

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 5 月 13 日



目录

1 背景介绍

2 研究内容

3 研究结果

4 学位论文修改情况

- **标题:** 基于张量网络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

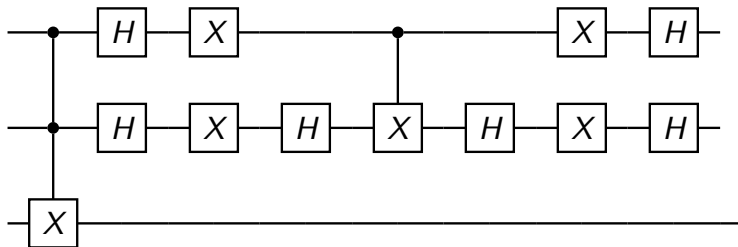


图: Grover_3 算法的电路。

研究背景

- 量子计算的快速发展
 - ▶ 规模化拓展
 - IBM: Condor 1121; 中科大: 九章三号 255
 - ▶ 容错计算
 - IonQ: 29; QuEra: 48

研究背景

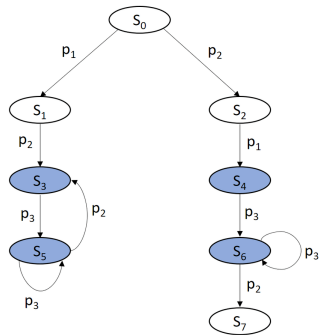
- 量子计算的快速发展
 - ▶ 规模化拓展
 - IBM: Condor 1121; 中科大: 九章三号 255
 - ▶ 容错计算
 - IonQ: 29; QuEra: 48
- 现有验证方法
 - ▶ 模型检测自动化程度高, 但存在资源爆炸的问题
 - ▶ 定理证明处理复杂问题有明显优势, 但自动化程度低

量子迁移系统

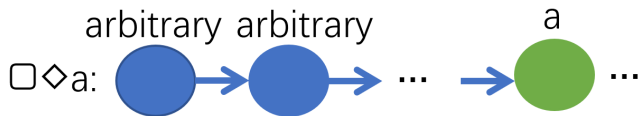
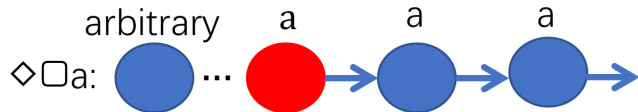
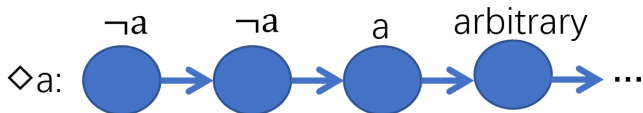
- 迁移系统 (transition system): (S, I, Σ, T)

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

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



可达性问题



量子模型检测例子

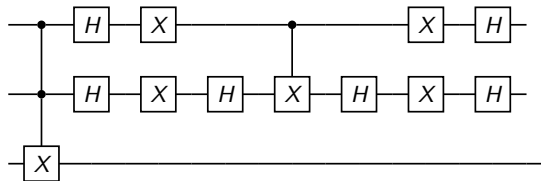


图: Grover_3 算法的电路。

- 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

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

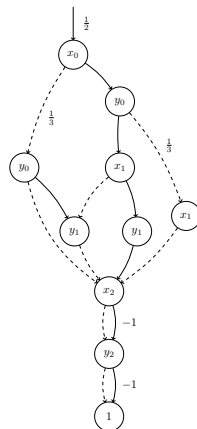


图: 可以用 10 个 TDD 节点或者一个 8×8 的矩阵表示子空间 $S = \text{span}\{|++-\rangle, |11-\rangle\}$ 投影算子。其中 TDD 虚线表示低点, 实线表示高边。

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}_σ 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

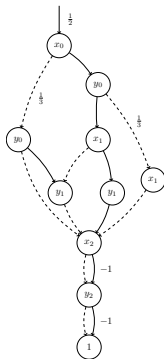


图: 子空间

$S = \text{span}\{|++-\rangle, |11-\rangle\}$ 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

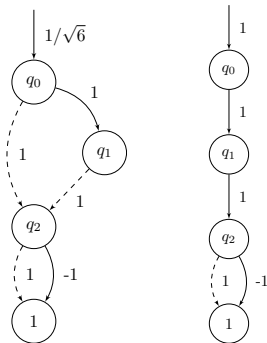


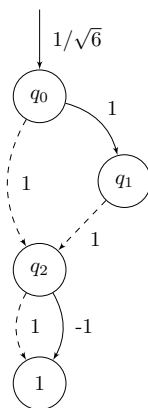
图: $|v_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |0\rangle |+\rangle |-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\rangle |0\rangle |-\rangle$, $|v_2\rangle = |11-\rangle$ 的 TDD 表示

窗函数分割

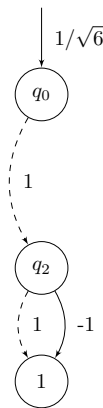
函数对于同一输入，始终满足以下条件：

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

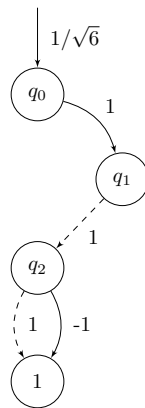
窗函数分割



(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 $|\nu_1\rangle$

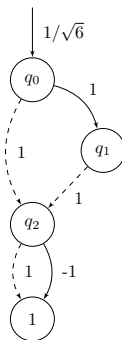


图:

$$|\nu_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |0\rangle |+\rangle |-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1\rangle |0\rangle |-\rangle$$

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。

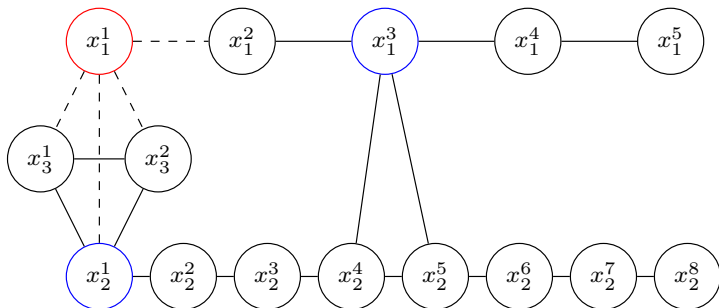


图: Grover_3 电路的索引依赖图。对索引项 x_3^1, x_3^2 进行线路分割, 效果更好。

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。

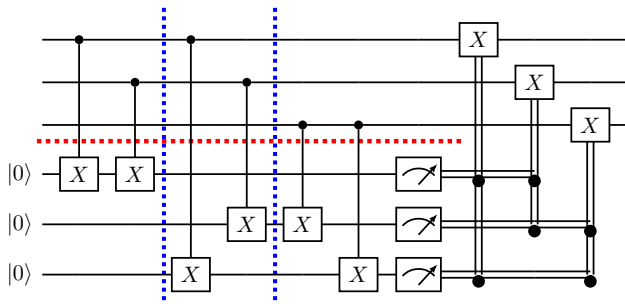


图: 对 bit flip 电路进行划分, 其中 $k_1=3, k_2=2$ 。

目录

- 1 背景介绍
- 2 研究内容
- 3 研究结果
- 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

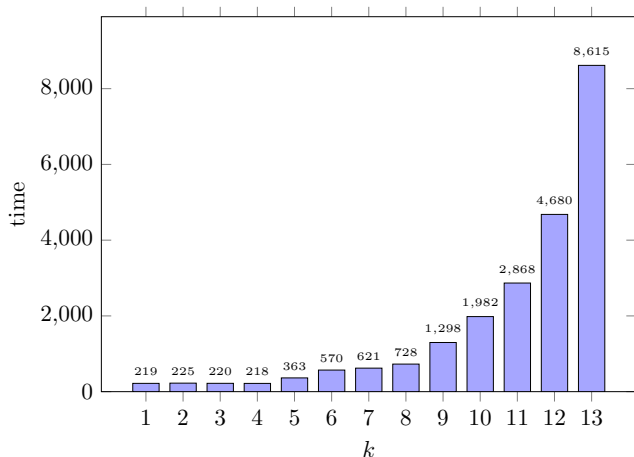


图: 不同参数 k 对 Grover_15 线路的 additon 划分方案的时间影响, k 不应选择过大

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

$k2 \backslash k1$	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 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。

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 研究内容
- 3 研究结果
- 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