接最多  $k_2$  个多比特门。

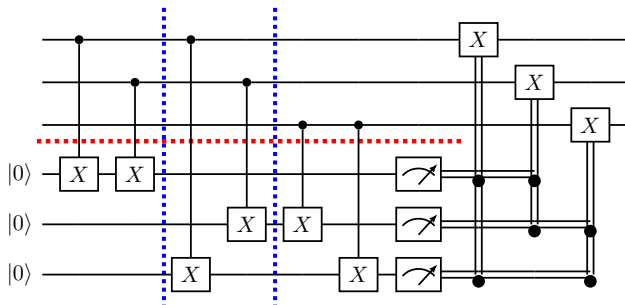


图: 对 bit flip 电路进行划分, 其中  $k_1=3, k_2=2$ 。

# 目录

1 背景介绍

2 基于张量决策图的量子模型检测

3 实验结果

4 学位论文修改情况

# 对 TDD 结构的优化

表: TDD 拆分与近似的优化方案

线路	优化方法		$k = 0$	$k = 1$	$k = 2$	$k = 3$
Grover_40	TDD 分割	时间	1,510.42	1,519.24	1,459.02	1,495.20
		最大节点个数	589,865	393,423	393,239	245,814
QFT_100	子空间近似	时间	121.28	118.78	116.69	128.31
		最大节点个数	524,369	262,226	262,226	131,155

# 线路划分技术的参数选择

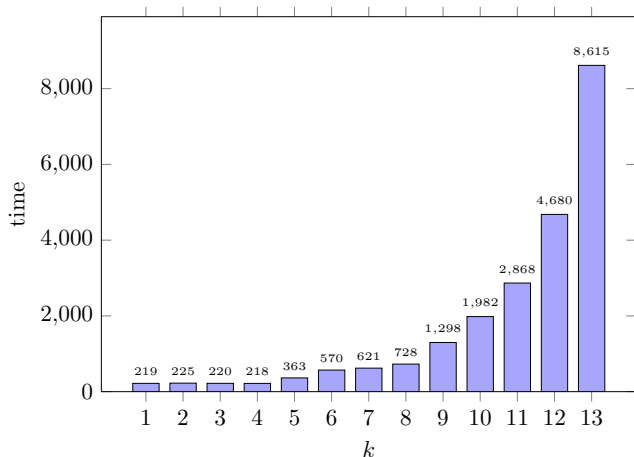


图: 不同参数  $k$  对 Grover\_15 线路的 additon 划分方案的时间影响,  $k$  不应选择过大



# 线路划分技术的参数选择

表: 对 grover\_15 应用不同的 contraction 参数的时间对比,  $k1, k2$  均不应选择过大

$\begin{smallmatrix} k2 \\ \backslash k1 \end{smallmatrix}$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	2.8	2.2	2.1	2.0	1.9	2.0	2.1	2.0	2.1	2.0	2.0	2.1	2.2	2.1	2.1
2	2.6	2.0	2.0	1.8	2.0	2.0	2.0	2.0	2.1	2.0	2.3	2.0	2.3	2.3	2.4
3	2.2	1.9	1.8	1.6	2.0	1.9	2.1	2.1	2.5	2.3	2.7	2.3	3.1	2.8	3.3
4	2.3	1.8	2.0	1.7	2.0	2.1	2.2	2.1	2.6	2.3	2.8	2.7	3.3	3.0	3.3
5	2.2	1.7	1.9	1.6	1.9	2.0	2.3	1.9	2.5	2.3	2.8	2.7	3.4	3.0	3.6
6	2.1	1.5	1.8	1.7	2.2	1.9	2.5	2.2	2.9	2.8	3.1	2.9	3.7	3.7	4.2
7	2.1	1.5	1.9	1.6	2.2	1.9	2.5	2.2	2.8	3.0	3.6	3.3	4.2	5.7	5.0
8	2.0	1.7	1.8	1.7	2.1	2.0	2.4	2.2	2.8	2.8	3.7	3.4	4.3	4.8	5.2
9	2.1	1.5	2.0	1.4	2.2	2.0	2.5	2.0	3.3	2.9	3.7	3.5	4.9	4.7	5.8
10	2.3	1.9	2.3	1.6	2.6	2.7	3.1	2.2	4.0	3.6	4.6	3.9	5.6	5.2	7.5
11	3.2	3.2	3.5	3.1	4.7	4.2	5.6	4.2	6.8	7.2	7.6	6.3	9.0	8.1	11
12	5.6	6.0	7.2	6.0	8.3	9.0	8.9	7.8	11	11	12	11	12	15	16
13	11	12	14	12	15	18	18	15	18	20	18	32	32	30	25
14	20	21	24	32	31	44	77	50	86	109	68	133	70	119	142
15	28	30	31	53	69	111	85	81	102	153	114	130	166	162	235

# 线路划分技术

benchmark	basic	addition	contraction
Grover 20	~5 分	~4 分	~4 秒
Quantum Fourier Transform 20	~20 分	~11 分	<1 秒
Quantum Random walk 20	~6 分	~4 分	~15 秒
Bernstein-Vazirani 100	~7 秒	~7 秒	~0.4 秒
GHZ 500	~3 秒	~1.5 秒	~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 partition 有更好的执行效率。
- 对于一般的电路，contraction partition 的执行效率更好。

# 总结

- 设计了并实现了有效识别给定子空间基的算法，并针对子空间及量子线路，提出了多种优化策略。
- 以量子迁移系统中一步迁移算法为例，本次研究设计了数值实验，验证了工具可行性。
- 数值实验验证了采用基于 contraction 的线路分割算法能大幅提升量子迁移系统中一步迁移算法的效率。

# 目录

- 1 背景介绍
- 2 基于张量决策图的量子模型检测
- 3 实验结果
- 4 学位论文修改情况

# 盲审结果与修改情况

- 审稿人意见：优秀，良好，良好
- 表达规范性：专有名词，引用学者称呼规范化
- 工作完整性：算法的正确性保证

# 谢谢