薛定谔方程：Time dependent form:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

体系的能量算符，其本征值就是体系各种状态所对应的能量

Time-independent form:

$$E\psi = -\frac{\hbar^2\partial^2\psi}{2m\partial x^2} + V(x)\psi \rightarrow H\psi = E\psi$$

Variational Quantum Algorithm

变分原理：薛定谔方程的任何近似解所对应的能量均比体系基态的能量更高

设定所研究体系的哈密顿量算符为H，任意一个归一化的波函数为ψ

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \qquad E \geqslant E_0$$

E_0为体系基态能量，只有ψ与描述体系基态的波函数相同时才有$E=E$

Ising Model. $H = -\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + h\sum_i \sigma_i \qquad \sigma_k \in \{-1, +1\}$.

Hopfield Network:

The discrete-time Hopfield Network always minimizes exactly the following pseudo-cut

$$U(k) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} w_{ij}(s_i(k) - s_j(k))^2 + 2\sum_{j=1}^{N}\theta_j s_j(k)$$

$$s_i \leftarrow \begin{cases} +1 & \text{if } \sum_j w_{ij}s_j \geqslant \theta_i \\ -1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

1. w_{ij} is the strength of the connection weight from unit j to unit i
2. s_i is the state of unit i
3. θ_i is the threshold of unit i

AI for Quantum: Quantum Chemistry; Quantum Circut Compiling; Quantum Error Correction; Quantum Hardware Design.

量子计算与人工智能初探.

Q:什么是量子? $\xleftrightarrow{对比}$ 经典力学(伽利略 牛顿)

量级 $<10^{-9}$ m 时不适用

适用

光的探究

- 光是粒子 ⟶ 光电效应(爱因斯坦)
- 光是波 ⟶ 双缝干射(托马斯·杨)

⟶ 光具有波粒二象性.

Superposition. 叠加态 与纠缠.

Quantum Entanglement　　eg. 上海与北京中确定上海有50个0. 则北京有50个1

Quantum Computing.

Quantum Bits and Gates.　　Bits 表变量数量. Gates: 改变量子态.

⟶ 将门看作矩阵进行计算.

Quantum Supremacy (了可否实现) ⟶ eg. 50 Bits. 1000 随机取样 time < 200 min

Quantum Advantage [量子Bit不可复制]. 2. Beyond Classical on certain problem

3. Dedicated Quantum Simulator with Practical value.

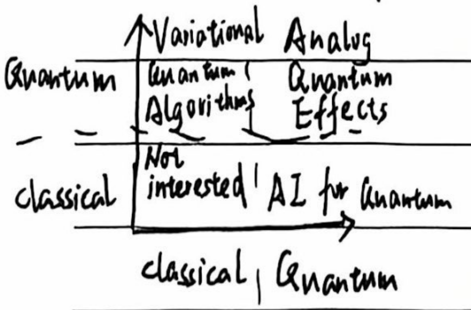
4. Fault-Tolerant Universal Quantum Computer

Development Stage: M_1. (54物理比特) 超越经典 M_2 (10^3物理比特) 逻辑量子比特原型

M_3 (10^3物理比特) 一个长寿命逻辑比特 M_4. (10^4物理比特) 逻辑量子门

M_5. (10^5物理比特) 工程规模扩大 M_6. (10^6物理比特) 容错量子计算

Quantum Artificial Intelligence.



Variational Quantum Algorithm.

在量子力学中描述微观粒子状态变化规律的运动方程是薛定谔于1926年提出. 求解薛定谔方程. 即从电子结构层面来阐释分子的能性质及分子间的相互作用的本质