

中图分类号:

单位代号: 10280

密 级: 公开

学 号: 21820292

上海大学



博士学位论文

SHANGHAI UNIVERSITY
DOCTOR'S DISSERTATION

题 目	机器学习在量子信息与量子调控中的应用
-----	--------------------

作 者 丁泳程

学科专业 无线电物理

导 师 陈奎

完成日期 二〇二四年二月

姓 名：丁泳程

学号：21820292

论文题目：机器学习在量子信息与量子调控中的应用

上海大学

本论文经答辩委员会全体委员审查，确认符合上海大学博士学位论文质量要求。

答辩委员会签名：

主 席： 梁兆新 教授 浙江师范大学

委 员：
杭超 教授 华东师范大学
李燕 教授 华东师范大学
申明 教授 上海大学
张永平 教授 上海大学

导 师： 陈玺 教授

答辩日期：2024年6月11日

姓 名：丁泳程

学号：21820292

论文题目：机器学习在量子信息与量子调控中的应用

上海大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除了文中特别加以标注和致谢的内容外，论文中不包含其他人已发表或撰写过的研究成果。参与同一工作的其他研究者对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。

学位论文作者签名：

日期： 年 月 日

上海大学学位论文使用授权说明

本人完全了解上海大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留论文及送交论文复印件，允许论文被查阅和借阅；学校可以公布论文的全部或部分内容。

(保密的论文在解密后应遵守此规定)

学位论文作者签名：

导师签名：

日期： 年 月 日

上海大学理学博士学位论文

机器学习在量子信息与量子调控中的 应用

作 者: 丁泳程

导 师: 陈奎

学科专业: 无线电物理

理学院
上海大学
2024 年 2 月

A Dissertation Submitted to Shanghai University for the
Degree of Doctor in Science

Application of machine learning in quantum information and quantum control

Candidate: Yongcheng Ding

Supervisor: Xi Chen

Major: Radiophysics

**College of Science
Shanghai University
February, 2024**

摘要

近年来，量子信息和量子控制这两个领域备受关注，其中量子信息的最引人注目的分支是量子计算。量子计算需要对量子系统进行精确而高效的操作，而这正是量子控制所关注的。本论文通过应用机器学习算法，深入探讨了这些领域的交叉点，同时涉及了量子测量——量子基础中最引人入胜的方面。这项工作的主要焦点是在量子控制和量子信息中应用机器学习。具体而言，论文展示了机器学习相对于解析方法的鲁棒性，揭示了量子信息处理的高效性，引入了诸如测量诱导量子控制和量子算法等新概念，主要成果如下：

一、强化学习用于相干量子调控：评估了强化学习在设计两能级系统中的布居数反转的相干控制方面的效果。其鲁棒性通过解析可求解的复合脉冲和反向绝热捷径得到验证，并在离子阱实验中得到证实。这为在量子调控中应用强化学习奠定了理论基础。

二、基于强化学习的闭环量子调控：考虑到神经网络观察了量子系统的状态，这并非是无成本的，因此弱测量被整合入强化学习量子调控的框架下，通过基于连续弱测量反馈的强化学习来探讨闭环量子控制，进一步展示了闭环量子控制和迁移学习以适应新的噪声环境的性能。

三、主动学习用于测量优化与量子信息提取：引入一个二分类游戏来研究量子弱测量的成本以及保真度损失和量子信息提取之间的权衡，应用量子主动学习来优化采样策略，以最小化测量成本。并进一步扩展到三能级编码的多分类问题和多体物理系统中的相变预测。

四、推广主动学习到训练量子机器学习模型：提出了提升学习量子与经典数据的少样本学习表现的量子主动学习框架，还将数据中蕴含的对称性纳入量子神经网络的结构中，从而在算法与模型两方面共同实现这一目标。

五、测量诱导超振荡量子控制：前期工作指出在无需基于量子测量反馈做出决策的情况下，可以通过累积弱值来操控量子系统。由此提出了一个称为测量诱导超振荡量子控制的通用框架，类似于量子控制和量子算法中的绝热捷径，为量子调控

提供了新的方法框架。

关键词：机器学习、量子绝热捷径、弱测量、超振荡

ABSTRACT

In recent years, the intertwined domains of quantum information and quantum control have garnered significant attention. Quantum information, with its most intriguing sub-branch being quantum computing, necessitates precise and efficient manipulation of quantum systems—an endeavor falling under the purview of quantum control. This thesis explores the intersection of these fields by employing machine learning algorithms, delving into the intricate landscape of quantum measurement—a captivating aspect of quantum foundations. The primary focus of this thesis is the application of machine learning in quantum control and quantum information. Specifically, it demonstrates the robustness of machine learning compared to analytical methods, unveils the efficacy of quantum information processing, and introduces novel concepts such as measurement-induced quantum control and quantum algorithms. The key outcomes are as follows:

Reinforcement Learning for Coherent Quantum Control.— We assess the effectiveness of reinforcement learning in designing coherent control for population inversion in a two-level system. Its robustness is validated against analytically solvable composite pulses and inverse-engineering shortcuts-to-adiabaticity, confirmed through experiments with trapped ions. This establishes a theoretical foundation for employing reinforcement learning in quantum control.

Closed-Loop Quantum Control with Reinforcement Learning.— Exploring closed-loop quantum control with reinforcement learning based on feedback from continuous weak measurement, we address the natural integration of weak measurement due to the neural network’s observation of the quantum system state. We showcase the performance of closed-loop quantum control and transfer learning to adapt to new noisy environments.

Active Learning for Information Retrieval.— Introducing a binary classification game to probe the cost of quantum weak measurement and the trade-off between fidelity loss and quantum information extraction, we apply quantum active learning to optimize sampling

strategies and minimize measurement costs. This extends to multinomial classification in qutrit encoding and phase transition prediction in diverse physical systems.

Quantum Active Learning.— Extending active learning to training quantum machine learning model, we propose the concept of quantum active learning to improve the few-sampling learning performance for quantum and classical data. We encode data label symmetry in the architecture design of the quantum neural network to achieve this goal from the algorithm side and model side.

Measurement-Induced Superoscillating Quantum Control.— Recognizing the possibility of manipulating quantum states without relying on feedback from quantum measurements, we present a novel framework—measurement-induced superoscillating quantum control. Resembling shortcuts-to-adiabaticity in quantum control and quantum algorithms, this approach offers a new perspective on quantum system manipulation.

Keywords: Machine learning; Shortcuts-to-adiabaticity; Weak measurement; Superoscillation

目 录

摘要	I
ABSTRACT	III
第一章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 量子绝热定理	2
1.3 量子弱测量	3
1.4 论文结构安排	5
第二章 强化学习量子绝热捷径	7
2.1 理论推导	8
2.1.1 反向工程设计量子绝热捷径	8
2.1.2 量子速度极限与梯度脉冲优化	13
2.1.3 深度强化学习框架	15
2.1.4 模型训练细节	17
2.1.5 讨论	19
2.2 离子阱实验证	20
2.3 结论	30
第三章 强化学习闭环量子调控	31
3.1 开放量子系统与弱测量	31
3.2 数值实验	33
3.2.1 物理系统与任务	33
3.2.2 数值设置	34
3.2.3 模型训练与评估	35
3.2.4 迁移学习	36
3.3 讨论与展望	36
3.4 结论	37

第四章 主动学习量子信息处理	43
4.1 主动学习理论	44
4.2 量子比特信息检索	48
4.2.1 弱测量	48
4.2.2 任务设计	49
4.2.3 数值实验	50
4.2.4 结论与讨论	54
4.3 三能级系统信息检索	54
4.3.1 密度矩阵重建	54
4.3.2 任务设计	57
4.3.3 数值试验	57
4.3.4 统计误差与算法鲁棒性	59
4.3.5 数值实验反例	60
4.4 量子多体系统相界	64
4.4.1 几何阻挫系统	64
4.4.2 任务设计	68
4.4.3 数值实验	68
4.4.4 连续时间蒙特卡洛算法	70
4.5 结论	72
第五章 量子主动学习	74
5.1 预备知识	75
5.1.1 量子神经网络	75
5.1.2 几何量子机器学习	76
5.2 切甜甜圈： \mathcal{Z}_2 对称性	79
5.2.1 问题描述	79
5.2.2 量子机器学习模型	81
5.2.3 模型训练	82
5.2.4 数值试验	84

5.3 井字棋: \mathcal{D}_4 对称性	88
5.3.1 问题描述	88
5.3.2 量子机器学习模型	88
5.3.3 数值实验	90
5.4 结论	92
第六章 弱测量诱导的超振荡量子调控	95
6.1 超振荡量子调控框架	96
6.2 原子运输-平移高斯仪表	96
6.3 量子搜索-旋转量子比特仪表	101
6.4 非理想情况下的鲁棒性	104
6.5 与传统量子绝热捷径的区别	106
6.6 结论	107
第七章 总结与展望	109
7.1 总结	109
7.2 展望	110
参考文献	112
攻读博士学位期间取得的研究成果	129
致 谢	133

第一章 绪论

1.1 引言

量子信息与量子计算标志着科学领域的一场革命性变革，被认为是第二次量子革命的核心。量子信息科学通过利用量子力学的规律，如叠加和纠缠，重新定义了信息的传输、存储和处理方式。其中，量子计算作为引领这场变革的关键驱动力，突破了经典计算的局限，提供了一种全新的计算模型。在量子计算中，量子比特的超位置状态和叠加原理使得计算能够以一种前所未有的方式进行，同时涵盖多个可能性，展现出超越经典计算的潜在威力。第二次量子革命正推动着科技的巨大飞跃，涵盖了从信息科学到物理学的多个领域，为我们理解和利用量子效应提供了新的机遇和挑战。同时，量子控制作为量子信息科学的重要组成部分，旨在精确操控和调节量子系统的状态，以实现特定的量子操作。在量子计算中，这一领域的重要性愈发显著，因为成功的量子计算过程必须依赖于对量子比特的高度控制和操作。量子控制涉及的技术范围广泛，包括优化脉冲序列、实现量子门操作、以及设计适用于量子算法的相干控制策略。通过对量子比特的巧妙操控，我们能够在量子计算中实现更复杂、更强大的计算任务。这使得量子控制成为推动量子计算实现的关键环节。

聚焦于量子控制领域，其中被广泛采用的理论之一是量子绝热演化^[1-3]。该理论要求系统的哈密顿量在外部参数变化时变化缓慢，以确保系统能够在任何时刻以瞬时本征态演化而不发生跃迁。然而，在实际操作中，系统常常与环境发生耦合。由于绝热过程是一种缓慢演化，较长的演化时间可能导致系统受到退相干效应的影响，从而难以实现精准的操控。因此，人们迫切需要寻找能够有效缩短绝热过程的操控方案。为解决这一问题，陈玺教授及其合作者于2010年正式提出了量子绝热捷径^[4-6]这一概念，致力于优化量子系统的演化路径，抑制末时刻的能量激发，以在极短时间内实现类似于绝热演化的结果。在量子计算的物理实现上，这种技术不仅缩短了操作时间，同时保持了系统在量子计算中的准确性和稳定性，以实现更快速的量子门操作，从而推动量子计算的实际应用。具体到本论文更为关心的二能级、三能级系统，量子绝热捷径的有效性被国内外实验团队在加速光晶格^[7]、氮空位色心自旋^[8-9]、

Transmon 量子电路^[10]、超导几何量子门^[11]、Xmon 量子比特^[12-13]、冷原子受激拉曼绝热通道^[14]、自旋链^[15]与稀土离子^[16]中得到了实验验证。量子绝热捷径技术随着近十年的发展，成为一个包含各种量子调控技术的大家族。从最初的基于不变量理论的反向工程^[4,17]与引入额外辅助哈密顿量的反向透热补偿法^[18-20]，发展至快速前驱法^[21]、快速搜索法^[8]、时间缩放动力学^[22]、经典动力方程^[23]、增强捷径^[24]等方案。自然地，我们考虑到将机器学习引入量子绝热捷径的设计，使之成为这一大家庭的新成员，为相干量子调控提供新工具。

本文以此为出发点，系统地介绍了如何使用强化学习算法来设计量子绝热捷径，使之在二能级布居数反转问题中的鲁棒性逼近理论上限，表现超出常见的组合脉冲。这一框架往往将量子态的信息输入神经网络以做出决策，如需将模型训练过程与真实量子系统关联而非仿真模拟，则需要对量子态的观测引起的扰动予以考虑。因此我们将连续弱测量纳入框架，设计了对应的闭环量子调控，验证了在噪声量子比特中的表现与不同噪声特征下模型迁移学习的能力。在对量子弱测量的研究过程中，我们构造了量子信息二分类问题，提出了主动学习方案，用于探索使用弱测量高效提取量子信息的可行性，并寻找了强测量与弱测量在有效信息提取与保真度损失之间的平衡。最终结合近年来对量子调控、量子算法、量子弱测量的认识，提出了连续弱测量诱导的超振荡量子调控方案。

在这一绪论中，我们将简介以上分支中重叠的基础知识，对于各自的背景，将在后续章节中予以详叙。

1.2 量子绝热定理

当我们考虑到量子系统在外部参数变化时的演化过程时，量子绝热定理成为理解这一动力学行为的关键工具。量子绝热定理是量子力学中的基本定理之一，表明如果系统在外部参数的变化足够缓慢，系统将始终保持在瞬时本征态上，从而不会发生跃迁。这一定理在量子计算^[25-28]、几何相位^[29-30]、量子热力学^[31-32]、量子场论^[33]中均有体现。

量子力学由含时薛定谔方程描述

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

其中， $|\psi(t)\rangle$ 刻画了系统在时间 t 的状态， $H(t)$ 是含时哈密顿量， \hbar 是约化普朗克常数。波函数的通解可以被写作

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \exp[i\alpha_n(t)] |n(t)\rangle, \quad (1.2)$$

相位 $\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$ ， $E_n(t)$ 与 $|n(t)\rangle$ 满足本征方程

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle, \quad (1.3)$$

$c_n(t)$ 是 t 时刻瞬时本征态 $|n(t)\rangle$ 的复振幅。以上方程联立，得到

$$\sum_n \exp[i\alpha_n(t)] [\dot{\alpha}_n |n(t)\rangle + \alpha_n(t) |\dot{n}(t)\rangle] = 0. \quad (1.4)$$

与第 m 本征态左矢 $\langle m(t)|$ 内积，与两侧求导的本征方程联立，我们得到与跃迁有关 $c_n(t)$ 的微分方程

$$\dot{c}_m(t) = -c_m \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle - \sum_n c_n(t) \exp[i(\theta_n - \theta_m)] \frac{\langle m(t) | \dot{H}(t) | n(t) \rangle}{E_n - E_m}. \quad (1.5)$$

由第二项的贡献可见，随着时间演化，瞬时本征态之间会发生跃迁。如果系统哈密顿量含时变化足够慢，满足

$$\langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle = \frac{\langle m(t) | \dot{H}(t) | n(t) \rangle}{E_n - E_m} \ll \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle \quad (1.6)$$

则可将这一项忽略。我们即得到了量子绝热条件的一种表述形式。

1.3 量子弱测量

同量子绝热定理一样，量子测量也是量子基础理论中的一个重要概念。在介绍 Aharonov-Albert-Vaidman 形式的弱测量^[34]前，我们先回顾通常的量子测量是被怎么描述的。Von Neumann 对于一个量子测量过程提出了以下演化纠缠过程

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \rightarrow \sum_n c_n |\psi_n\rangle |\phi_n\rangle. \quad (1.7)$$

在测量之前，被测量子系统 $|\psi\rangle$ 与用于测量的仪表 $|\phi\rangle$ 总体构成一个可分的直积态，通过相互作用演化后得到一个纠缠态。此时对仪表读取数值，以 $|c_n|^2$ 的概率得到一

个本征态 $|\phi_n\rangle$, 那么系统也因纠缠而固定至本征态 $|\psi_n\rangle$ 上。在测量之后, 其他支的上的振幅全部消失, 是为量子力学哥本哈根诠释中的塌缩。人们考虑到能否通过测量从量子系统中提取信息而不引起塌缩或者扰动, 然而这在数学上被证明是不可能的^[35]。

从 Von Neumann 范式出发, 上世纪 80 年代末期 Yakir Aharonov 及其和合作者提出了量子弱测量的概念与实现方案。算子的弱值被定义为

$$A_w = \frac{\langle f | \hat{A} | i \rangle}{\langle f | i \rangle}, \quad (1.8)$$

$|i\rangle$ 与 $|f\rangle$ 分别对应被测量系统的前选择与后选择, 被视作对于期望值的推广。从历史的角度来看, 弱值缘起于 60 年代 Aharonov 为构造量子测量中时间对称而提出的双态矢理论 (Two-state vector formalism)^[36-37], 可以被描述为制备一个前选择态 $|i\rangle$, 弱测量算子 \hat{A} , 投影被扰动后的量子系统到后选择态 $|f\rangle$ 上。这一过程可以通过 Von Neumann 范式相互作用进行描述。我们考虑将系统与一个高斯探针的动量算子进行耦合

$$H = g\hat{A} \otimes \hat{p},$$

那么整个前选择、弱耦合、后选择的过程在探针上如下记录了弱值

$$\begin{aligned} & (|f\rangle\langle f|)(e^{-ig\hat{A}\otimes\hat{p}t})(|i\rangle\otimes|\phi(x)\rangle) \\ & \approx (|f\rangle\langle f|)(1 - igt\hat{A}\otimes\hat{p})(|i\rangle\otimes|\phi(x)\rangle) \\ & = |f\rangle\otimes\langle f|i\rangle(1 - igtA_w\hat{p})|\phi(x)\rangle \\ & \approx |f\rangle\otimes\langle f|i\rangle(e^{-igtA_w\hat{p}})|\phi(x)\rangle \\ & = (\langle f|i\rangle)|f\rangle\otimes|\phi(x - gTA_w)\rangle. \end{aligned} \quad (1.9)$$

注意到这里因为耦合强度 gT 足够小, 使得弱测量条件被满足, 可视作一阶泰勒展开, 使得一个平移算子被作用在探针上, 使得高斯波函数在空间上平移了 gTA_w 的距离。同时, 我们假定了 A_w 通过前后选择的设计是一个实数, 对于复数情况会导致非幺正算符被作用到探针上。系统此时处于我们选择的末态而非塌缩到本征态上, 但这一测量并非没有代价, 相反, 后选择的成功率为 $P = |\langle f|i\rangle|^2 < 1$, 而且极大的

弱值会导致前选择后选择态几乎正交，选择成功率接近于 0。事实上，AAV 形式并不是实现弱测量的唯一途径，本论文后续章节中也涉及其他不需要后选择的弱测量方案。但如果目标是在仪表上积累弱值，那么 AAV 形式是不可或缺的。

1.4 论文结构安排

本文正文各个章节中分别提出并实现了一个机器学习技术在量子控制、量子信息领域的应用，并与来自物理学中的量子绝热捷径技术、弱测量、群论相结合。

第二章中，以量子控制中的绝热捷径技术出发，在二能级系统中研究了具有鲁棒性，显著提高抵抗系统误差的解析方案，并以此为起点，作为已有知识以及理论上限，纳入深度强化学习框架，检验深度强化学习探索鲁棒量子控制的表现。在验证方案的有效性后，在没有解析解作为先验知识的情况下，使用深度强化学习研究了混合系统误差下的高性能鲁棒量子控制，并在与实验团队的合作中得到验证，在实验室量子噪声环境下显示出相对已有组合脉冲方案的优越性。

第三章中，在含量子噪声的开放量子系统中的深度强化学习成功的基础上，将这一形式推广到闭环量子控制。在这一框架下，我们结合了量子基础中著名的弱测量理论，通过连续弱测量理论实时得到低信噪比的弱值并提供给深度强化学习模型，刻画系统瞬时状态并对系统造成扰动。通过经训练的深度强化学习模型输出的决策实时操控系统。在实现了有效的高保真度量子控制的前提下，我们实时检测到因噪声特性变化造成的保真度降低，并可通过迁移学习少量训练完成对模型的校准，体现了少样本学习的特性。

第四章中，鉴于之前弱测量的运用与少样本学习的实现，审视了少样本学习的另一种途径，即主动学习。主动学习被用于根据模型预测，选择潜在含有最多信息的样本进行测量并标签，以更少的有标签样本完成监督学习任务，降低机器学习中过高的成本。我们以主动学习与量子信息分类问题为工具，将标签的代价映射到弱测量造成的系统保真度损失，从而研究了测量强度与信息有效提取效率之间的权衡。此外，这一框架被运用到其他物理学中标签代价高昂的问题中，如计算物理中模拟多体系统获得性质，并在几何阻挫模型相界预测任务中得到验证。

第五章中，在完成了主动学习处理量子信息的前期工作后，提出了量子主动学

习的概念，用于实现量子机器学习模型的高效训练，用于处理作为实验输出的量子数据或加载到量子计算线路中的经典数据。同时，考虑到主动学习是算法层面的，我们在网络架构层面上可以进一步优化实现更优性能的少样本学习。我们将数据中的对称性纳入架构设计，以降低模型表示性为代价，换取了更易于训练的特性与更高的准确度，并在两类具有不同对称性的数据集上得到了验证。

第六章中，鉴于之前工作对弱测量、量子控制、量子信息的长期探索，认识到可以将弱测量以一种非传统方式纳入量子控制、量子算法的设计中。区别于基于弱测量的结果操控系统与处理信息，我们通过对系统上人工设计的连续前后选择，在探针上实现弱值的积累，诱导出超振荡形式的算子，提出了被称为“超振荡量子控制”的新方案。这类方案可快速鲁棒地完成量子控制、执行量子算法，并在离子阱模型中被提出了具体实现的实验方案。

第七章中，我们总结了全文工作，并对除罗列在各个章节末尾以外的一些未来短期内可研究内容提出了展望。

第二章 强化学习量子绝热捷径

几十年来，量子控制一直关注在原子和分子尺度上对物理和化学过程进行有效操控，其应用领域涵盖从光学到量子信息科学等众多领域^[38-39]。具体而言，在基于超导量子位和离子阱的物理平台上实现具有外部可控参数的快速且鲁棒的量子比特门操作是实现通用容错量子计算的关键所在^[40]。例如，量子纠错已经得到发展，以减少来自环境和控制参数本身的噪声或缺陷，从而在含噪声中等尺度量子（NISQ）时代下基于量子门的计算机应用中实现^[41-43]。

两能级系统，以下简称量子比特系统，是数字量子计算的基本单元。因此，许多研究致力于使用外部场对量子比特进行精确的量子控制，涌现出了多种方法。这些方法包括共振脉冲^[44]、绝热过程^[2]、组合脉冲^[45-48]、脉冲形状工程^[49-51]及其他进一步优化技术^[39,52-57]。在这些框架中，量子绝热捷径技术 (STA)^[4-6] 共享一种打破绝热过程的概念，它通过结合共振脉冲和绝热过程的优点，实现了快速的非绝热演化。具体而言，作为 STA 技术之一的逆向工程被应用于设计超绝热演化沿着动力学模式，这些模式源于 Lewis-Riesenfeld 不变量^[58]，并带有适当的边界条件。因此，逆向工程中留下的自由度进一步允许通过结合最优控制理论^[59-60]、动力学解耦^[61]、监督机器学习^[62-63]等方法，抑制不可避免的系统误差，如振幅噪声和退相干噪声。

同时，随着深度学习在许多领域的发展^[64-67]，深度神经网络和深度强化学习 (DRL) 已经在物理学的不同应用中得到应用^[68-74]。DRL 被用作搜索快速且鲁棒的量子态制备的最优控制脉冲的一种有前途的方法^[75-77]，并可用于量子门操作^[78]与量子 Szilard 引擎^[79]。更具体地说，DRL 提升了强化学习的表现，后者是广泛应用于控制任务的经典机器学习的一个关键分支；这种增强来自于在强化学习的关键方面，即拟合策略函数上使用深度神经网络。最近的研究已经探讨了将 DRL 应用于量子控制^[80-87]。因此，我们发现将 DRL 与 STA 进行比较是有意义的，以更好地理解两者。我们相信这项研究将为操控超导 Transmon 量子比特^[88]、玻色爱因斯坦凝聚体^[7]和量子点^[89]等领域的应用提供更为可行的方案。在这些系统中其中控制误差、随机噪声和实验约束具有重要意义。

为此，我们在本章节通过结合 STA 和 DRL 方法，探索量子比特操作的快速且鲁棒的量子控制。严格来说，我们专注于量子比特的单分量控制，类似于二能级 Landau-Zener (LZ) 问题^[7,88-89]，采用设计的时间与拉比频率相关。我们展示了第一个显著的结果：STA 的平滑脉冲通过明确的量子速度极限 (QSL) 进行了分析设计，并在考虑各种噪声、缺陷和物理约束时进行了进一步的优化，尤其是在实验中灵活性不足的情况下。更重要的是，我们通过与 STA 的连接来验证 DRL 的量子控制。我们发现，DRL 智能体 (Agent) 探索了相同任务的数字捷径，产生了类似的鲁棒特性，当 STA 的操作时间被用作提示时。作为扩展，我们训练了 Agent，即负责采取控制行动的 DRL 部分，而没有来自 STA 的任何输入，以通过抑制各种系统误差实现高效的量子控制。在我们的数值模拟中，我们进一步观察到 Agent 能够以满足要求的特性实现高效的量子控制。最后，我们在与实验团队的离子阱实验中验证了理论的有效性，并与常见的组合脉冲在开放量子系统中进行了比较。我们认为，通过在具有量子噪声的交互式 DRL 环境中进行微调，可以提高该框架的性能，从而在 NISQ 系统中有潜在的应用。

2.1 理论推导

2.1.1 反向工程设计量子绝热捷径

考虑对单比特进行相干操作，其哈密顿量表示为

$$H(t) = \frac{\hbar}{2}[\Omega\sigma_x + \Delta(t)\sigma_z], \quad (2.1)$$

其中拉比频率 Ω 是固定的，而失谐 $\Delta(t)$ 是时间变化的。方程 (2.1) 出现在例如 Xmon 超导量子比特、加速光学晶格中的二态理论下的玻色爱因斯坦凝聚体调控和量子点电荷比特中。根据 Lewis-Riesenfeld 理论，可以构造一个动力学不变量

$$I(t) = \frac{\hbar}{2}\Omega_0 \sum_{\pm} |\phi_{\pm}(t)\rangle\langle\phi_{\pm}(t)|,$$

其中其本征态为

$$|\phi_{+}(t)\rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\beta}{2}}, \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\beta}{2}} \right)^T,$$

和

$$|\phi_-(t)\rangle = \left(\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\beta}{2}}, -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\beta}{2}} \right)^T,$$

Ω_0 是一个任意的常数频率，使得 $I(t)$ 的单位为能量。这里，时间依赖的角度 $\theta \equiv \theta(t)$ 和 $\beta \equiv \beta(t)$ 参数化了演化状态在布洛赫球上的轨迹。含时的薛定谔方程的解由 $|\phi_{\pm}(t)\rangle$ 的叠加描述。更具体地说，应写作

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\pm} c_{\pm} \exp(i\gamma_{\pm}) |\phi_{\pm}(t)\rangle,$$

其中 c_n 是常数，而 LR 相位 γ_{\pm} 计算为

$$\gamma_{\pm}(t) = \pm \frac{1}{2} \int_0^t \left(\frac{\dot{\theta} \cot \beta}{\sin \theta} \right) dt'. \quad (2.2)$$

条件 $dI(t)/dt \equiv \partial I(t)/\partial t + (1/\hbar)[I(t), H(t)] = 0$ 得到以下辅助方程组

$$\dot{\theta} = -\Omega \sin \beta, \quad (2.3)$$

$$\dot{\beta} = -\Omega \cot \theta \cos \beta + \Delta(t), \quad (2.4)$$

这使得期望态可以沿着动力学模式 $|\phi_{\pm}(t)\rangle$ 演化。在先前的研究中，STA 控制框架允许在约束条件下通过两个可调参数，即拉比频率 Ω 和失谐 Δ ，优化错误和噪声。这两个参数满足方程 (2.3) 和 (2.4)。然而，在某些量子平台上，无法同时调节 Ω 和 Δ 。例如，在超导 Xmon、Transmon 量子比特中，更倾向于控制失谐。

为了适应这些要求，我们将应用逆向工程方法来设计角度参数 θ ，以调整时间相关的失谐 $\Delta(t)$ 。因此，我们将方程 (2.4) 及其导数代入方程 (2.4)，得到以下表达式：

$$\Delta(t) = -\frac{\ddot{\theta}}{\Omega \sqrt{1 - \left(\frac{\dot{\theta}}{\Omega}\right)^2}} + \Omega \cot \theta \sqrt{1 - \left(\frac{\dot{\theta}}{\Omega}\right)^2}. \quad (2.5)$$

其中 Ω 是常数拉比频率。这使我们能够在有限的短时间 T 内沿着一个动力学模式 $|\phi_+(t)\rangle$ 驱动动态演化，受 QSL 限制。首先，我们设置以下边界条件

$$\theta(0) = 0, \quad \theta(T) = \pi. \quad (2.6)$$

这些确定了从 $|0\rangle$ 翻转到 $|1\rangle$ 的量子比特翻转。其次，该方案可以被优化以取消系统误差，如实验场景中不可避免的环境波动和对控制参数的偏离。为此，我们考虑拉比频率和失谐度的误差，即 $\Omega \rightarrow \Omega(1 + \delta_\Omega)$ 和 $\Delta(t) \rightarrow \Delta(t) + \delta_\Delta$ ，并在含时微扰理论的一阶项中写下转移概率

$$P = \frac{\hbar^2}{4} \left| \int_0^T \langle \Psi_-(t) | (\delta_\Omega \Omega \sigma_x + \delta_\Delta \sigma_z) | \Psi_+(t) \rangle \right|^2, \quad (2.7)$$

其中 $|\Psi_\pm(t)\rangle = e^{i\gamma_\pm(t)} |\phi_\pm(t)\rangle$ 是不变量的两个正交动力学模式。将方程 (2.3) 和 (2.4) 代入方程 (2.7)，我们得到了以下误差抵消的条件

$$\left| \int_0^T dt e^{i\eta(t)} \left(\delta_\Delta \sin \theta - i 2 \delta_\Omega \dot{\theta} \sin^2 \theta \right) \right| = 0, \quad (2.8)$$

其中 $\eta(t) = 2\gamma_+(t)$ ，通过与方程 (2.2) 结合得到 $\dot{\eta} = \dot{\theta} \cot \beta / \sin \theta$ 。积分 (2.8) 中的全局相位 $\eta(t) = 2\gamma_+(t)$ 可以展开为

$$\eta(t) = 2\theta + \alpha_1 \sin(2\theta) + \alpha_2 \sin(4\theta) + \dots + \alpha_n \sin(2n\theta), \quad (2.9)$$

从而我们得到 $\sin \beta = -1/\sqrt{1 + 4M^2 \sin^2 \theta}$ ，其中 $M = 1 + \sum_n n \alpha_n \cos(2n\theta)$ 。因此，通过求解带有给定系数 α_n 和初始条件 $\theta(0) = 0$ 的方程 (2.3)，可以得到相应的 θ ，其演化到 $\theta(T) = \pi$ ，其中 T 受到 QSL 时间的限制

$$\Omega T = \int_0^\pi d\theta \sqrt{1 + 4M^2 \sin^2 \theta} \geq \pi. \quad (2.10)$$

这个方案允许在脉冲工程中使用任意级数系数进行鲁棒的量子比特翻转，从 $|0\rangle$ 翻转到 $|1\rangle$ 。原则上，通过在方程 (2.9) 中引入自由参数 α_n ，可以将上述积分 (2.8) 化为零，从而可以同时抑制 σ_x 和 σ_z 项中的误差。为简单起见，这里我们可以设置 $\delta_\Omega = 0$ 或 $\delta_\Delta = 0$ ，以独立讨论每个误差源，而不预设误差振幅的比率。我们发现，通过仅对 $\eta(t)$ 进行一阶展开，可以消除 Ω -误差和 Δ -误差，分别得到 $\alpha_1 = -1$ 和 $\alpha_1 = -1.74$ 。

虽然在前述框架内可以实现鲁棒的量子控制，但我们注意到很难预测失谐脉冲形状及其可调范围。例如，针对 Δ -误差的失谐具有超过 3Ω 的最大振幅，并且在操作的边缘发生突变。为了更可行的实现，我们更喜欢具有失谐 $\Delta(t)$ 不发生剧烈振荡

的平滑控制。因此，我们提出以下对于 θ 的拟设 (*Ansatz*)

$$\theta(t) = \frac{\Omega T}{a} \left[as - \frac{\pi^2}{2}(1-s)^2 + \frac{\pi^2}{3}(1-s)^3 + \cos(\pi s) + A \right], \quad (2.11)$$

其中 $s = t/T$, $A = \pi^2/6 - 1$, $T = -\pi a/[(2-a-\pi^2/6)\Omega]$ 是通过使用边界条件 (2.6) 找到的，而 $a > 2 - \pi^2/6$ 是一个自由参数。这个拟设导致了一个在操作时间内几乎线性增长的失谐 $\Delta(t)$ ，类似于原始的 LZ 方案，但在 $t = 0$ 和 $t = T$ 处有有限的值（见图 2.1）。因此，该方案为针对 Δ -和 Ω -误差进行强大的量子比特翻转要求了 $a = 0.604$ 和 0.728 ，相应地得到了操作时间 $T = 60.6$ ns 和 $T = 48.8$ ns，与超导 Xmon 超导量子比特的特征门时间量级相同。

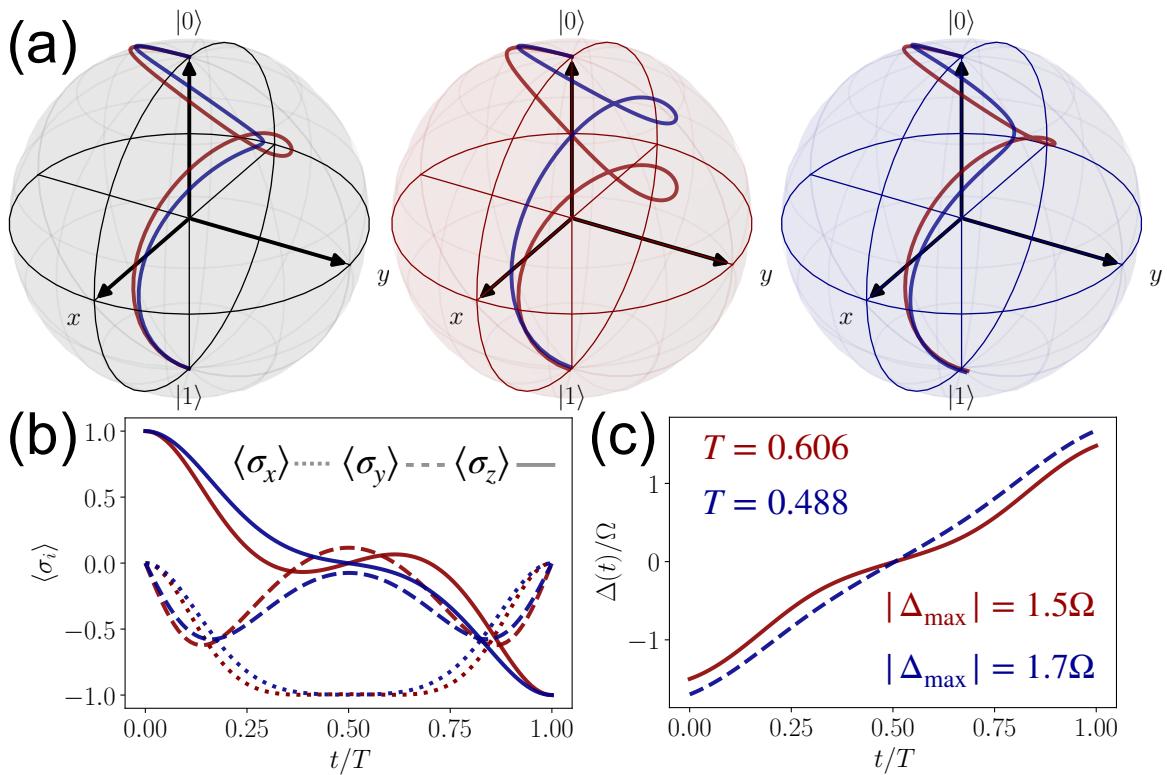


图 2.1 (a) 在布洛赫球上的量子比特的 STA，其中使用 $\theta(t)$ (2.11) 的 *Ansatz* 从方程(2.5)设计出连续的 LZ 类型脉冲。通过数值模拟在 $\delta_\Delta = \pm 0.1\Delta_{\max}$ (红色和蓝色曲线在红色球上) 和 $\delta_\Omega = \pm 0.1$ (红色和蓝色曲线在蓝色球上) 的振幅下，证明了在 Δ - 和 Ω -误差下分别翻转了量子比特，其中 $a = 0.604$ (红色曲线) 和 0.728 (蓝色曲线)。没有任何误差的量子比特 (灰色球) 被从 $|0\rangle$ 翻转到 $|1\rangle$ 。(b) 在灰色球上的轨迹相应地演变，通过最小化 Δ -误差 (红色曲线) 或 Ω -误差 (蓝色曲线)。我们固定拉比频率 $\Omega = 20 \times 2\pi$ MHz，得到了在取消之前误差的 STA 方案中的操作时间 $T = 60.6$ ns 和 $T = 48.8$ ns。(c) 同样显示了相应的平滑脉冲。

我们也可以考虑在不做拟设的情况下直接求解级数。对 $\eta(t)$ 两边取一阶导数，并

结合方程 (2.2), 我们得到

$$\dot{\eta} = \dot{\theta} \cot \beta / \sin \theta, \quad (2.12)$$

其中

$$\sin \beta = -\frac{1}{\sqrt{1 + 4M^2 \sin^2 \theta}}, \quad (2.13)$$

其中 $M = 1 + \sum_n \alpha_n \cos(2n\theta)$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)。因此, 对方程 (2.3) 进行积分, 我们再次获得了量子速度极限表达式 (2.10)。其中 π 是共振 π 脉冲给出的下限。通过这种方式, 我们解方程 (2.3), 初始条件为 $\theta(0) = 0$

$$\dot{\theta} = \frac{\Omega}{\sqrt{1 + 4M^2 \sin^2 \theta}}, \quad (2.14)$$

确保 $\theta(T) = \pi$ 以满足量子速度极限。 θ 的演化和操作时间 T 仅由级数系数 α_n 确定, 这些系数经过数值优化以最小化误差抵消条件, 以抑制 Δ/Ω -误差或两者同时抑制。通过变换方程 (2.13), 我们得到 β 的以下表达式

$$\beta = -\operatorname{arccot}(2M \sin \theta), \quad (2.15)$$

其导数为

$$\dot{\beta} = \frac{-4\dot{\theta} \sin \theta [\sum_n n^2 \alpha_n \sin(2n\theta)] + 2M\dot{\theta} \cos \theta}{1 + 4M^2 \sin^2 \theta}. \quad (2.16)$$

通过将方程 (2.16) 和 (2.13) 代入方程 (2.4), 我们计算失谐脉冲的表达式:

$$\Delta(t) = \frac{-4\dot{\theta} \sin \theta [\sum_n n^2 \alpha_n \sin(2n\theta)] + 2M\dot{\theta} \cos \theta}{1 + 4M^2 \sin^2 \theta} + \frac{2M\Omega}{\sqrt{1 + 4M^2 \sin^2 \theta}}. \quad (2.17)$$

正如我们在提到的, 可以获得针对各个系统误差的鲁棒量子控制, 例如, $\alpha_1 = -1.74$ 用于 Δ -误差, $\alpha_1 = -1$ 用于 Ω -误差, 但对前者会脉冲产生剧烈的波动, 最大振幅超出 3Ω , 因此我们舍弃了这种方案而采用了拟设下的类 Laudau-Zener 调控作为后续深度学习标定的上界。

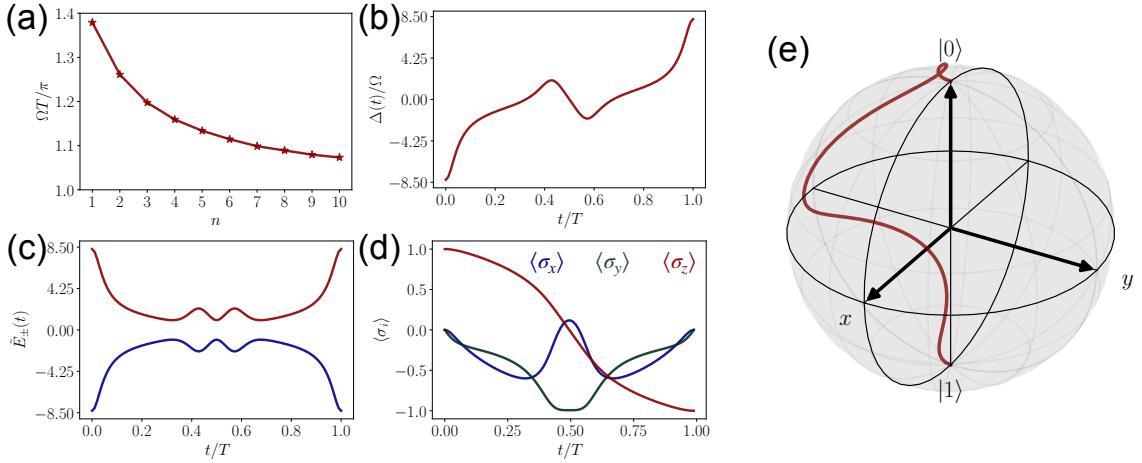


图 2.2 (a) QSL 时间与 n 的关系。(b) 在 $\alpha_1 = 1.06$ 时, 通过一阶展开最小化 QSL, $T = 34.5$ ns, 对应 $n = 1$ 。(c) 能量的无量纲瞬时本征值, 由 $\tilde{E}_{\pm}(t) = \pm\sqrt{\Omega^2 + \Delta(t)^2}/\Omega$ 定义。(d) 不同方向上的期望值随演化时间的变化。(e) 在布洛赫球上的量子态演化。

2.1.2 量子速度极限与梯度脉冲优化

现在我们将重点放在具有 Landau-Zener 方案的两能级比特系统的最优时间控制和 QSL 上。一般来说, 在无约束情况下, 最快的方案是 bang-off-bang 脉冲, 当 Δ_{\max} 足够大时, 即

$$\Delta(t) = \begin{cases} -\Delta_{\max}, & t = 0 \\ 0, & 0 < t < T \\ \Delta_{\max}, & t = T \end{cases}, \quad (2.18)$$

这样 QSL 可以在文献^[54] 中找到:

$$\Omega T_{QSL} = \arccos(|f_0 i_0| + |f_1 i_1|) \geq \pi, \quad (2.19)$$

其中初始和最终状态分别为 $|\Psi(0)\rangle = i_0|0\rangle + i_1|1\rangle$ 和 $|\Psi(T)\rangle = f_0|0\rangle + f_1|1\rangle$, 从而得到理想比特翻转的 $T_{QSL} = \pi/\Omega$ 。然而, 由于脉冲突变, 使得实验实施变得困难或不可行。在这里, 我们研究了受 QSL 时间限制的最短时间, 以及全局相位 $\eta(t)$ 的不同阶数展开。我们注意到 QSL 的最小值随着 n 的增长而收敛到 π , 如下所示: (1, 4.33), (2, 3.96), (3, 3.76), (4, 3.64), (5, 3.56), (6, 3.5), (7, 3.45), (8, 3.42), (9, 3.39), (10, 3.37)..., 其中我们在图 2.2 中展示了最优时间控制。在这里, 所需的调谐范围远大于抵消误差敏感性的范围, 这说明了 STA 优化的成本以及时间和鲁棒性之间的权衡。

此外, 我们还实施了被认为是设计数字脉冲的最先进的算法的 Gradient Ascent

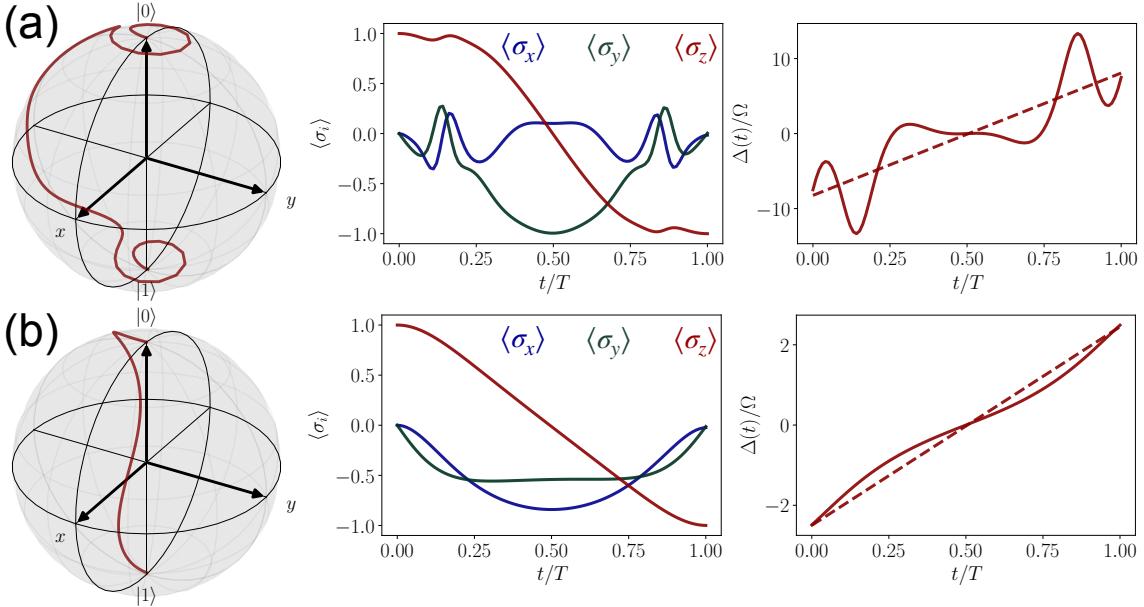


图 2.3 由 GRAPE 找到的 LZ 方案的时间最优解，其中初始 $|\Delta|_{\max} =$ (a) 8.24 (在公式 (??) 中当 $n = 1$ 时的最大失谐)，以及 (b) 2.5，我们注意到 GRAPE 的结果是不可预测的，对初始化非常敏感。

Pulse Engineering (GRAPE) 算法。GRAPE 提出了量子控制问题的表达式：

$$H(t) = H_d + \sum_{j=1}^M u_j(t) H_j, \quad (2.20)$$

其中 H_d 是驱动哈密顿量， H_j 是控制哈密顿量。该算法通过 M 个数字脉冲将量子系统驱动到目标状态，其中振幅由 $u_j(t)$ 表示。么正算符表示为

$$U(T, 0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^T H(t) dt \right], \quad (2.21)$$

它被离散化为 $U(T, 0) = \prod_{k=1}^M U(t_k)$ ，其中 $U(t_k) = \exp \left[-i \Delta t \frac{H(t_k)}{\hbar} \right]$ ，演化系统的时间步长为 $\Delta t = T/M$ 。振幅由 M 维向量 $|u_r\rangle$ 表示，通过学习率为 ϵ 的对保真度 F 的梯度更新

$$|u_{r+1}\rangle = |u_r\rangle + \epsilon \mathcal{H}^{-1} |\nabla f_r\rangle, \quad (2.22)$$

其中 \mathcal{H} 是 Hessian 矩阵。由于计算 Hessian 矩阵的逆矩阵非常耗时，这种范式可以进行近似。在实践中，我们通过线性初始化每个脉冲的振幅，使用 LZ 类型方案设计脉冲。然而，我们发现 GRAPE 对于脉冲的初始配置非常敏感，类似于其他梯度算法（见图 2.3）。因而，我们考虑强化学习方法，从而获得更平缓的脉冲以便实验实施。

2.1.3 深度强化学习框架

尽管 STA 已经实现了快速而鲁棒的控制，我们考虑对于更加复杂的情况采用其他数值方法，例如，如果我们只允许在固定时间内用给定数量 N 的失谐脉冲来驱动量子态。这个任务实际上是组合优化问题（即通过离散脉冲的最佳配置来最大化鲁棒性），等价于动态规划，也就是多步决策问题。尽管动态规划的复杂度随步数的增加呈指数级增长，但我们仍然可以通过一些方法进行近似解，比如使用人工神经网络（ANN）方法，这自然而然地引出了 DRL 的概念。实际上，当提到 DRL 时，有两种主要的方法。第一种是利用深度学习来近似动态规划的解。第二种方法涉及所谓的深度策略网络，即同时测试许多不同的控制系统的能力。我们集中在前一种方法上。在这个框架中，DRL 的假设是，存在一个最优策略 π ，为系统中的任何可观测状态 $\mathbf{s}(t_i)$ 提供一个动作 $\mathbf{a}(t_i)$ 来完成某个任务。这种状态-动作关系可以用一个函数 $\pi(\mathbf{a}|\mathbf{s})$ 来描述，该函数可以由深度 ANN 来近似。状态 $\mathbf{s}(t_i)$ 被编码为输入变量，取值范围在零到一之间，由 Agent 观察。在 ANN 节点的层之间传播和非线性激活之后，输出层给出一个动作 $\mathbf{a}(t_i)$ ，将系统演化到下一个状态 $\mathbf{s}(t_{i+1})$ 在一个时间步内。

一个环境由这些方程组成，这些方程描述了系统的演化，并奖励 Agent。优化器根据奖励调整 ANN 的参数，从而训练出一个良好的 Agent，为完成任务提供优化的动作。因此，我们注意到从 STA 中逆向工程的概念，即通过辅助方程选择一个拟设来获得脉冲，与 DRL 相似。需要设计一个奖励函数 $r(\mathbf{s}, t_i)$ 来教育 Agent。一个适当的奖励函数可以加速 DRL 算法的收敛，防止 Agent 陷入平凡解或通过重复动作作弊。

在我们的 DRL 实践中，我们对可调谐失谐范围 $[-\Delta_{\max}, \Delta_{\max}]$ 进行重新标定，映射到 $\tilde{\Delta} \in [0, 1]$ ，这是在时间步 t_i 的编码动作： $\tilde{\Delta}(t_i) = (\Delta(t_i) + \Delta_{\max})/2\Delta_{\max}$ 。状态由密度矩阵元素 $|\rho_{22}(t_i)|$ 、重新标定的失谐 $\tilde{\Delta}(t_{i-1})$ （作为上一个时间步的动作），以及当前系统时间 i/N 组成。在此，我们使用 Liouville-von Neumann 方程而不是薛定谔方程，以便进一步推广到涉及量子噪声的 Lindblad 主方程。

Agent 的训练策略如图 2.4(a) 所示。我们发现，DRLAgent 通过近似最大化人工奖励的策略收敛到（次）最优解。这使得 DRL 能够探索各种类型的量子控制，需要适当的任务奖励函数。例如，我们发现 Proximal Policy Optimization (PPO) 可以快速学习时间最优解，即谐振平的 π 脉冲，使用简单的奖励函数 $r(t_i) = |\rho_{22}(t_i)| - 1$ 。然

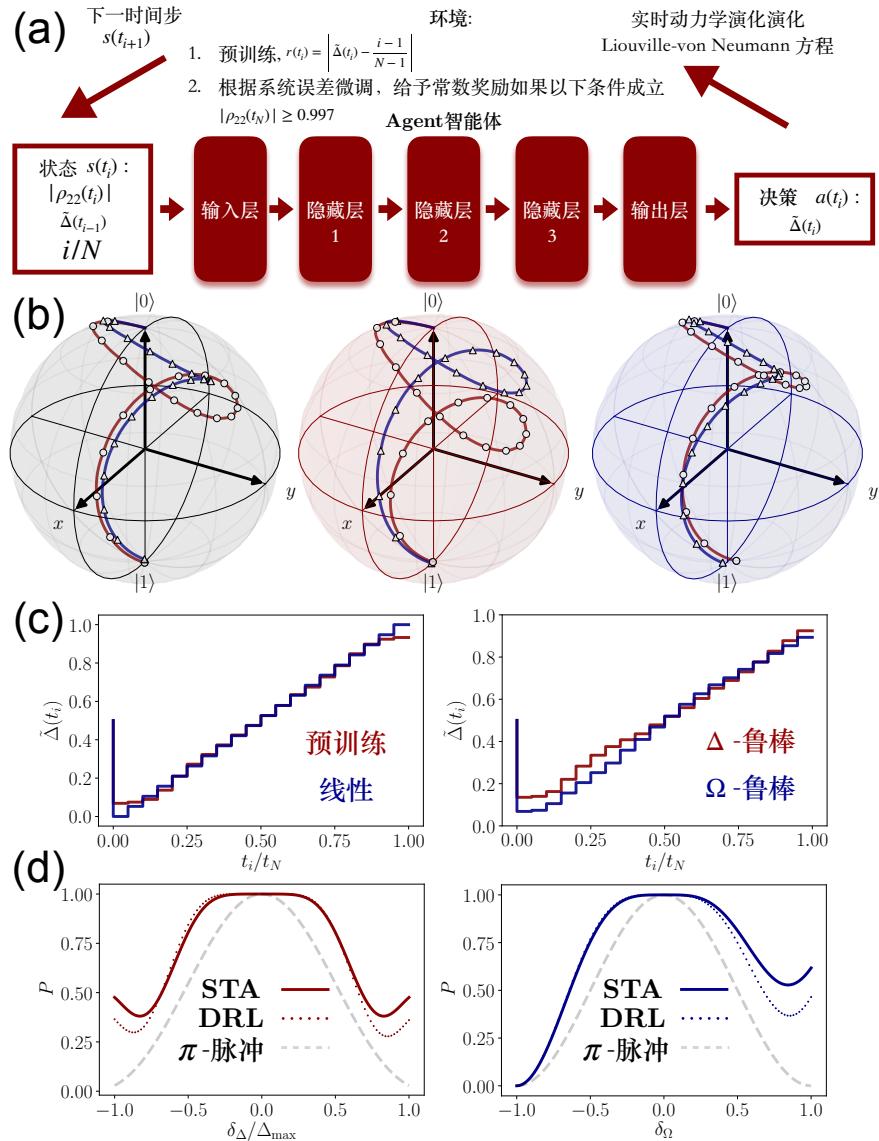


图 2.4 (a) DRL 方法在 LZ 方案下进行量子控制的方案, 用于训练的一个时间步骤。一个有三个隐藏层的人工神经网络智能体 (Agent) 观察一个状态, 该状态编码了量子比特的物理信息。输出一个动作, 演化系统一时间步, 导致系统进入下一个时间步的状态。环境通过人工设计的奖励函数对 Agent 进行奖励或惩罚, 使 Agent 通过这些奖励的积累来学习。(b) 在 20 个时间步内由 DRL 产生的数字脉冲驱动的量子比特在布洛赫球上的状态演变, 参数与图 2.1 中的相同。(c) 在 LZ 类型的控制下进行预训练后的失谐脉冲, 然后根据系统误差和布居数进行微调。与图 2.1(c) 类似, Δ_{\max} 分别设置为 1.5Ω 和 1.7Ω 以用于 Δ/Ω 误差。(d) 状态 $|1\rangle$ 的最终布居数与相对系统误差的关系。STA 设计的方案和 DRL 获得的方案对于系统误差都表现出相似的鲁棒性, 与共振平坦的 π 脉冲作为时间最优解相比。

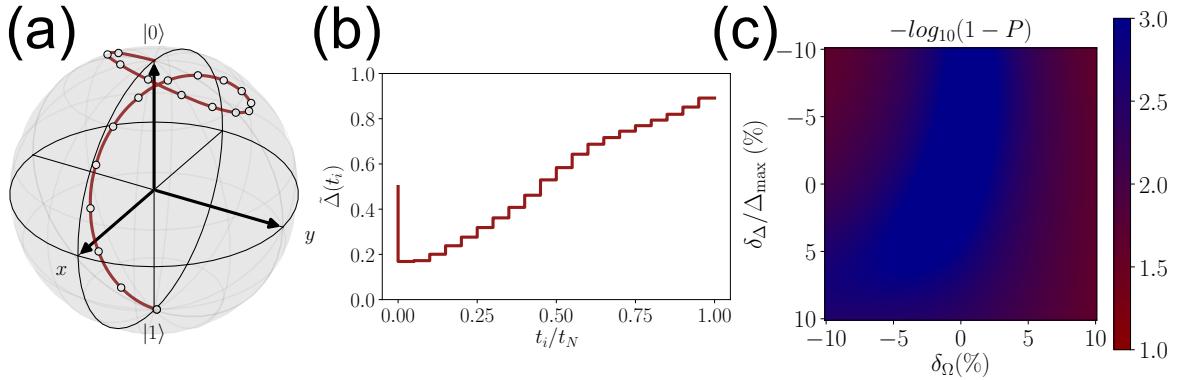


图 2.5 (a) 在理想系统中任意时间 $t_N = 55$ ns 的状态演变。 (b) DRL 给出的数字脉冲， Δ_{\max} 被选择为 1.6Ω ，没有使用 STA 的知识。 (c) 在 Ω - 和 Δ - 误差下的布居数偏差。

而，对于 LZ 类型的控制，我们对 Agent 进行预训练，使用 $r(t_i) = -|\tilde{\Delta}(t_i) - \frac{i-1}{N-1}|$ ，奖励失谐的线性增长。预训练可以过滤其他策略并加速收敛。之后，我们通过对一个常数奖励 Agent 进行微调，微调过程中引入了由高斯分布特征的随机系统误差，如果在最后一个时间步 $|\rho_{22}| > 0.997$ 。

我们首先研究 Agent 是否学习到了类似 STA 的数字量子控制 [见图 2.1(c)]，操作时间 $T = 60.6$ ns，由 20 个脉冲平均分割为 48.8 ns。STA 计算得到的控制消除了误差传递，这限制了鲁棒性的上限。因此，可以轻松地将 DRL 的性能进行基准测试。我们发现 Agent 通过数字脉冲成功翻转了量子比特，抵御了系统误差 [见图 2.4(b) 和 (c)]，这不是粗粒化的模拟控制。

在图 2.4(d) 中，我们比较了 STA、DRL 和共振平的 π 脉冲对 Δ/Ω 误差的鲁棒性。Agent 发现了与 STA 相似的数字量子控制特性，这对于接近鲁棒性的理论极限非常令人满意。受到这一初步结果的启发，我们进一步利用 DRL 来寻找对 Ω - 和 Δ - 误差都鲁棒的数字控制。在这种情况下，DRL 更为直接，因为即使有更多的自由参数，从 STA 的逆向工程也不能完美地发挥作用，这依赖于 δ_Δ 和 δ_Ω 的某一比例。通过相同的训练策略，我们教育 Agent 对抗两种类型的误差，如图 2.5 所示。值得一提的是，我们设置了操作时间和可调失谐范围，没有从 STA 中获取任何信息。Agent 学习到了目标，导致在 $\delta_\Delta / \Delta_{\max}, \delta_\Omega \in [-0.1, 0.1]$ 范围内的布居数超过 0.99。

2.1.4 模型训练细节

在我们的实践中，我们构建了一个由三个隐藏层组成的人工神经网络，每个隐藏层有 32 个神经元，激活函数为 ReLU。输入层只有三个神经元，分别表示时间步

t_i 的密度矩阵元素 $|\rho_{22}(t_i)|$ 、上一时间步的重新标定失谐 $\tilde{\Delta}(t_{i-1})$ ，以及当前系统时间 i/N 。ANN 的输出是在时间步 i 的重新标定失谐 $\tilde{\Delta}(t_i) = (\Delta(t_i) + \Delta_{\max})/2\Delta_{\max}$ ，假设失谐在 $[-\Delta_{\max}, \Delta_{\max}]$ 之间可调。我们注意到引入当前系统时间到 ANN 中加速了学习过程，因为 Agent 需要知道系统在任务中已经演化了多长时间，以便在固定的持续时间内决定下一个时间步的动作。

我们选择 PPO 作为我们的 DRL 方法，因为它在性能上几乎是当前最先进的算法。例如，Trust Region Policy Optimization (TRPO) 在连续控制问题中表现良好，对超参数具有鲁棒性。然而，它需要更大的采样批量，对于采样而言更为耗时，甚至在高维问题中可能会崩溃。当策略和奖励函数共享参数时，它也会遇到困难。与 TRPO 不同，PPO 在样本复杂性和调整容易性之间找到了平衡，通过相对于先前策略的相对小的偏差更新策略。我们注意到，如果不将演化时间限制为特定值，PPO 可以快速学习单分量控制的时间最优解，即简单的奖励函数 $r(t_i) = |\rho_{22}(t_i)| - 1$ 导致一个常数零解，即传统的平坦 π 脉冲。为了验证 DRL 是否能够探索对抗系统误差的期望脉冲，我们从 STA 计算的演化时间内的数字脉冲开始。我们将失谐的可调范围限制在 STA 计算的相同区域内，以及演化时间。与 STA 的连续失谐序列不同，这里允许使用 20 个离散的失谐脉冲来驱动系统到达目标量子状态。在每个 episode 中，Agent 初始状态，在一个时间步后选择一个动作，通过主方程将状态演化到下一个时间步，反复由环境奖励/惩罚，最后评估累积奖励。在经过几个 episodes 后，ANN 参数通过给定的学习率进行更新，即批次大小。我们通过 $r(t_i) = -|\tilde{\Delta}(t_i) - \frac{i-1}{N-1}|$ 对 LZ 类型的数字脉冲进行预训练，加速学习过程，避免局部最优解。预训练后，我们在每个 episode 结束时通过在固定阈值 0.997 处奖励 Agent 一个常数值，同时在每个 episode 中引入均匀随机化的系统误差，范围为 $[-0.2, 0.2]$ ，进行微调。我们展示了 DRL 如何在图 2.4 中应用于仅 σ_z 控制，发现 STA 或 DRL 都可以通过连续/离散失谐导致鲁棒的仅 σ_z 控制。现在我们通过 DRL 在没有 STA 知识的情况下发现更一般情况的控制方案。在图 2.5 中，我们展示了在数字脉冲的任意演化时间内如何通过 DRL 最小化混合系统误差的影响。在微调过程中， λ_Δ 和 λ_Ω 在 $[-0.1, 0.1]$ 范围内均匀随机化。我们在这个区域达到了 0.97 的最小布居数，并且在中心部分大于 0.999。我们认为这个模型经过很好的训练，尤其是在系统误差遵循高斯分布的假设下。

我们在这里简要介绍 PPO 相对于其他算法的改进，而非通过技术细节来分析 PPO 算法。策略梯度方法在收敛性方面存在问题，这可以通过自然策略梯度来解决，但计算二阶导数矩阵需要巨大的计算资源。PPO 通过在目标函数中引入一个惩罚来处理约束，只允许进行一阶导数计算进行优化。即使在训练过程中违反了约束，计算也被简化，并且影响可以忽略不计。通过剪切目标，它的性能甚至可能更好。一句话，PPO 是我们在量子控制应用中的一种快速有效的 DRL 算法。

我们使用了一个名为 TensorForce 的 DRL 工具包进行快速实现。该工具包基于 TensorFlow，这是一个深度学习的著名框架，支持 GPU 加速。我们使用 QuTiP 为我们的两能级能量系统自定义了一个 DRL 环境。在预训练和微调过程中，我们将批量大小设置为 20，学习速率为 $1e-4$ 。其他超参数采用了 Tensorforce 提供的 PPOAgent 的默认值。在我们的预训练中，Agent 通过在第一个和最后一个时间步中提供额外的常数奖励更快地学习了 LZ 类型的动作 [见图 2.6(a)]。然而，当使用这些技巧时，需要非常小心，因为这些额外的奖励（也称为奖励裁剪）会改变总奖励的期望。这可能会改变最优策略，导致通过重复动作来获取更多奖励 [见图 2.6(c)]。

2.1.5 讨论

尽管人们可能会争论其他数值算法，如 GRAPE 和 CRAB，也能够完成类似的任务，但在我们的实践中，我们认为这些梯度算法有其局限性。其中一些很容易陷入局部最小值，由于初始配置而远离最优解。对于本文中提出的具体问题，即使试验控制根据实现 LZ 类型控制的目标进行初始化，也可能遇到而非局部最小值的问题（如图 2.3 中的例子）。相比之下，我们通过适当设计奖励函数获得了 LZ 类型的控制脉冲。DRL 算法调整 ANN 以最大化累积奖励，通过类似于分析 STA 的鲁棒性特征实现了几乎最优的结果。此外，已经证明了在 ANN 中使用梯度下降可以找到全局最小值（最大值）^[90-91]。研究还验证了任何复杂的 ANN 都可以缩小为具有较小尺寸的 ANN，而性能不会受到影响^[92]，大大节省了训练时间。来自计算机科学领域的这些理论研究将不断改进 DRL，拓宽其在量子控制中的应用。我们还强调一个关键问题，即由于物理约束，我们远未充分发挥 DRL 在这项工作中的威力。在应用 DRL 的其他场景中，Agent 的状态很容易被观察到。例如，在信息收集过程中，围棋、RTS 游戏和自动驾驶的状态已经被数字化。然而，在量子控制中，对状态的精确观测会

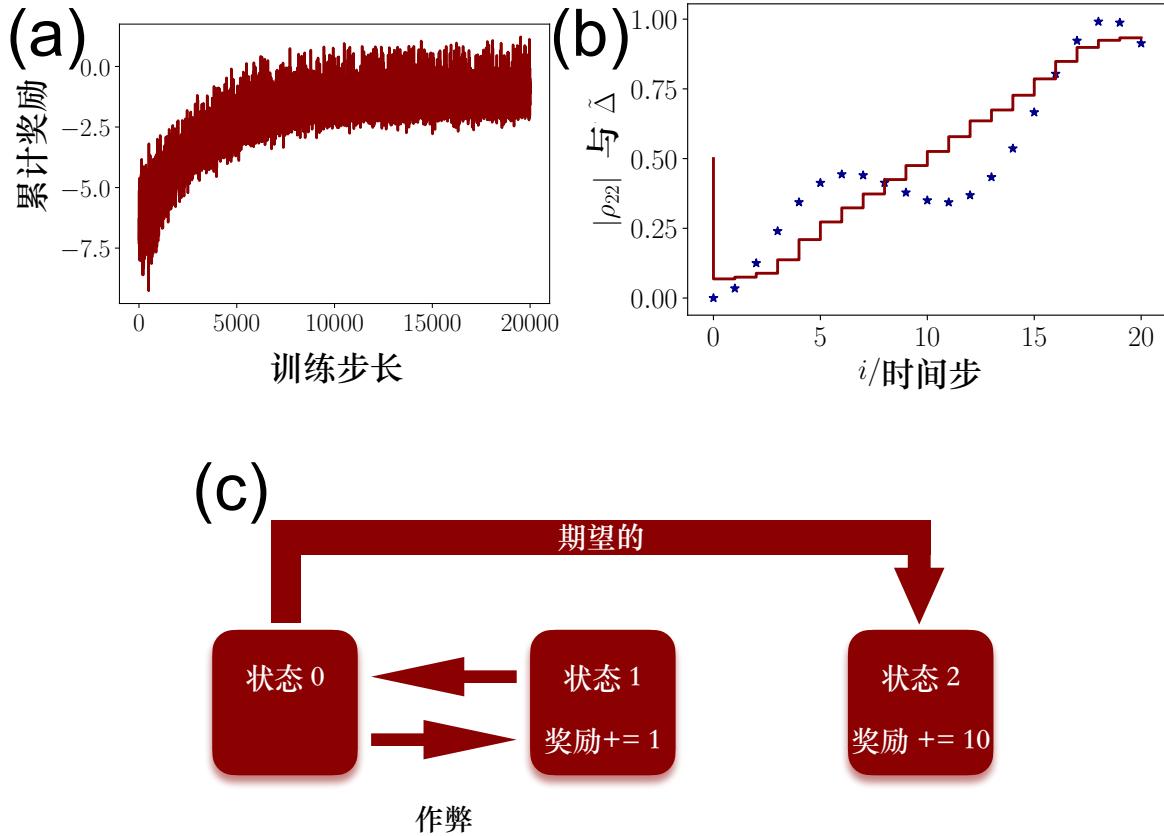


图 2.6 (a) 每个 episode 的奖励 (b) 预训练后进行微调的 Agent (c) 通过重复动作作弊的方案

立即破坏系统，需要通过真实设备进行大量复制以进行学习，或者通过训练有素的 Agent 来控制未知系统。因此，我们对所有系统性误差使用了由 Agent 在理想环境中生成的数字脉冲。换句话说，在评估过程中，我们禁止 Agent 观察任何状态，这也是为了在固定 STA 和 DRL 之间进行公平比较。尽管我们强加了这一约束，但通过受到机器学习启发的实验策略，可以降低 DRLAgent 在量子控制中观察状态的成本。如果允许 Agent 在每个时间步之前观察状态，那么它应该根据优化策略动态更改动作，就像它在其他任务中所做的那样。这种改进还需要对量子状态进行精确测量。否则，性能甚至可能比固定量子控制还差。

2.2 离子阱实验证

我们将这种调控方案在离子阱系统中与实验团队合作进行了验证。我们实验中使用的平台是针式离子阱。如图2.7所示，针式离子阱由 6 根针组成。两根相对的针连接到射频（RF）电位以固定离子，其他针连接到直流（DC）电位以微调离子的位

置。针式离子阱的尺寸主要取决于靠近阱中心的两根针尖之间的距离，在我们的实验中设置为 180 微米。该阱安装在超高真空环境中，真空间度低于 10^{-11} tor，螺旋谐振器提供频率为 24 兆赫、振幅为 180 伏的射频信号给阱。离子荧光由数值孔径为 0.4 的物镜收集，并由光电倍增管（PMT）检测。总荧光检测效率约为 2%。

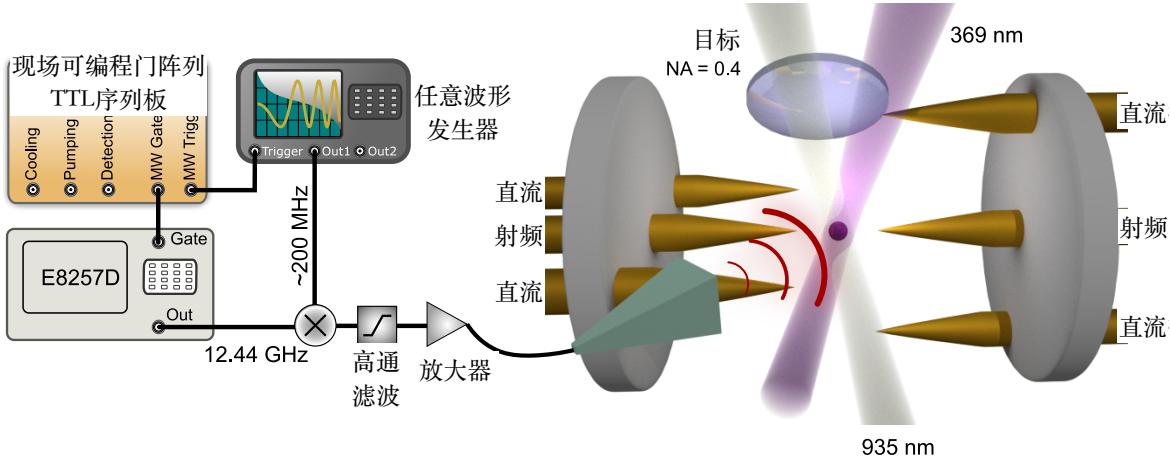


图 2.7 在针式离子阱的中心捕获单个 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子。使用两个 369 nm 和一个 935 nm 激光冷却离子，其中 369 nm 激光也用于检测离子的状态。用于操控离子的微波通过混频方法生成。整个实验序列由基于现场可编程门阵列（FPGA）的 TTL 序列板控制。

我们通过在调制的任意波形发生器（AWG）上设置波形来生成所需的微波场波形。载波微波 $B_c(t) = A_1 \sin(\omega_c t)$ ，其中 A_1 是振幅， $f_c = \omega_c/2\pi = 12.4 \text{ GHz}$ 是频率。用于调制的 AWG 生成的波形是 $I(t) = A_2 \sin(\phi(t))$ 。混频后，微波场将变为 $B(t) = \frac{A_1 A_2}{2} (\sin(\omega_c t + \phi(t)) + \sin(\omega_c t - \phi(t)))$ ，其中相位函数 $\phi(t)$ 在我们的 DRL 实验中可以用一个分段函数来表示，该函数由 20 个步骤组成。考虑到比特的共振频率 $f_0 = \omega_0/2\pi = 12.6 \text{ GHz}$ ，我们通过一个高通滤波器滤除微波的低频分量。在我们的实验中，我们只通过改变相位 $\phi(t)$ 以离散步骤来调整 $\Delta(t)$ ：

$$\phi(t) = \begin{cases} (\omega_0 - \omega_c)t + \Delta_1 t, & (0, t_1) \\ (\omega_0 - \omega_c)t + \Delta_2 t + \phi_1, & (0, t_2 - t_1) \\ (\omega_0 - \omega_c)t + \Delta_3 t + \phi_2, & (0, t_3 - t_2) \\ \dots \\ (\omega_0 - \omega_c)t + \Delta_{20} t + \phi_{19}, & (0, t_{20} - t_{19}) \end{cases} \quad (2.23)$$

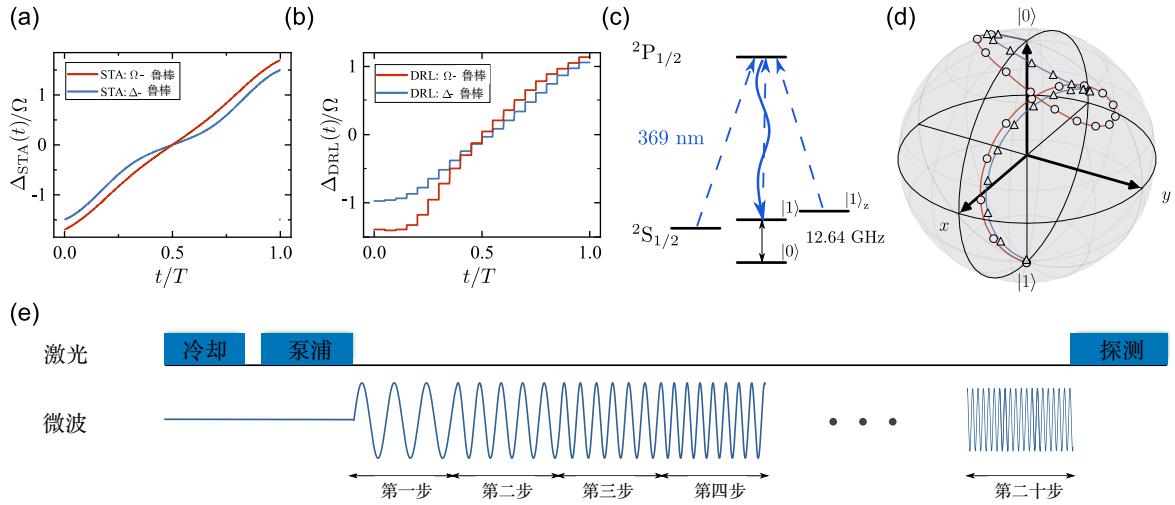


图 2.8 实验序列和模型波形: (a) STA 方法下的优化色散与时间关系图。时间标准化为 $[0, 1]$ 。 (b) DRL 方法下的优化色散与时间关系图。时间标准化为 $[0, 1]$ 。 (c) $^{171}\text{Yb}^+$ 离子的能级图。 (d) 在 DRL 模型驱动下布洛赫球中状态的演化。红色实线表示为 Ω 误差优化的轨迹, 而蓝色实线表示为 Δ 误差优化的轨迹。空心圆和空心三角表示每个驱动步骤结束时的状态。 (e) DRL 模型中的实验序列。

其中 $\Delta_n (n \in [1, 20])$ 是阶梯形式的失谐, $\phi_1 = (\omega_0 - \omega_c)t_1 + \Delta_1 t_1$, $\phi_2 = (\omega_0 - \omega_c)(t_2 - t_1) + \Delta_2(t_2 - t_1) + \phi_1$ 等。

关于态制备与测量方面, 在离子阱实验中, 这些操作是不完美的, 总会存在一些限制。我们将这些误差描述如下。离子通过光泵浦被准备在 $|0\rangle$ 态, 理想情况下, 当离子处于暗态时不应检测到任何光子。然而, 由于光子探测器的暗计数以及来自环境的散射光子, 我们有时会收集到一些光子。然后, 我们施加一个 π 脉冲将 $|0\rangle$ 态翻转到 $|1\rangle$ 态并检测荧光。由于收集效率的问题, 有时不会收集到任何光子。在我们的实验中, 阈值选择为 2。当光子数 > 2 时, 比特被识别为亮态的概率是 ϵ_D 。相反, 当光子数 ≤ 2 时, 被错误识别为亮态的概率是 ϵ_B 。总误差可以表示为 $\epsilon = (\epsilon_B + \epsilon_D)/2$, 在我们的实验中为 0.5%。

在图 2.8(a) 中, 我们给出了实验中作为基准的 STA 解析调控。为了评估 DRL 启发的鲁棒量子控制, 我们进行了两个数值实验, 如下所示: (i) 我们将操作时间设置为 $T_\Delta = 364 \mu\text{s}$ 和 $T_\Omega = 293 \mu\text{s}$, 均匀分成 20 个脉冲, 这是来自 STA 的唯一提示。从我们的 DRL 模型为不同系统误差优化输出的数字波形显示在图 2.8(b) 中 (具体数值可参见表格 2.1)。我们强调 STA 框架阐明了 Landau-Zener 问题鲁棒性的上限, 这可以用于对比 Agent 的性能, 作为一种类似特征的数字量子控制的人工智能方法。(ii) 操作时间被任意设定为 $T = 300 \mu\text{s}$, 以检查 Agent 是否可以在没有 STA 任何领域知

表 2.1 使用深度强化学习方法针对实验中的失调误差和过旋转误差进行优化的失谐脉冲

Step	$\Delta_{\text{DRL}}/\Omega$ (Δ -鲁棒)	$\Delta_{\text{DRL}}/\Omega$ (Ω -鲁棒)
1	-0.9694	-1.3883
2	-0.9558	-1.4004
3	-0.9308	-1.3871
4	-0.8701	-1.3244
5	-0.7740	-1.1759
6	-0.6459	-0.9527
7	-0.5152	-0.7144
8	-0.3774	-0.4971
9	-0.2404	-0.3010
10	-0.1365	-0.1207
11	-0.0310	0.0481
12	0.0824	0.2084
13	0.2075	0.3620
14	0.3404	0.5094
15	0.4779	0.6505
16	0.6138	0.7849
17	0.7438	0.8844
18	0.8645	0.9642
19	0.9740	1.0508
20	1.0547	1.1348

识的情况下探索针对混合系统误差的期望方案。我们明确，对于这个任务，DRL 更为一般，因为基于不变量的 STA 不再完美消除混合误差，而是在一定比例的 δ_Δ 和 δ_Ω 上。所有用于实际实验的波形都来自这两个数值实验模型。

我们的实验在一个 Paul 离子阱中的 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子上进行。如图 2.8(c) 所示，这个两能级系统 (TLS) 被编码在离子的 $^2\text{S}_{1/2}$ 基态中，其中 $|0\rangle = |^2\text{S}_{1/2}, F = 0, m_F = 0\rangle$ 和 $|1\rangle = |^2\text{S}_{1/2}, F = 1, m_F = 0\rangle$ 。能级 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 之间的能量差大约为 $\omega_{01} = 12.6428$ GHz。用于驱动 TLS 的微波通过混频法生成。具体来说，从信号发生器 (Agilent E8257D) 产生的约 12.4428 GHz 的微波与从任意波形发生器 (AWG) 产生的约 200 MHz 微波信号混频，用于调制微波。通过高通滤波器 (HPF) 进行滤波后，该信号将被放大至约 10 W，然后通过微波喇叭传输给离子^[93]。我们的陷阱设备使用 1.5 mm 厚的单层 Mu 金属进行屏蔽^[94]，使得 $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ 跃迁的最终相干时间约为 200 ms，由 Ramsey 实验进行表征。

在每个循环中，实验经历以下过程：经过 1 ms 的多普勒冷却后，离子的状态通过 20 μs 的光泵浦初始化为 $|0\rangle$ 状态，保真度为 99.5%。从 DRL 模型输出的波形通过调制失谐转换为驱动微波，如图 2.8(e) 所示。然后将驱动微波传输到离子以驱动 TLS。最后，使用 NA (数值孔径) = 0.4 的物镜进行状态相关的荧光检测，以确定处于 $|1\rangle$ 状态的概率。在我们所有的实验中，我们将拉比频率设置为 $\Omega = (2\pi) \times 3.3 \text{ kHz}$ ，即对应的 2π 时间约为 300 μs 。

为了验证 DRL 控制方法对静态误差的鲁棒性，我们比较了 STA、DRL、标准 π 脉冲以及 BB1 (BroadBand 1)^[95] 或 CORPSE 方法^[96] (Compensate for Off-Resonance with a Pulse SEquence) 在单量子比特 X 门任务中对不同过转角 (δ_Ω) 误差或失谐 (δ_Δ) 误差的性能。CORPSE^[97] 是一类复合脉冲，旨在减小失谐误差 (Δ -error)。它通过三个脉冲实现目标旋转 θ_x ，具有分析旋转角度

$$\theta_1 = 2\pi + \frac{\theta_x}{2} - \arcsin \left[\frac{\sin(\theta_x/2)}{2} \right], \quad (2.24)$$

$$\theta_2 = 2\pi - 2 \arcsin \left[\frac{\sin(\theta_x/2)}{2} \right], \quad (2.25)$$

$$\theta_3 = \frac{\theta_x}{2} - \arcsin \left[\frac{\sin(\theta_x/2)}{2} \right], \quad (2.26)$$

其中 $\theta_1 = 7\pi/3, \theta_2 = 5\pi/3, \theta_3 = \pi/3$ ，相应的相位为 $+x, -x, +x$ ，用于 π 翻转。时间相关的 Hamiltonian 是一个分段函数

$$\begin{aligned} H(t) = & \Omega, 0 \leq t \leq \frac{\pi}{3\Omega}, \\ & -\Omega, \frac{\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{2\pi}{\Omega}, \\ & \Omega, \frac{2\pi}{\Omega} < t \leq \frac{13\pi}{3\Omega}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$(2.28)$$

相应的受扰动的演化算符是

$$\begin{aligned} U_\Delta = & \exp \left(-i \frac{7\pi}{6} \sigma_x - i \frac{7\delta_\Delta \pi}{6\Omega} \sigma_z \right) \\ & \exp \left(i \frac{5\pi}{6} \sigma_x - i \frac{5\delta_\Delta \pi}{6\Omega} \sigma_z \right) \\ & \exp \left(-i \frac{\pi}{6} \sigma_x - i \frac{\delta_\Delta \pi}{6\Omega} \sigma_z \right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

我们设置 $\delta_\Delta \in [-\Delta_{\max}, \Delta_{\max}] = [-1.5\Omega, 1.5\Omega]$, 这是 STA 和 DRL 失谐调节的最大可调范围, 以进行公平比较。

相应地, BB1^[96] 通过四个相位相同的平坦脉冲实现对过旋转误差的高鲁棒性。带有过旋转误差的 Hamiltonian 表达式为

$$H = \frac{1 + \delta_\Omega}{2} (\Omega \sigma_- + \Omega^* \sigma_+), \quad (2.30)$$

其中 $\sigma_\pm = (\sigma_x \mp i\sigma_y)/2$ 。BB1 序列通过四个控制片段翻转比特

$$\begin{aligned} H(t) = & \Omega \sigma_- + \Omega \sigma_+, 0 \leq t \leq \frac{\pi}{\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i\phi) \sigma_+, \frac{\pi}{\Omega} < t \leq \frac{2\pi}{\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i3\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i3\phi) \sigma_+, \frac{2\pi}{\Omega} < t \leq \frac{4\pi}{\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i\phi) \sigma_+, \frac{4\pi}{\Omega} < t \leq \frac{5\pi}{\Omega}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

其中 $\phi = \arccos(-\frac{\theta}{4\pi}) = \arccos(-\frac{1}{4})$ 。

此外, CORPSE 和 BB1 还可以结合成为对抗混合误差的复合脉冲, 这就是所谓的 CinBB。它通过在 CORPSE 之后实现 BB1 而没有 π_0 来实现。其哈密顿量如下:

$$\begin{aligned} H(t) = & \Omega, 0 \leq t \leq \frac{\pi}{3\Omega}, \\ & -\Omega, \frac{\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{2\pi}{3\Omega}, \\ & \Omega, \frac{2\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{13\pi}{3\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i\phi) \sigma_+, \frac{13\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{16\pi}{3\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i3\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i3\phi) \sigma_+, \frac{16\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{22\pi}{3\Omega}, \\ & \Omega \exp(-i\phi) \sigma_- + \Omega \exp(i\phi) \sigma_+, \frac{22\pi}{3\Omega} < t \leq \frac{25\pi}{3\Omega}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

其操作时间比 π 脉冲长 8 倍以上。另一个具有与 BB1 相同操作时间的复合脉冲是 Knill 脉冲, 它也常用于各种动力学解耦序列中。Knill 脉冲同样对抗共振失谐和过旋转误差具有很强的鲁棒性, 导致额外的 $\frac{\pi}{3}$ 相位偏移。它由五个 π 脉冲的对称序列组

成：

$$\begin{aligned}
 H(t) = & \Omega \exp(-i\frac{\pi}{6})\sigma_- + \Omega \exp(i\frac{\pi}{6})\sigma_+, \quad 0 \leq t \leq \frac{\pi}{\Omega}, \\
 & \Omega\sigma_- + \Omega\sigma_+, \quad \frac{\pi}{\Omega} < t \leq \frac{2\pi}{\Omega}, \\
 & \Omega \exp(-i\frac{\pi}{2})\sigma_- + \Omega \exp(i\frac{\pi}{2})\sigma_+, \quad \frac{2\pi}{\Omega} < t \leq \frac{3\pi}{\Omega}, \\
 & \Omega\sigma_- + \Omega\sigma_+, \quad \frac{3\pi}{\Omega} < t \leq \frac{4\pi}{\Omega}, \\
 & \Omega \exp(-i\frac{\pi}{6})\sigma_- + \Omega \exp(i\frac{\pi}{6})\sigma_+, \quad \frac{4\pi}{\Omega} < t \leq \frac{5\pi}{\Omega},
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

在文献^[95,98]中被介绍。

DRL 模型根据在 δ_Ω 和 δ_Δ 误差中优化的 STA 方法提供的初步信息进行了预训练。在布洛赫球中，DRL 驱动下的状态演化如图 2.8(d) 所示。比较结果如图 2.9(a) 和 2.9(b) 所示，更详细的信息以对数刻度呈现如图 2.9(c) 和 2.9(d)。实验结果在所有图 2 中，实线代表数值结果，而不同的点对应于实验结果。在大多数情况下，DRL 方法的性能与 STA 方法相当，除了 δ_Ω 和 δ_Δ 误差太大的情况。同时，它们在静态过转角误差下都比 π 脉冲方法更鲁棒，稍逊于 BB1 方法。对于失谐误差，DRL 和 STA 方法的性能优于 π 脉冲方法，并且与 CORPSE 方法相当。值得注意的是，BB1 和 CORPSE 的操作时间为 $750 \mu s$ 和 $650 \mu s$ ，是 DRL 方法的两倍以上。由于微波功率与系统的拉比频率 Ω 成正比。能量成本只取决于 Ω 和操作时间，这意味着对于相同的任务，BB1 和 CORPSE 方法将消耗 DRL 方法的两倍能量。

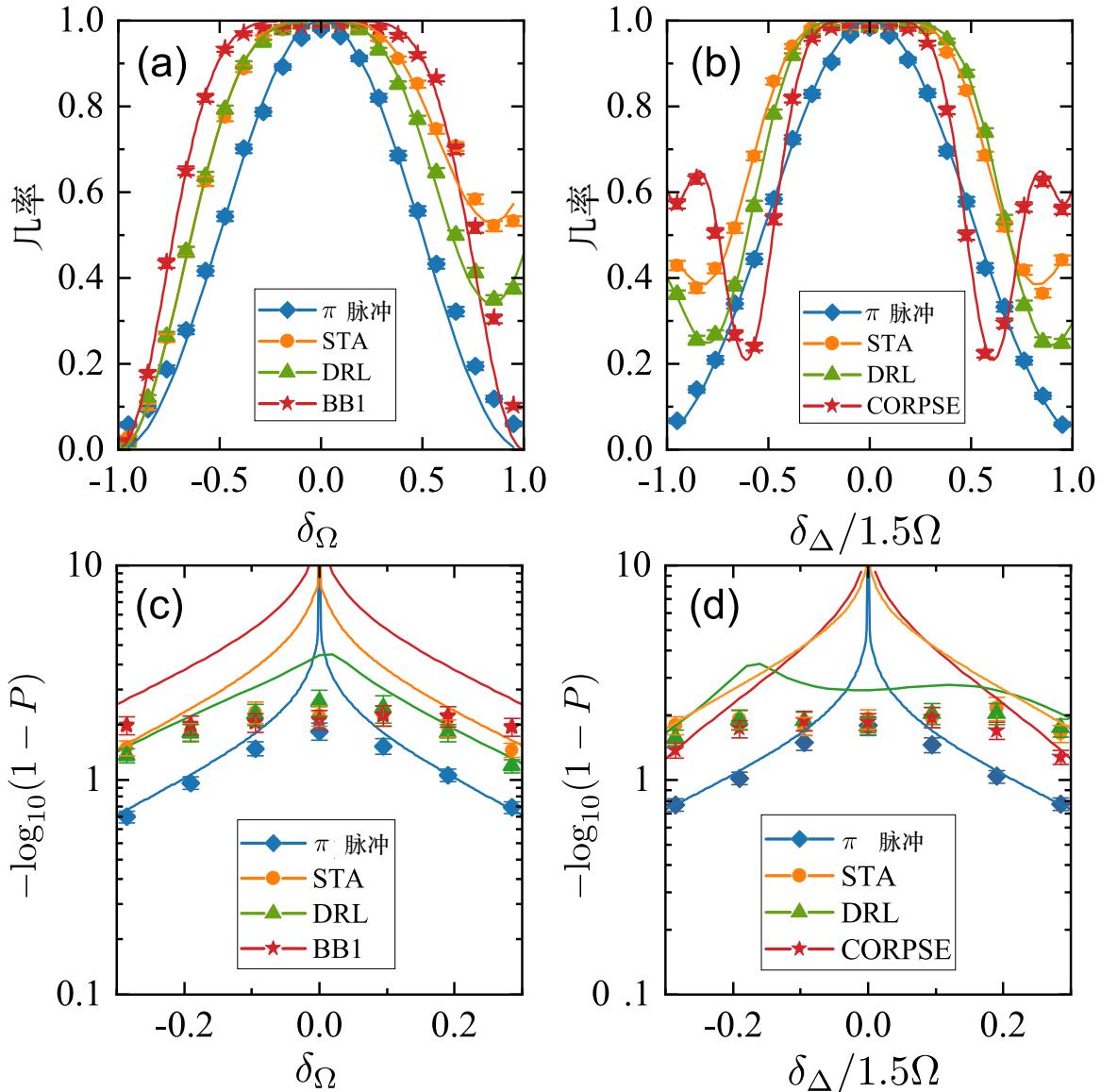


图 2.9 噪声鲁棒性比较：在不同的过旋转或失谐误差下，单比特 X 门任务中 π 脉冲、STA、DRL 以及 BB1 或 CORPSE 方法的性能。(a) 与 (b) 四种控制方法在不同的 δ_Ω 和 δ_Δ 误差下的性能。在大多数情况下，DRL 方法和 STA 方法一样鲁棒，而且它们在两种类型的误差下都比 π 脉冲更为鲁棒。(c) 与 (d) 在结果的对数刻度上进行的详细比较。对于每个点，实验重复了 1000 次。误差条对应于量子投影噪声。实线代表数值模拟的结果。

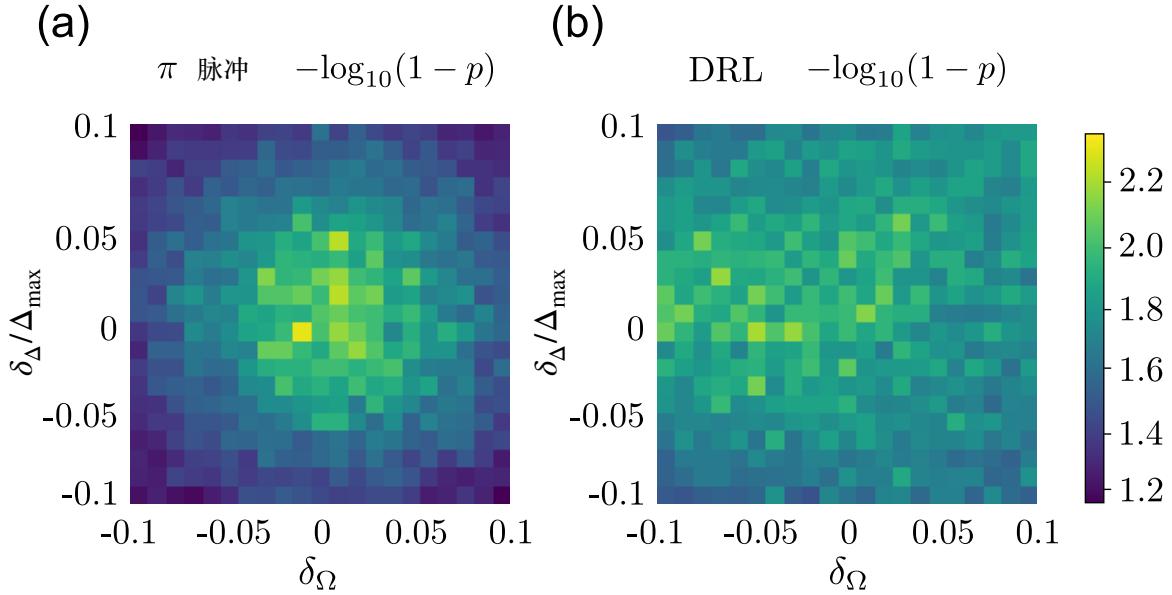


图 2.10 在几乎没有误差的情况下， π 脉冲方法的性能略优于 DRL，因为 DRL 的脉冲更复杂，容易积累操作误差。然而，随着混合误差的增加，DRL 模型的性能远远优于 π 脉冲控制。

然后我们在 δ_Δ 和 δ_Ω 混合误差下研究了 DRL 模型。值得一提的是，在本地预训练 DRL 模型时，我们设置了操作时间和调谐范围，没有使用 STA 的任何知识。在图2.10中，我们以对数刻度表示概率，以更好地区分这两种方法之间的差异。由于多脉冲驱动操作，DRL 方法更容易累积误差；此外，我们在 $\langle \sigma_z \rangle > 0.997$ 时停止训练，这在理论上可以进一步改进。正如我们所预料的，几乎没有错误的情况下， π 脉冲方法的性能略优于 DRL。然而，随着混合误差的增加，DRL 方法在大多数情况下的性能要比 π 脉冲好得多，这在精密量子操作中是至关重要的。

此外，我们还在离子的塞曼能级中检验了 DRL 模型，其中 $|1\rangle_z = |^2S1/2, F=1, m_F=1\rangle$ 。塞曼能级对磁场的扰动是一阶敏感的，这可能会将实际的实验室噪声引入到两能级系统中。 $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle_z$ 跃迁的相应相干时间约为 0.35 毫秒。我们比较了在只有磁场噪声的情况下， π 脉冲、DRL 和 CinBB 方法在单比特 X 门下的性能，其中采用不同次数的 π 翻转。如图2.11(a)所示，由于不可避免的退相干， π 脉冲方法中随着 π 翻转次数的增加，最终概率迅速下降。然而，随着 π 翻转次数的增加，DRL 方法比 π 脉冲和 CinBB 方法更为鲁棒。为了检验 DRL 模型对于时间变化误差的鲁棒性^[99]，我们通过混合和微波调制方法在我们的系统中引入了过量旋转和失谐误差的白噪声^[100]，生成时变控制误差模型，其中两个白噪声模拟失谐误差和拉

比误差。白噪声的相关函数为 $\langle x(t_1)x(t_2) \rangle = \alpha^2\delta(t_1 - t_2)$, 其中其功率谱密度 (PSD) 是其自相关的傅里叶变换

$$\begin{aligned}\langle x(t_1)x(t_2) \rangle &= \int x(t_1)x(t_1 - t_2)dt_1 \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} |g(\omega)|^2 \exp(-i\omega t),\end{aligned}\quad (2.34)$$

其中 $g(\omega)$ 是 PSD。我们知道白噪声的 PSD 是一个常数, $\delta(t) = \frac{1}{2} \int \exp(-i\omega t) d\omega$ 。因此, 我们得出结论 $g(\omega) = \alpha$ 。在我们的实验实现中, 白噪声通过频率调制 (FM) 和幅度调制 (AM) 引入到控制微波中。通过按比例改变频率偏差 F 和调制深度 A , 实现时间变化的系统误差 δ_Δ 和 δ_Ω 的不同强度。考虑带有噪声的余弦信号的 FM

$$y_1(t) = \cos \{ [\omega_{\text{res}} + FG(t)] t \}, \quad (2.35)$$

其中 ω_{res} 是离子内部态的共振频率, $G(t)$ 是无量纲噪声信号。失谐误差 $\delta_\Delta = FG(t)$ 与 $x(t)$ 成正比。由于其 PSD 确实是其自相关的傅里叶变换, 我们证明了 $F \propto \alpha$ 。类似地, 我们通过 AM 实现拉比误差 δ_Ω

$$y_2(t) = [1 + AG(t)] \cos (\omega_{\text{res}} t), \quad (2.36)$$

为了再现实验, 给出了参数 $F = 20$ kHz 和 $A = 0.3$ 。由于实验设备的限制, 我们无法像^[101]那样产生人为的 $1/f$ 粉系统误差, 该研究证明了复合脉冲对于时间变化的控制误差的鲁棒性。我们使用可行的白噪声来进行实验, 从而在塞曼能级中实验性地展示了 DRL 的鲁棒性。该能级对磁场的扰动敏感, 使我们能够研究在类似自然实验室环境中的 $1/f$ 噪声的量子噪声下的性能。

实验结果如图2.11(b)所示, 表明在时间变化误差下, DRL 模型比 π 脉冲和 CinBB 方法更为鲁棒, 在嘈杂的量子信息处理实验中具有重要意义。此外, CinBB 的操作时间为 $1250 \mu\text{s}$, 几乎是 DRL 方法的四倍。

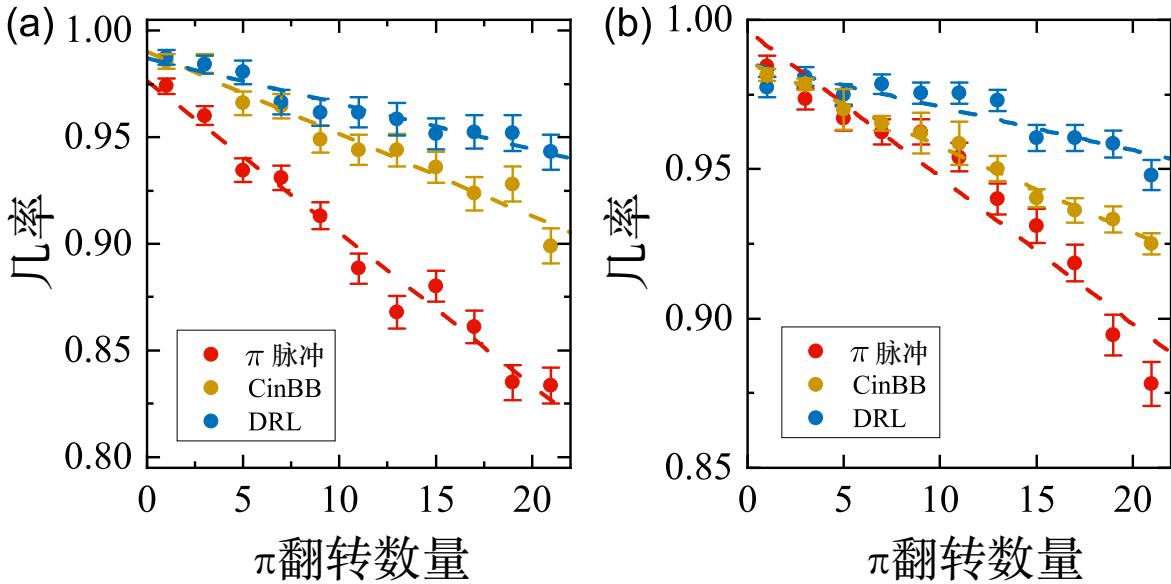


图 2.11 DRL 方法在系统性和时变误差下的噪声鲁棒特性: (a) π 脉冲、CinBB 和 DRL 方法在不同个数 π 翻转下的系统性误差表现。 (b) π 脉冲、CinBB 和 DRL 方法在不同个数 π 翻转下的时变误差表现。每个数据点的实验重复了 1000 次。误差条对应量子投影噪声。虚线表示数据的线性拟合。

2.3 结论

本章节中，我们发现 STA 为设计快速且鲁棒的量子控制提供了一种优化的解析方法，特别是在参数变化的情况下进行逆向工程设计。此外，它提升了 DRL 的性能，提供了关于最优演化时间的知识，加速了其收敛过程。另一方面，DRL 还展现了通过人工设计的奖励函数学习物理的能力。Agent 获得了在复杂约束下产生数字脉冲的能力，显著消除了系统误差。即使在没有领域知识的情况下，为更复杂情况设计的脉冲也是令人满意的。这种调控方案在离子阱实验中得到了验证，与组合脉冲比较展现出了优势，并在开放量子系统中的 π 翻转实验中保持了可靠性。

同时，我们注意到，在理想情况下二能级系统中训练的模型得到的固定的调控方案在含有量子噪声的可由非厄密开放量子系统实验中依然能取得较好的表现。这为我们下一章节研究开放系统下的闭环量子控制奠定了信心。

第三章 强化学习闭环量子调控

在上一章节中，我们将量子绝热捷径技术与深度强化学习结合，得到了固定的脉冲以实现高保真度高鲁棒性的快速量子调控。自然地，人们会考虑到与深度强化学习形式更为相似的闭环量子调控，同时希望其考察在相较理想二能级系统更为复杂的含噪声量子比特中的表现。

机器学习可用于使用从量子系统中不断提取的信息进行知识发现的各种任务。该模型接收来自不断测量的量子系统的流信息，用于学习和决策，从而实现对量子系统即时反馈的闭环控制。在本章节中，我们采用强化学习算法进行闭环量子控制。在这一范式中，量子比特在通过弱测量提取信息后不再被破坏，而是略微受到扰动。该模型观察包含弱值的状态，作为对量子比特的部分信息，置信度较低，从而产生演化量子环境到下一个时间步的动作。我们的方案在每个时间步的长度足够小时反映了流学习的精神，类似于连续测量的动力学。它还通过在评估期间使模型适应环境的方式实现了迁移学习，同时外部噪声模式正在变化。我们认为我们的方案提高了量子计算和量子信息处理在实时实验中的性能，加速了从 NISQ 发展到下一时代的进程。

3.1 开放量子系统与弱测量

孤立量子系统的动力学始终由薛定谔方程 $\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$ 主导，其中算符 $H(t)$ 是量子系统的哈密顿算符，其期望值以能量为单位。它等效于 Von Neumann 方程 $\dot{\rho}(t) = -(i/\hbar)[H(t), \rho(t)]$ ，其中纯态波函数 $|\psi(t)\rangle$ 被推广为密度矩阵 $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ 。然而，在现实世界中，孤立的量子系统并不存在。外部环境通过与系统耦合影响量子系统，引入设计者本不期望的效应，比如退相干。一般来说，人们总是可以写出总哈密顿量 $H_T = H_S + H_E + H_I$ ，其中包括系统哈密顿量 H_S 、环境哈密顿量 H_E 和耦合相互作用哈密顿量 H_I 。新系统被假定遵循 Von Neumann 方程。通过偏迹去掉环境子系统部分，可以获得原系统的信息 $\rho = \text{Tr}_E(\rho_T)$ ，从而导出

Lindblad 主方程

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}[H(t), \rho(t)] + \sum_n \frac{1}{2} [2C_n\rho(t)C_n^\dagger - \rho(t)C_n^\dagger C_n - C_n^\dagger C_n \rho(t)], \quad (3.1)$$

其中 $C_n = \sqrt{\gamma_n}A_n$ 是坍缩算符， A_n 是在 H_I 中将系统与环境耦合的算符， γ_n 是相应的速率。密度矩阵被假设最初处于直积态 $\rho_T(0) = \rho(0) \otimes \rho_E(0)$ ，即，在 $t = 0$ 时原系统和环境之间没有相关性。它们在演化过程中仍然保持可分离状态 $\rho_T(t) \approx \rho(t) \otimes \rho_E$ ，因为环境不会显著演化。环境被认为是马尔可夫的，要求其相关函数的衰减比系统的相关函数更快。值得一提的是，开放量子系统的演化不再保证是幺正的。同时，量子系统的密度矩阵不再是一个纯态，而是一个混合态 $\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ ，其中 p_n 是处于 $|\psi_n\rangle$ 状态的经典概率。

在量子领域应用机器学习算法的一个主要困难是由测量引起的，而在经典领域中通常是无成本的。一旦发生测量，量子系统就被破坏，一旦提取了量子信息，就被投影到一个本征态上。通过算符 \hat{A} 测量波函数会输出其本征值，其期望值遵循 $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ 。它也可以用密度矩阵的术语表示为 $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{A})$ 。Aharonov 的工作^[34] 提出了其扩展，该扩展从量子系统中提取部分信息而不将其破坏。弱值 $A_w = \langle \psi_f | \hat{A} | \psi_i \rangle / \langle \psi_f | \psi_i \rangle$ 不再是算符的实本征值，而是任意值，甚至是复值，其中 $|\psi_i\rangle$ 和 $|\psi_f\rangle$ 是预/后选择的状态。后选择操作并不总是成功，一旦操作失败，波函数就被丢弃。因此，我们将量子系统耦合到一个用于纠缠和测量弱值的仪表，这实际上是最初提出的框架，而不是后来发展起来的预/后选择范式。更具体地说，一个高斯仪表 $|\Phi\rangle = \int (2\pi\sigma^2)^{-1/4} \exp(-q^2/4\sigma^2) |q\rangle dq$ 被耦合到量子比特 $|\Psi\rangle = [\cos(\alpha/2), \sin(\alpha/2)]^T$ ，遵循相互作用哈密顿量 $H_{int} = g(t)p \otimes \hat{A}$ ，其中 σ 是仪表位置的标准偏差， p 是其共轭动量算符， $g(t)$ 是耦合强度。可分的初始状态 $|\Phi(q)\rangle \otimes |\Psi\rangle$ 在哈密顿量的演化下纠缠为 $\cos(\alpha/2)|\Phi(q-a_1)\rangle \otimes |a_1\rangle + \sin(\alpha/2)|\Phi(q-a_2)\rangle \otimes |a_2\rangle$ ，其中 a_i 和 $|a_i\rangle$ 是算符 \hat{A} 的本征值和本征态，如果 $\int_0^{t_0} g(t)dt = 1$ 。如果我们的目标是在 Z 方向上执行弱测量，即 Pauli-Z 算符 $\hat{A} = \hat{\sigma}_z$ ，则仪表位置的测量输出遵循概率分布

$$P(q) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[-\frac{(q - \cos \alpha)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (3.2)$$

将期望的位移 $\langle \Psi | \hat{\sigma}_z | \Psi \rangle = \cos \alpha$ 。相应地，量子比特的波函数被轻微扰动为

$$|\tilde{\Psi}\rangle \propto \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \cos \frac{\alpha}{2} \exp \left[-\frac{(q_0 - 1)^2}{4\sigma^2} \right] |0\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} \exp \left[-\frac{(q_0 + 1)^2}{4\sigma^2} \right] |1\rangle, \quad (3.3)$$

其中弱值 q_0 是对仪表投影测量的测量反馈。

此外，量子信息可以从量子系统中持续提取，实现了信息每次测量得到的量趋向于零的连续测量。在这个框架中，总操作时间被分成时间步长 Δt 的间隔，以便在每个间隔内执行一次弱测量。极限 $\Delta t \rightarrow 0$ 导致了连续测量，其中随机微分方程控制其动力学^[102-103]。在图 3.1 中，我们说明了随机薛定谔方程的动力学，旨在通过固定的共振 π 脉冲翻转量子比特，其中具有不同时间间隔 Δt 的尺度。我们可以看到，如果连续弱测量量子比特，而不基于反馈采取任何行动，而是演化一个共振的 π -脉冲，最终状态更有可能偏离目标状态，目标状态由具有 π -脉冲的开环量子控制的时间最优解给出。我们测量得越频繁，偏离目标状态的期望就越大。因此，对于闭环量子控制，人们应该利用反馈来控制系统。遵循这个思路，我们研究了设计 RL 算法来解决带有噪声的量子比特的闭环控制。

3.2 数值实验

3.2.1 物理系统与任务

正如上一节所言，处于量子噪声下的系统不再由薛定谔方程支配，而是由林德布拉德主方程支配。对于纯相位退相干，对角塌缩算符为 $C_n = \sqrt{\gamma_n} |n\rangle \langle n|$ ，得到主方程

$$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)] + \Gamma [\text{diag}(\rho) - \rho], \quad (3.4)$$

如果 $\gamma_0 = \gamma_1$ ，通过减小密度矩阵的非对角元素来影响相干性。对于弛豫，我们考虑从量子比特到外部环境沿 X 方向的能量耗散，即 $C = \sqrt{\gamma} \hat{\sigma}_x$ 。由带有 Lindblad 项的主方程的非幺正演化将密度矩阵转化为混合态，在其中，无法恢复到 $|\psi_n\rangle$ 的经典概率 p_n 。因此，弱测量后的扰动系统无法通过波函数表示。在这里，我们将其扩展到密度矩阵的情况。类似地，一个纯态的高斯仪表 $\rho_p = |\Phi\rangle \langle \Phi|$ 通过相互作用哈密顿量 $H_{int} = g\delta(t - t')p \otimes \hat{\sigma}_z$ 与一个混合态的双能级系统 ρ 耦合。耦合之后的集体系统从

初始状态 $\rho_{ini} = \rho_p \otimes \rho$ 演化到耦合后的状态 ρ_{fin} , 演化由

$$\rho_{fin} = \exp(-igp \otimes \hat{\sigma}_z) \rho_{ini} \exp(igp \otimes \hat{\sigma}_z) \quad (3.5)$$

给出, 当 $g = 1$ 时, 仪表平移 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{\sigma}_z)$ 。通过偏迹掉比特后, 我们通过将仪表的测量投影到其本征态 $|q_0\rangle$ 来检索耦合后的波动仪表。通过投影算符和追踪掉仪表, 我们获得了弱值反馈 q_0 后的比特密度矩阵。

在明确了在密度矩阵语言中状态扰动的计算后, 我们制定了由强化学习研究的具体任务。我们考虑通过机器学习算法在操作时间 T 内对不断测量的量子比特进行最优控制。我们的目标是通过在 X 方向上的一系列脉冲将其从 $|0\rangle$ 翻转到 $|1\rangle$ 。每个脉冲持续一个小时间隔 Δt , 由驱动哈密顿量 $H = \Omega \hat{\sigma}_x$ 描述, 随后在 Z 方向上进行弱测量。我们假设测量过程是瞬时的, 即与动力学演化无关, 耦合和仪表的投影测量是瞬时的。同时, 控制脉冲也可能不精确, 包括轻微的失谐 $H = \Omega \hat{\sigma}_x + \Delta \hat{\sigma}_z$ 和振幅误差 $\Omega \rightarrow \Omega + \delta\Omega$ 。弱值和最后一个脉冲的振幅被馈送给机器学习模型作为流数据。因此, 模型的即时反馈控制着下一个时间步的量子系统。

3.2.2 数值设置

我们将 DRL 方法应用于我们的任务中。环境包括一个被连续测量并为弱值而扰动的量子比特, 由 Agent 的脉冲进行控制。ANN 作为 Agent 观察量子比特的状态, 输出用于控制问题的动作, 该网络通过深度学习算法进行训练以逼近最优策略函数 $\pi(a|s)$ 。环境接收 Agent 的动作, 演化到下一个时间步。它还计算新的强化学习状态和相应的奖励。值得注意的是, 在量子领域中的环境与其他物理环境不同。如果量子信息, 例如密度矩阵元素或保真度, 编码在强化学习状态中, 那么 RL 环境需要数值模拟。与其他物理环境中的黑盒不同, 由于无法从量子比特中获取密度矩阵的元素而不破坏它, 因此必须基于弱值和控制脉冲计算密度矩阵。

在我们的实践中, 我们将拉比频率 (脉冲振幅) 的可调范围设置为动作 $\Omega \in [0, 3\pi]$ (无量纲单位), 并对其进行重新标定为 $\tilde{\Omega} \in [0, 1]$ 以适应神经元。总操作时间 $T = 1$ 被均匀地分为 $n = 100$ 个控制脉冲。每个脉冲驱动量子比特的时间间隔为 $\Delta t = 0.01$ 。为了节省计算资源, 仪表的位置空间位于 $q \in [-50, 50]$, 均匀分割为 $\Delta x = 1$, 这对于 $g = 1$ 而言足够大。因此, 动量算符 p 由 $[q, p] = i\hbar$ 和边界条

件构建。集体量子系统的密度矩阵的大小为 202×202 。粗粒度的位置空间导致整数编号的弱值 q_0 , 其被重新标定为 $\tilde{q}_0 = (q_0 + 50)/100 \in [0, 1]$ 。因此, 状态被定义为 $s(t_i) = \tilde{\Omega}(t_i - 1), \tilde{q}_0(t_i), i/n, |\rho_{11}(t_i)|, |\rho_{12}(t_i)|, |\rho_{21}(t_i)|, |\rho_{22}(t_i)|$, 包括上一个动作作为重新标定的脉冲、重新标定的弱值、当前系统时间和密度矩阵元素。强化学习状态由 Agent 观察, Agent 是一个具有三个全连接隐藏层和 64 个神经元的 ANN, 激活函数为 ReLU, 通过环境的数值模拟部分演化到下一个状态, 环境接收来自 Agent 的动作。我们在图 3.2 中展示了强化学习环境的示意流程图, 以便更好地理解。

3.2.3 模型训练与评估

我们为在存在失谐、退相干和弛豫的情况下推动量子比特的三个单独模型进行训练, 这些情况分别发生在 X 方向。Agent 模型近似最优策略, 最大化累积的人工奖励。在奖励函数的设计上, 我们保持了通用性, 因为对脉冲形状我们没有特定的偏好。对于 $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$ 的任务, 我们每个时间步奖励 Agent $r(t_i) = |\rho_{22}(t_i) - 1|$, 作为负值, 旨在实现快速翻转操作。如果 ρ_{22} 达到阈值 $|\rho_{22}| > 0.99$, Agent 将获得额外的奖励 1000, 并提前终止计算总奖励的情节。我们还注意到, 如果在最后一个时间步 $|\rho_{11}| > 0.05$, 则罚款为 100, 有助于模型的收敛。

图 3.3 展示了不同误差或噪声下的高保真闭环量子控制。对于 X 方向的弛豫, 我们通过 $|\rho_{22}(t_i)| > 0.99$ 更改了终止条件, 涉及四个相邻的时间步, 这可以防止模型收敛于平凡的共振 π -脉冲。我们使用了 PPO 对 Agent 进行训练, 学习速率为 $1\text{e-}3$, 批处理大小为 20。PPO 是深度强化学习的众所周知的基线算法, 在大多数情况下保证了收敛性。其他超参数采用了 Tensorforce v0.5.3 的默认设置。此外, 我们引入了一个对动作的随机误差, 其特征为标准差为 0.02 的中心化的高斯分布, 相当于在量子系统中实现时变的系统误差。这些模型给出了对系统中系统误差具有鲁棒性的控制脉冲。值得一提的是, 保真度和鲁棒性之间通常存在权衡。在控制系统在失谐、退相干和 X 方向的弛豫下, 我们分别经过大约 2000、3000 和 8000 个情节获得图 3.3 中的模型。

3.2.4 迁移学习

在为特定任务进行训练后，例如在 $\hat{\sigma}_x$ 弛豫下翻转量子比特，如图 3.3(c) 所示，一个机器学习模型在在线服务之前。您可以通过查询来自环境的信息来评估模型，以检查其在线后的有效性。翻转的量子比特可以进行进一步的任务，这些任务与模型的职责无关。通过检查额外任务的结果，而无需查询环境和模型，可以通过评估它来评估模型。一旦经过良好训练的模型的性能偏离其期望，就可以得出结论，即环境中的量子错误或噪声发生了变化，即它们转移到了其他模式，是否可以信任进一步的任务或根本不发生。因此，我们希望在新环境中进行精确控制的另一个模型。与其丢弃当前模型并训练新模型，显然效率低下，不如将 Agent 转移到新环境中进行相同任务，探索其在新环境中适应的能力，而不从头训练。

我们通过从图 3.3(c) 中的训练好的 Agent 开始进行测试。通过直接评估 Agent 在存在失谐 $\Delta = 0.1\Omega$ 、退相干速率 $\Gamma = 0.05$ 和 $\hat{\sigma}_x$ 弛豫速率 $\gamma = 0.05$ 的新环境中的性能，平均最终状态与先前结果显著偏离 [对比图 3.4(a)]，导致保真度下降。此外，我们使用相同的设置对 Agent 进行训练，大约进行了 2000 个周期。通过额外的总周期数的 20%，Agent 在环境发生变化之前恢复了其性能 [对比图 3.4(b)]。

3.3 讨论与展望

在数值实验基础上，我们认为深度强化学习可以用于研究封闭环量子控制。通过在另一个训练环境中进行微调，使用不同的阈值和奖励函数设计，可以进一步提高保真度。有趣的是，我们发现从 Agent 的优化策略在一定程度上是可解释的，如图 3.3(c) 和图 3.4 所示。最大可调谐的拉比频率是 3π ，对于操作时间 $T = 1$ ，这是 π 脉冲的 1.5 倍。Agent 以相对较高的频率驱动量子比特，以更快地达到较大的 ρ_{22} 。这是可以理解的，因为连续测量可以用超算符的语言来描述，影响动力学就像量子噪声一样，通过减小操作时间可以有效地抑制。随后，一旦 ρ_{22} 足够大，脉冲强度会显著减小，收敛到更精确操作的小常数值。因此，在状态演化中，弱测量主导而不是控制脉冲。这也类似于通过重复投影测量将波函数锁定在其本征态上的量子芝诺效应。

在上述结果分析之后，我们进一步讨论这个主题。在此之前我们解释了 RL 环境由量子比特和数值模拟部分组成。量子比特可以是物理的，例如在超导电路、离

子阱、光子学等中构建，或者是在数值实验中使用经典计算机模拟的。在这里，我们再次强调，如果在 RL 状态和奖励中包含了量子信息 ρ_{ii} 或保真度，那么计算量子比特动力学的数值模拟是强制性的。虽然我们可以执行弱测量，提取部分量子信息并将其转换为弱值 q_0 而不破坏量子态，但通过一次测量无法检索到密度矩阵的全部信息。与我们通常在其他经典场景中所做的将量子比特视为黑匣子的方法相比，这一点是不可能的，在那里观察 RL 状态是瞬时且无成本的。相反，我们必须基于动作和反馈计算量子比特动力学，推断在不对量子比特进行操作的情况下推导 ρ_{ii} 。当在量子领域进行流学习时，由于模拟量子动力学是耗时的，例如在我们的数值实验中，一个周期大约需要 7 秒，这变成了一个障碍。然而，实际在量子设备中的实现需要模拟加速约 10^5 倍（与最先进的超导量子比特的 T1 时间相比）。一个可能的解决方案是训练另一个 ANN 来模拟量子系统的动力学，将可用信息作为输入，输出要在没有测量的情况下推导的量子信息。这样的 ANN 的训练需要大量的训练数据和适当的训练方法，这超出了本工作的范围。

避免黑匣子问题的另一种方法是在 RL 状态中排除量子信息。RL 状态可能包含弱值 q_0 和其他经典信息，例如上一个动作、系统时间等。值得提醒的是，在这种情况下，提前终止的阈值标准在这个范式中不再可用。因此，训练环境仅在每个周期结束时通过一次在目标态上的投影测量成功而向 Agent 提供一个常数奖励。然而，由于 q_0 的信噪比太低，Agent 难以学习精确控制。奖励标准还需要一个大的集合（批处理大小）来评估最终量子态的保真度。这样，问题变得更具挑战性，可用于评估 RL 算法。

3.4 结论

在本章节中，我们研究了通过深度强化学习对一个受噪声干扰的量子比特进行闭环量子控制。我们使用了一个高斯仪表通过弱耦合来提取量子比特的信息。在存在失谐、相干衰减和弛豫等典型的系统误差和量子噪声的情况下，我们得到了相应的模型，用于高保真度的比特翻转任务。此外，我们证明了一旦注意到由于噪声和误差变化引起的性能下降，可以执行迁移学习而不是从头开始训练，以使模型适应新的噪声模式。

需要注意的是，通过实时检测由噪声模式变化引起的保真度降低，加以少量训练使得模型在新噪声模式下被校准的过程，即迁移学习，在经典机器学习领域下隶属于少样本学习的领域。我们将在下一章节中由另一角度出发在量子信息中实现少样本学习。

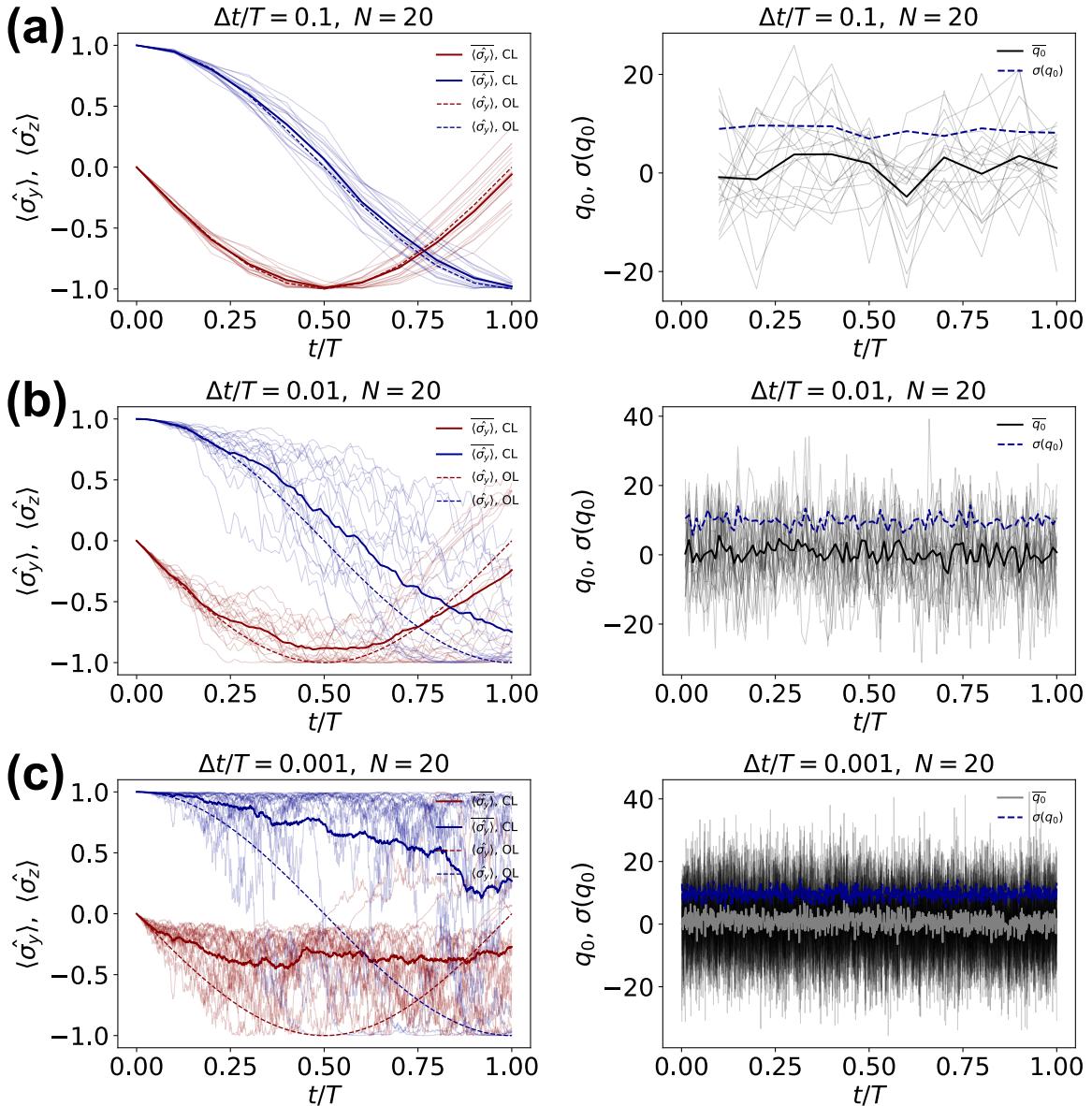


图 3.1 重复测量的量子比特在每个 (a) $\Delta t/T = 0.1$ 、(b) $\Delta t/T = 0.01$ 和 (c) $\Delta t/T = 0.001$ 的弱测量时, 对应于 Y (红色) 和 Z (蓝色) 方向的期望值。量子比特由谐振脉冲驱动, 其无测量的动力学以虚线曲线的形式绘制, 作为经典的开环量子控制 (OL)。通过对 $N = 20$ 个量子比特的轨迹 $\langle \hat{\sigma}_i \rangle$ 进行平均 (阴影曲线), 我们得到了平均轨迹 $\langle \hat{\sigma}_i \rangle$ (实线曲线)。对于闭环量子控制 (CL), 动力学特性在测量时间间隔的尺度上有所变化。相应的来自测量不准确的高斯仪表 $\sigma = 10$ 的弱值反馈 q_0 也被记录并平均为 \bar{q}_0 , 与标准偏差 $\sigma(q_0)$ 相比, 显示出低的信噪比。

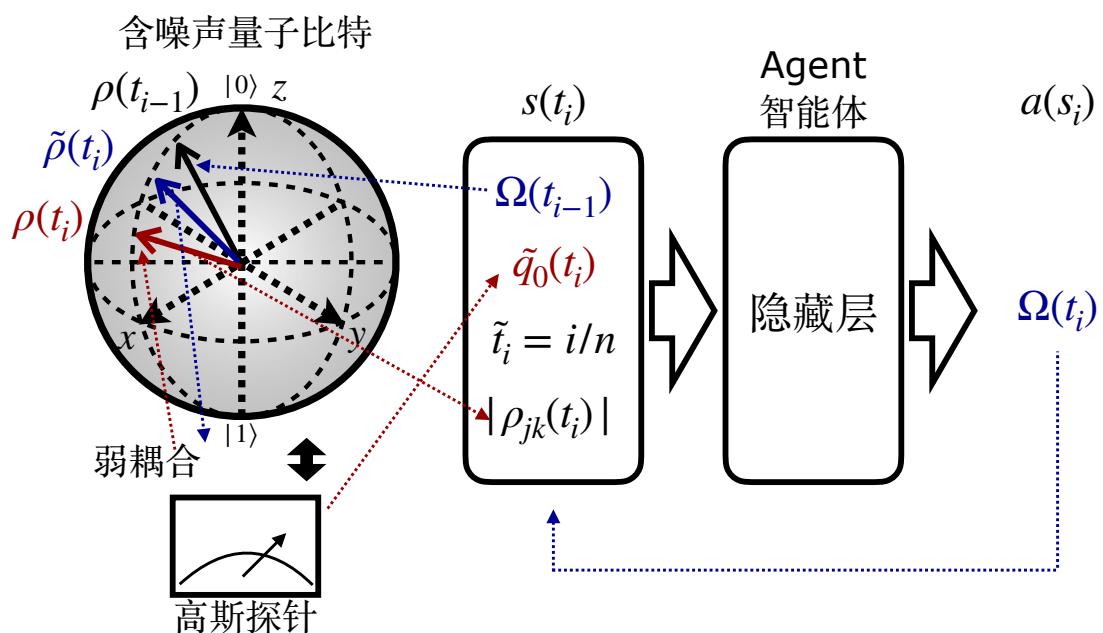


图 3.2 没有奖励函数的环境示意图。量子比特被弱化地与装置耦合，进行信息提取。测量后，其最后的状态由密度矩阵 $\rho(t_{i-1})$ 表征，由最后的动作 $\Omega(t_i)$ 驱动到一个新的未受扰动的状态 $\tilde{\rho}(t_i)$ 。装置对量子比特进行弱测量，得到 $q_0(t_i)$ 的反馈，并将其扰动到状态 $\rho(t_i)$ 。其元素的绝对值，以及最后的动作 $\Omega(t_i)$ 、反馈 $q_0(t_i)$ 和重新标定的系统时间 $t_i = i/n$ ，被定义为强化学习状态 $s(t_i)$ ，由强化学习 Agent（此处为人工神经网络）观察，导致相应的动作 $a(s_i)$ 以将量子比特驱动到其下一个状态。

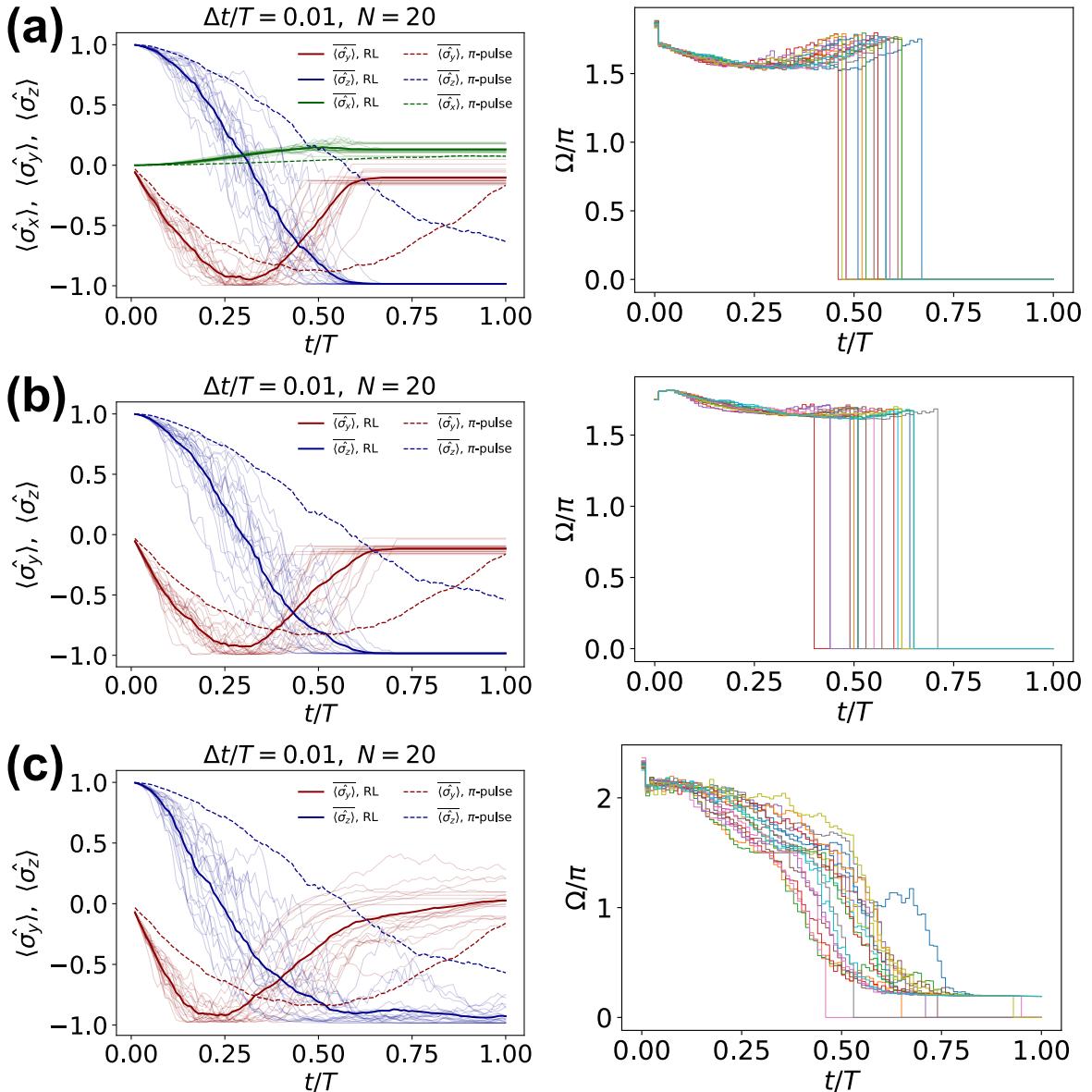


图 3.3 重复测量的量子比特在训练过的深度强化学习 (DRL) Agent 的驱动下在 (a) 失谐、(b) 退相干和 (c) $\hat{\sigma}_x$ 弛豫情况下的期望值，分别在 X (绿色)、 Y (红色) 和 Z (蓝色) 方向上。每个量子比特的动态由阴影曲线 $\langle \hat{\sigma}_i \rangle$ 绘制，对实心曲线 $\langle \hat{\sigma}_i \rangle$ 进行平均。保真度通过 $F = (\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho}|1\rangle\langle 1|\sqrt{\rho}})^2$ 计算，导致每种情况的平均保真度分别为 0.9922、0.9919 和 0.9636，标准差分别为 0.0012、0.0012 和 0.0361。Agent 提供的控制脉冲作为阶跃函数也以不同的颜色绘制。我们设置失谐强度为 $\Delta = 0.05\Omega$ ，退相干速率为 $\Gamma = 0.05$ ，弛豫速率为 $\gamma = 0.05$ 。其他参数与前面的图表相同，已在正文中列出。虚线曲线作为基线是通过对 π -脉冲控制下的量子比特期望值进行平均获得的。

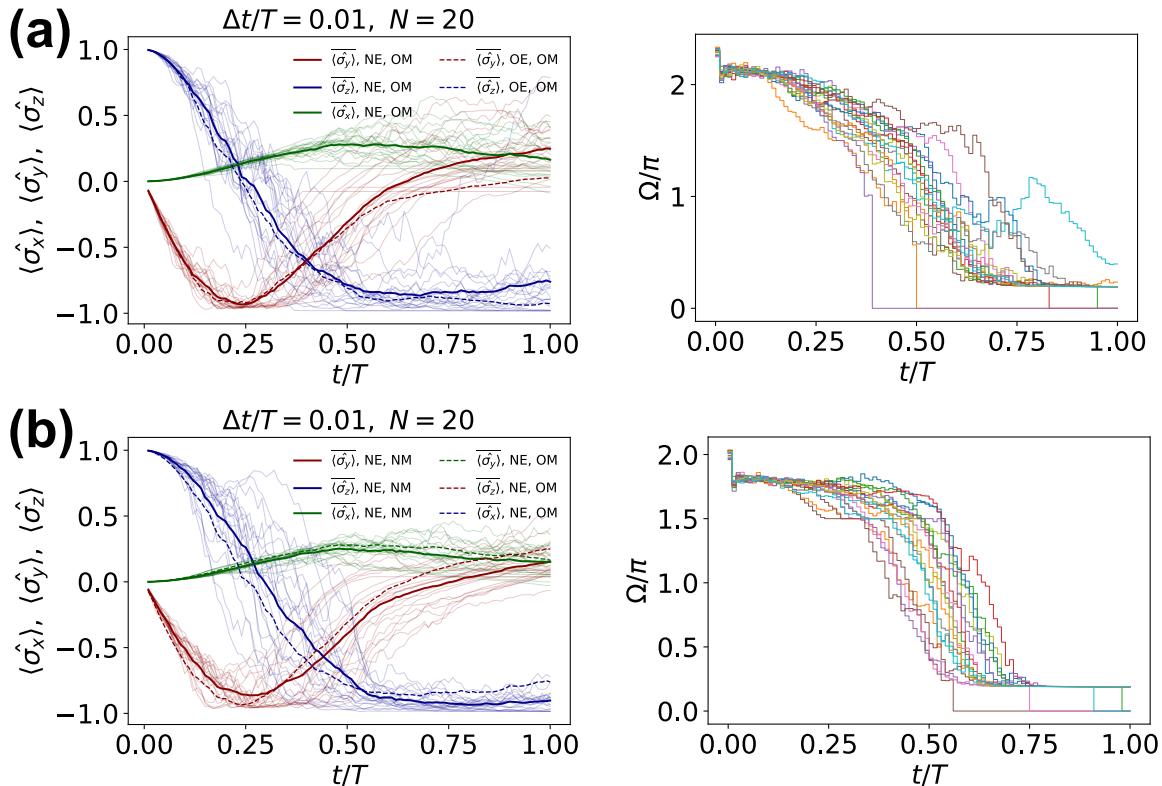


图 3.4 (a) 一旦在混合失谐误差和量子噪声存在的情况下使用图 3.3(c) 中的 Agent (在旧环境 OE 中训练的旧模型 OM) 来驱动量子比特, 所测得的量子比特的期望在 X (绿色)、Y (红色) 和 Z (蓝色) 方向上。图 3.3(c) 中的实线曲线在图中以虚线曲线的形式呈现作为基准。平均保真度从 0.9636 下降到 0.8805, 标准偏差为 0.1874。Agent 输出的不精确控制脉冲, 作为阶跃函数, 以不同颜色绘制。(b) 在大约 2000 个周期的训练之后所测得的期望。图 3.4(a) 中的实线曲线 (旧模型, 新环境 NE) 以虚线曲线的形式绘制作为基准。Agent (新模型 NM) 适应了新环境, 恢复了平均保真度为 0.9513, 标准偏差为 0.0353。Agent 输出的校正控制脉冲, 作为阶跃函数, 以不同颜色绘制。

第四章 主动学习量子信息处理

在上一章节中实现的迁移学习，为我们展示了少样本学习在量子调控中的可行性。事实上，来自于经典机器学习领域有另一类基于算法层面的方案，可以在量子信息领域的问题中实现少样本学习，并结合上一章节中首次出现的来自于物理学的弱测量理论，研究对应的有效信息与系统扰动之间的权衡。

过去的十年中，在使用机器学习征服了复杂的任务的同时，一个关键障碍是收集足够的标记数据既耗时又资源消耗大。因此，模型训练需要某种优化，旨在得到一个训练良好的模型，甚至可以利用大量未标记的数据，这在实际问题中很常见。目前，物理学家也利用机器算法完成量子任务，研究量子系统的性质，并设计物理实验^[68,70-74,104-109]。其中最常用的分支之一，即前面两章中涉及的强化学习量子控制。它还与通过控制测量过程检索量子信息相关^[110-111]，已经扩展到量子强化学习版本^[112]用于最优测量控制^[113-114]。为了最小化测量成本，人们必须设计最优的量子信息检索策略，这符合主动学习（AL）的框架。

主动学习基于这样一个假设：一个模型在少量标记样本上训练的性能可以媲美在所有样本都被标记的数据集上训练的性能^[115-116]。因此，这个框架非常适用于解决前面提到的关键信息问题。简而言之，主动学习考虑标记的成本，即由测量引起的保真度损失。它分析最具信息量的模式（量子态），以提出最小数量的标签（测量），以保证最大的知识收益。除量子信息检索之外，主动学习还被用于辅助实验控制^[75,117-118]，计算物理学^[119-122]，量子机器学习^[123-125]等领域，并取得了令人信服的表现。基于这些事实，我们得出结论，如果物理问题可以等效地表示为分类问题，那么大多数物理问题都可以通过主动学习来有效地研究。因此，标记成本不再仅限于量子信息检索中的保真度损失，而是扩展到通过实验方案减少样本不确定性的操作成本，包括进行数值模拟或物理实验，以分析主动学习查询的最具信息量的模式。

在本章节中，我们提出了一个框架，用于通过主动学习算法对二元分类的最佳实验设计进行决策。为了实现这个任务，在每次迭代中，在弱测量的帮助下，对标记具有最大不确定性的量子比特后，估计模型被更新。这允许在轻微扰动量子比特的

同时提取部分信息，即在保真度损失的意义上降低成本。在我们的数值模拟中，我们观察到仅标记了 5% 的样本，我们就能够达到近 90% 的任务估计正确率。我们还展示了主动学习算法在物理学分类问题中的典型应用。我们专注于多分类问题，其中不同的采样策略不再等效。提出了在三能级系统中的量子信息检索，这允许使用六个纠缠的光子进行实验实现。另一个例子来自多体物理学，主动学习成功地预测了相界，而只用少于 2% 的样本通过相检测进行标记。我们还验证了主动学习通过查询最具信息量的样本来保证最佳模型训练，因此正确率几乎无法在没有新的人工标记样本的情况下得到改进。

4.1 主动学习理论

给定一组带有标签的样本 $X = \mathbf{x}_i, y_i | i = 1^l$ ，其中输入 $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X}$ ， \mathcal{X} 定义在 d 维复数空间 \mathbb{C}^d 的参数空间中。我们考虑一个分类问题，寻找一个模型 θ 来预测输出，对应于类别 $y_i \in \mathcal{C} = c_1, \dots, c_m$ ，对于一个 m 类问题。需要一组未标记的样本 $U = \mathbf{x}_i | i = l + 1^{l+u} \in \mathcal{X}$ 来应用主动学习，其中 $u \gg l$ ，即有更多的样本作为候选被标记，而不仅仅是标记池中的那些。主动学习与监督学习不同，后者使用一个固定的标记集对模型进行训练。主动学习遵循一个迭代过程，每次迭代都向训练集 X 中添加来自 U 的最具信息样本，以提高模型性能；目标是在只有很少数量的样本在 U 中被手动标记的情况下，快速找到令人满意的模型。现在的关键问题是哪些样本包含最多的信息应该被选择和标记？通常，模型进行选择，建议选择关于结果具有最大不确定性的样本。因此，通过标记这些样本提供更多信息，通过将它们添加到训练集 X 中来受益于学习过程。尽管主动学习像半监督学习 (SSL) 一样迭代地更新其训练集，但它们并不是常常混淆的相同概念。在此我们通过一个示意图 [参见图 4.1(a)] 澄清了两者之间的区别。SSL 也是基于带有标签的训练样本 X 和一组未标记样本 U 。主动学习与 SSL 之间的主要区别在于后者不是选择最大不确定性的最具信息样本，而是利用模型 θ ，选择具有其类别 y_i 最大确定性的样本 $\mathbf{x}_i \in U$ ，将其标记为 y_i ，因为可以假设错误标记的概率是最小的。尽管主动学习可以与 SSL 结合使用，例如，在主动学习的初始标签选择后通过 SSL 对模型进行训练，但这并不会显著有益于学习过程。

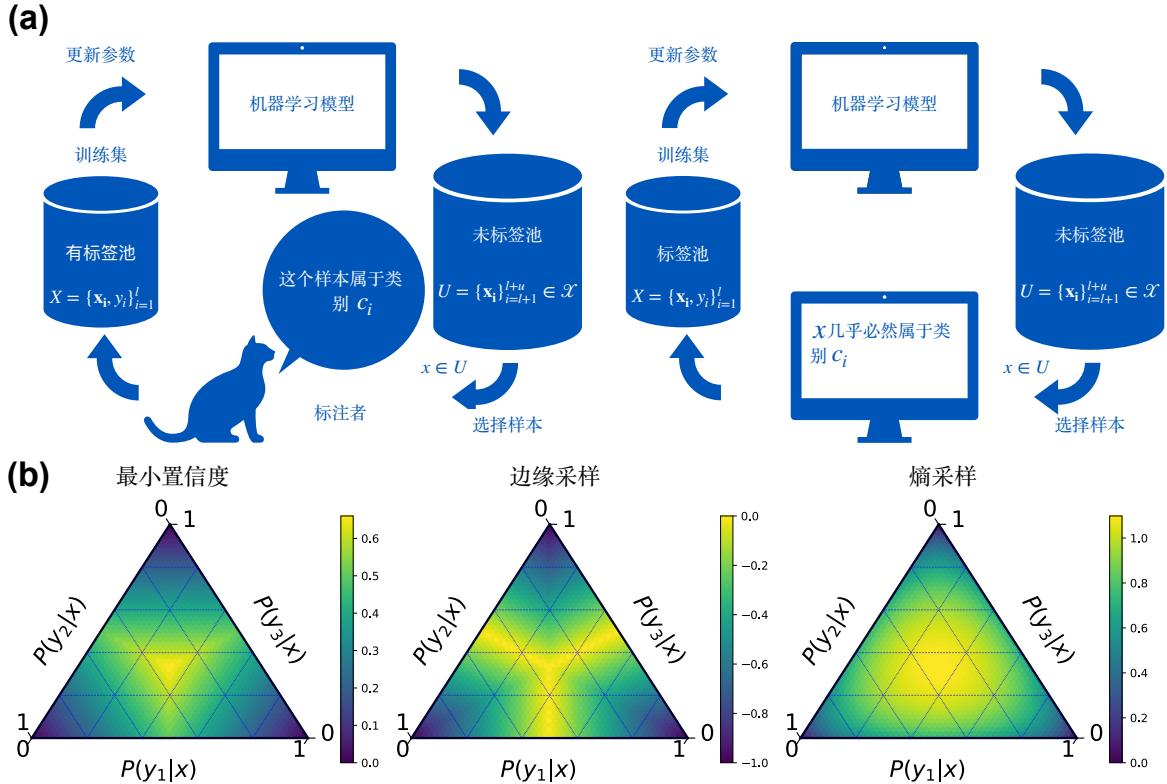


图 4.1 (a) 基于池的主动学习循环 (左侧) 和半监督学习循环 (右侧) 的示意图。(b) 在三类别分类问题中, 展示了最小置信度、边际采样和熵采样的查询行为, 通过热图进行说明。最具信息的查询区域从中心辐射出去。具有最高概率的标签位于靠近角落的位置, 而相反的边缘显示了其余类别的最低概率。

为了对样本进行排序并在标记后决定哪个候选样本应该转移到 X , 有各种方法允许我们评估不确定性。有两种广泛使用的策略, 即所谓的不确定性采样 (USAMP) 和委员会查询 (QBC)^[126]。USAMP 仅使用单个模型根据估计器选择样本^[127]。QBC 利用由多个模型组成的委员会, 选择具有最小共识的样本, 共识可以通过投票熵或 Kullback-Leibler 散度进行测量^[128]。为了在多类问题中实现 USAMP, 我们介绍了三种策略, 如下所示。最小置信度标准基于根据预测对样本进行标记的最小置信度

$$\begin{aligned} x_{LC} &= \underset{x}{\operatorname{argmax}} [1 - P_\theta(\hat{y}|x)], \\ \hat{y} &= \underset{y}{\operatorname{argmax}} [P_\theta(y|x)], \end{aligned} \quad (4.1)$$

其中 \hat{y} 是根据概率分类模型 θ 得出的最有可能的类别。人们注意到该模型仅考虑最有可能的标签 \hat{y} , 失去了其他标签的信息。一个自然的扩展是, 第一和第二最有可能的类别标签 \hat{y}_1 和 \hat{y}_2 包含更多信息, 如果构建相应的标准可能会更好。因此, 给出了

一种更具信息性的方法，称为边缘采样

$$x_M = \operatorname{argmin}_x [P_\theta(\hat{y}_1|x) - P_\theta(\hat{y}_2|x)], \quad (4.2)$$

灵感来自于这样一个事实，即可以轻松地对分隔较大边缘的样本进行分类，因此具有较小边缘的最模糊的样本^[129]。因此，具有最小边缘的样本是最有信息的，因为从人类注释者那里知道其真实标签对于区分 m 类最有价值。显然，当考虑所有类别的信息时，可以通过 Shannon 理论^[130]对信息熵进行量化，如下所示

$$x_E = \operatorname{argmax}_x \left[- \sum_i P_\theta(\hat{y}_i|x) \log P_\theta(\hat{y}_i|x) \right]. \quad (4.3)$$

信息熵度量表示用于表示给定信息所需的信息量，通常被认为是不确定性的评估，在 ML 的各个方面广泛使用。这些度量之间的隐含关系在处理多类问题时导致了不同的查询行为 [c.f. Fig. 4.1(b)]，尤其是当样本的类别分布存在偏差时，可能导致训练后的性能差异。

委员会查询 (Query-by-Committee, QBC) 也是基于不确定性的一种方法，但从不同的角度。在这种情况下，主要思想是建立一个由多个模型组成的委员会（通常称为专家委员会），并关注那些在不同模型之间存在较大差异的样本。因此，QBC 将标记那些在委员会模型之间造成最大分歧的样本；显然，评估这种差异的度量是一个关键问题。例如，在一个分类问题中，如果不同模型根据多数投票策略发现一个样本属于不同类别的概率相等，那么这将是待标记的样本。这种方法在不同模型实际上代表数据空间中不同区域时尤其有趣；它们之间的差异越大且越互补，委员会的整体性能就越好。这对于委员会的性能通常是正确的，但对于实施健全的基于 QBC 的主动学习是非常重要的。尽管这可能暗示更喜欢大型委员会，但仅由两三个模型组成的小委员会也报告了良好的结果。衡量模型之间差异的方法有很多，其中最常见的方法是投票熵和 Kullback-Leibler (KL) 散度。前者认为最具信息的样本是

$$x_{VE} = \operatorname{argmax}_x \left(- \sum_i \frac{V(y_i)}{C} \log \frac{V(y_i)}{C} \right), \quad (4.4)$$

其中 y_i 指的是所有可能的标签， $V(y_i)$ 是委员会成员为标签 y_i 投票的次数， C 是委

员会的规模。根据 **KL** 散度进行标记的样本为

$$x_{\text{KL}} = \underset{x}{\operatorname{argmax}} \left(\frac{1}{C} \sum_{c=1}^C D(P_{\theta^{(c)}} \| P_{\mathcal{C}}) \right), \quad D(P_{\theta^{(c)}} \| P_{\mathcal{C}}) = \sum_i P_{\theta^{(c)}}(y_i|x) \log \frac{P_{\theta^{(c)}}(y_i|x)}{P_{\mathcal{C}}(y_i|x)} \quad (4.5)$$

其中 $\theta^{(c)}$ 代表委员会的一个模型, \mathcal{C} 是整个委员会, 因此 $P_{\mathcal{C}}(y_i|x) = \frac{1}{C} \sum_{c=1}^C P_{\theta^{(c)}}(y_i|x)$ 给出 y_i 是正确标签的概率。**KL** 散度旨在找到单个委员会成员的标签分布与共识之间的最大平均差异。

与此同时, 还提出了许多其他主动学习方法, 其目标始终是标记最具信息的样本。其中两个最有趣的提案是基于分析预期模型变化、预期误差减小和方差减小。基于密度分析的方法也值得一提。预期模型变化的方法是基于标记会导致模型变化最大的样本。评估模型变化的方法有很多种, 其中最常见的是期望梯度长度 (**EGL**), 它选择对模型参数影响最大的样本。显然, 应用 **EGL** 的首要条件是要有一个通过梯度策略解决的学习问题, 这是最常见的情况。然后, 通过训练梯度长度的变化来评估模型的变化。因此, 待标记的实例 x_{MC} 是使训练梯度长度最大的实例

$$x_{MC} = \underset{x}{\operatorname{argmax}} \sum_i P_{\theta}(y_i|x) |\nabla J_{\theta}(\mathcal{X}, \cup \langle x, y_i \rangle)| \quad (4.6)$$

其中 $\nabla J_{\theta}(\mathcal{X})$ 是目标函数 J 关于参数 θ 的梯度, $|\cdot|$ 表示欧几里得范数。由于 $|\nabla J_{\theta}(\mathcal{X})|$ 在前一次迭代中应接近零, 如果 J 收敛, 那么 $|\nabla J_{\theta}(\mathcal{X} \cup \langle x, y_i \rangle)| \approx |\nabla J_{\theta}(\langle x, y_i \rangle)|$ 。

基于预期误差减小的方法关注模型的误差, 选择涉及误差最大减小的样本:

$$x_{\text{ER}} = \underset{x}{\operatorname{argmax}} \sum_i P_{\theta}(y_i|x) \left(\sum_{u=1}^U 1 - P_{\theta^{+\langle x, y_i \rangle}}(\hat{y}|x^{(u)}) \right), \quad (4.7)$$

其中 $\theta^{+\langle x, y_i \rangle}$ 表示在 \mathcal{X} 中包含 $\langle x, y_i \rangle$ 后被训练的新模型。该方法的一种变体旨在最小化模型的方差。

减小误差和减小方差都分析整个输入数据集而不是单个实例。因此, 它们倾向于查询的离群值比像 **USamp**、**QBC** 或 **EGL** 这样的策略更少。避免查询离群值的另一种方法来自基于密度的方法 (**DBMs**), 实际上与前面提到的任何方法都是兼容且互补的。其思想是向查询策略引入一个附加项, 其中包含关于数据分布的信息; 由此选择待标记的样本不仅根据对相应标签的不确定性或分歧, 还考虑到该样本代表数据集。

4.2 量子比特信息检索

4.2.1 弱测量

我们推导 Von Neumann 测量的一种扩展，用于从量子系统中提取信息而不破坏其量子性质，并区别于绪论中介绍的标准 AAV 形式的弱测量。这包括两个步骤：将量子系统耦合到一个辅助仪表以获得一个新系统，然后在辅助仪表上进行投影测量。假设辅助仪表的高斯波函数如下

$$|\Phi\rangle = \int \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{q^2}{4\sigma^2}\right) |q\rangle dq, \quad (4.8)$$

其中 σ 是量子仪表位置的标准偏差， \hat{q} 是位置算符， $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ 。相应地，存在共轭动量算符 \hat{p} ，满足对易关系 $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ 。辅助仪表与系统之间的耦合遵循以下相互作用哈密顿量

$$H_I(t) = g(t)\hat{p} \otimes \hat{A}, \quad (4.9)$$

其中 $g(t)$ 是时间相关的耦合强度， \hat{A} 是我们想要测量的量的算符，其本征矢量为 $|a_j\rangle$ ，满足 $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ 。我们要求辅助仪表的动量足够小，这导致动量的不确定性小而位置 q 的不确定性大。时间相关的耦合强度现在满足

$$\int_0^{t_0} g(t)dt = 1, \quad (4.10)$$

因此，测量的强度不再显含耦合常数，只由仪表的不确定性决定。现在，量子系统的初始量子态为 $|\Phi\rangle \otimes |\Psi\rangle$ ，在相互作用哈密顿量下演化为 $\exp[-i \int_0^t H_I(t')dt']$ ($\hbar = 1$)。可以看出，在 t_0 内，相互作用哈密顿量将探测器的每个纠缠波函数和待测量量的本征矢量 $|\Psi\rangle \otimes |a_j\rangle$ 上的 \hat{q} 变为 $\hat{q} + a_j$ ，

$$\hat{q}(t_0) - \hat{q}(0) = \int_0^{t_0} dt \frac{\partial \hat{q}}{\partial t} = i \int_0^{t_0} [H_I, \hat{q}] dt = a_j. \quad (4.11)$$

波函数的演化可以写成

$$\exp(-i\hat{p} \otimes \hat{A})|\Phi(q)\rangle \otimes |\Psi\rangle = \cos \frac{\alpha}{2} |\Phi(q - a_1)\rangle \otimes |a_1\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} |\Phi(q - a_2)\rangle \otimes |a_2\rangle \quad (4.12)$$

通过这种方式，我们可以通过用任意不确定性测量辅助仪表的位置 q 来获得比特的 \hat{A} ，因为弱测量方案要求 $\sigma \gg \max_j(a_j)$ 。仪表位置的概率分布为

$$P(q) = (2\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \left[\cos^2 \frac{\alpha}{2} \exp\left(-\frac{(q-a_1)^2}{2\sigma^2}\right) + \sin^2 \frac{\alpha}{2} \exp\left(-\frac{(q-a_2)^2}{2\sigma^2}\right) \right]. \quad (4.13)$$

如果我们对比特的 Z 方向进行弱测量， $\hat{A} = \hat{\sigma}_z$ ，导致 $|a_1\rangle = |0\rangle$, $|a_2\rangle = |1\rangle$ ，以及 $a_1, a_2 = \pm 1$ ，则概率 $P(q)$ 可以近似为

$$P(q) \approx \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{(q-\cos\alpha)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (4.14)$$

在对仪表进行量子测量后，系统的归一化波函数为

$$|\Psi_f\rangle \propto \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \cos \frac{\alpha}{2} \exp\left[-\frac{(q_0-1)^2}{4\sigma^2}\right] |0\rangle + \sin \frac{\alpha}{2} \exp\left[-\frac{(q_0+1)^2}{4\sigma^2}\right] |1\rangle, \quad (4.15)$$

其中 q_0 是仪表读数的测量反馈。如果 σ 足够大，波函数 $|\Psi_f\rangle$ 就接近于初始波函数 $|\Psi\rangle$ ；即，比特没有被破坏，而是受到了轻微的干扰。虽然弱测量保护了量子比特免于坍缩，但由于不确定性，从系统中提取的信息较直接测量要少，这也增加了标签错误。当我们只有一个 $|\Psi\rangle$ 比特时，这种权衡是不可避免的，但是如果引入额外的资源，标签错误率可以降低。例如，如果有 n 个比特以同样的状态 $|\Psi\rangle$ 准备成一个系综， $\langle\hat{A}\rangle$ 的不确定性可以通过 $1/\sqrt{n}$ 来减小。

4.2.2 任务设计

在这个背景下，主动学习被应用于量子信息检索的二元分类问题。图 4.2(a) 展示了 Alice 准备了一个 $21 \times 21 = 441$ 个量子比特的格点的量子态，这可以通过变换 $|0\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ 和 $|1\rangle \rightarrow |\downarrow\rangle$ 映射到一个自旋系统。分类的信息可以被编码在 $\hat{\sigma}_z$ 中，例如对于类别 0, $\langle\hat{\sigma}_z\rangle > 0$ ，对于类别 1, $\langle\hat{\sigma}_z\rangle < 0$ 。 n 份正确标记的量子系统副本，我们称之为 Oracle，被发送给 Bob 进行分类。假设 Bob 知道量子系统可以被线性建模，第一轮尝试是通过使用两个具有不同标签的 Oracle 进行 USAMP（见图 4.2(b)）来训练支持向量机 (SVM)。我们标记候选样本 \mathbf{x} ，该样本是在其他未标记样本中基于其不确定性的选择的，即其相对于当前超平面的有效距离。图 4.2(c) 展示了基于 QBC 的更复杂的主动学习方案，包括由四个模型组成的委员会：SVM、粗糙的高斯 SVM、精细的决策树和线性分割。因此，Bob 询问更多的 Oracle，因为委员会需要更多的信息

来进行最小建模。在通过投票熵评估不一致性并在其他具有最大委员会不一致性的样本中选择候选项的第一轮后，候选项根据与 USAMP 相同的规则在其他具有最大委员会不一致性的样本中选择。与经典标记不同，通过弱测量标记样本时我们有很高的误差率，因为该方案需要具有较大 σ 的不准确仪表。在图 4.2(d) 中，我们绘制了在对量子系统进行弱测量后每个量子比特的弱值。为了减小不确定性，我们需要对 n 份副本的弱值进行平均，从而使我们能够正确标记每个样本。

4.2.3 数值实验

现在，我们通过定义在量子测量中标记的代价来进行更为定量的研究，代价以保真度损失为度量。一旦我们确定了要标记的样本数量或保真度阈值，就可以公平地比较不同的采样策略和测量方法。在这里，由于类别平衡，我们通过各分类模型的正确率评估它们的性能。当类别不平衡时，可以使用其他性能指标，例如 AUC 或 ROC。在图 4.3 中，我们将两种最广泛接受的策略，即 USAMP 和 QBC，与随机采样进行了比较。实验从三个用于 USAMP 的标记样本和五个用于 QBC 的标记样本开始。结果表明，在适当选择委员会的情况下，QBC 可以比 USAMP 更高效，因为在不同数量的标记样本下，其正确率更高。

我们还注意到一个异常现象，即在较小的 n 下，QBC 胜过其他方法，而且标记样本较少。这是因为训练集包含了 Alice 提供的四个正确标记的 Oracle 和由 Bob 标记的样本，当 n 较小时，这些样本可能以很高的概率被错误标记。当 n 足够大时，这种现象变得微不足道，如图 4.3(d) 所示；即几乎每个样本都被无误地标记。在图 4.4 中，我们比较了 USAMP 中强测量和弱测量在不同保真度阈值下的 AL。我们测量每个样本以更新我们的模型，直到系统的保真度达到阈值。相比于强测量，弱测量允许我们标记更多的样本。对于保真度损失的计算，我们将状态的保真度乘以测量后每个标记量子比特的 n 个副本的最小保真度。同时，较小的 n 也可能会增加训练集的大小，因为较大的保真度损失不太可能发生。这种情况涉及到增加更多样本导致的信息增加与每个样本更高准确性之间的权衡。

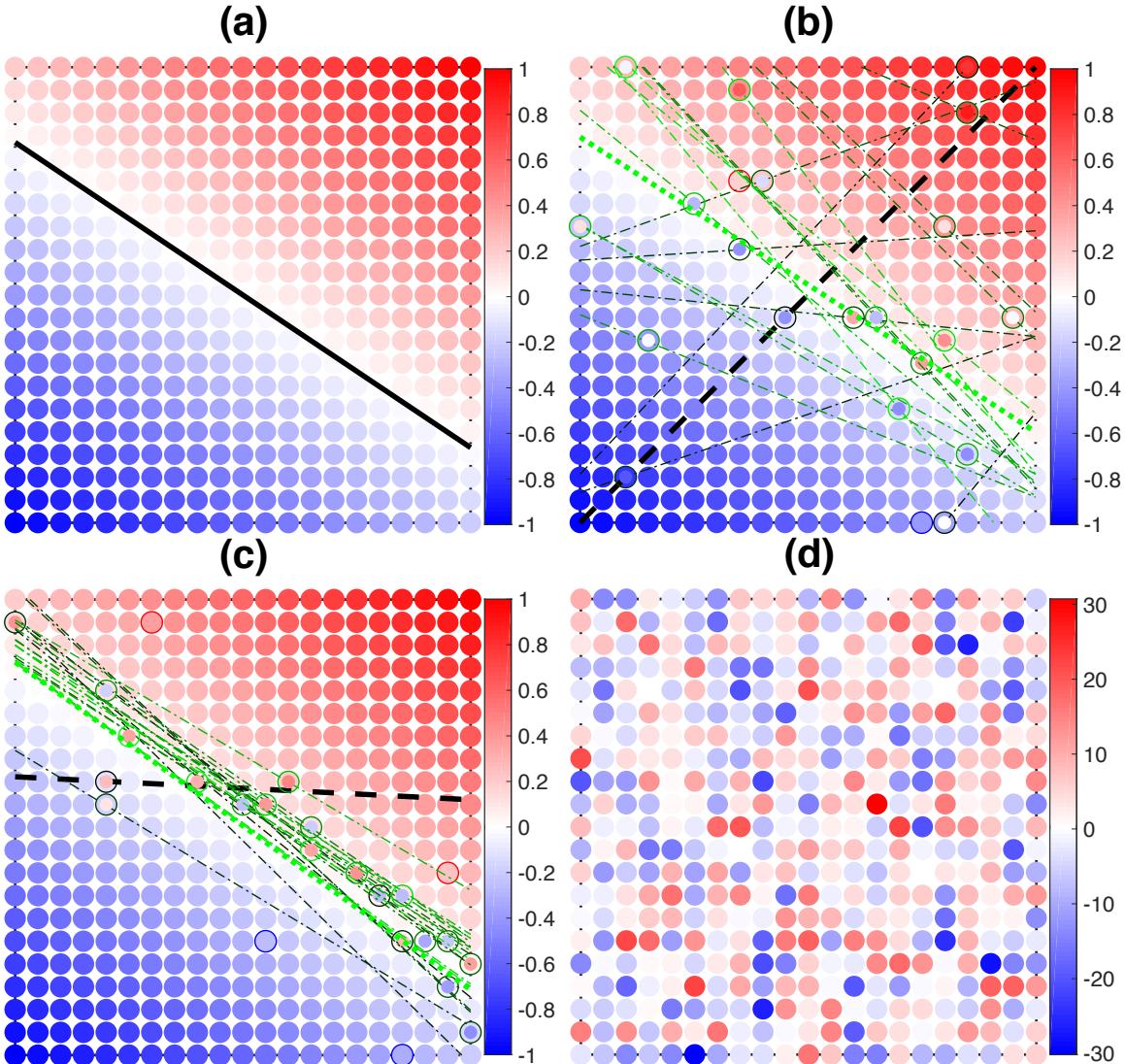


图 4.2 (a) 由 Alice 准备用于二元分类的 $21 \times 21 = 441$ 个量子比特的格点上的量子态。在颜色映射中, 绘制了 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle = \cos \alpha \in [-1, 1]$ 的值, 从蓝色 (-1) 到红色 (1)。(b) USAMP 方案。粗的黑色虚线表示初始 SVM, 将格点分为两部分, 使用 Alice 提供的两个 Oracle 的标准化支持向量 (由红色和蓝色圈出)。带有从黑色到绿色的颜色的细虚点线说明了模型的更新, 其中根据 USAMP 策略选择的候选样本在相同颜色中被圈出。通过具有 $\sigma = 10$ 和 $n = 500$ 的高斯弱测量识别其 n 份副本中的最小保真度的量子比特。我们已经用不同颜色的较小圆圈覆盖了它们的初始状态, 具体取决于结果。粗的绿色虚线表示通过弱测量标记 20 个样本后的 SVM。(c) QBC 方案。我们将 SVM 的演变呈现为我们委员会中的一个模型, 其中其他参数保持不变。(d) 仅在量子态上进行一次弱测量后的所有量子比特的弱值。这些弱值包含的信息很少, 对于分类几乎没有用处, 而分类需要对量子态的 n 份副本进行统计上显著的信息。.

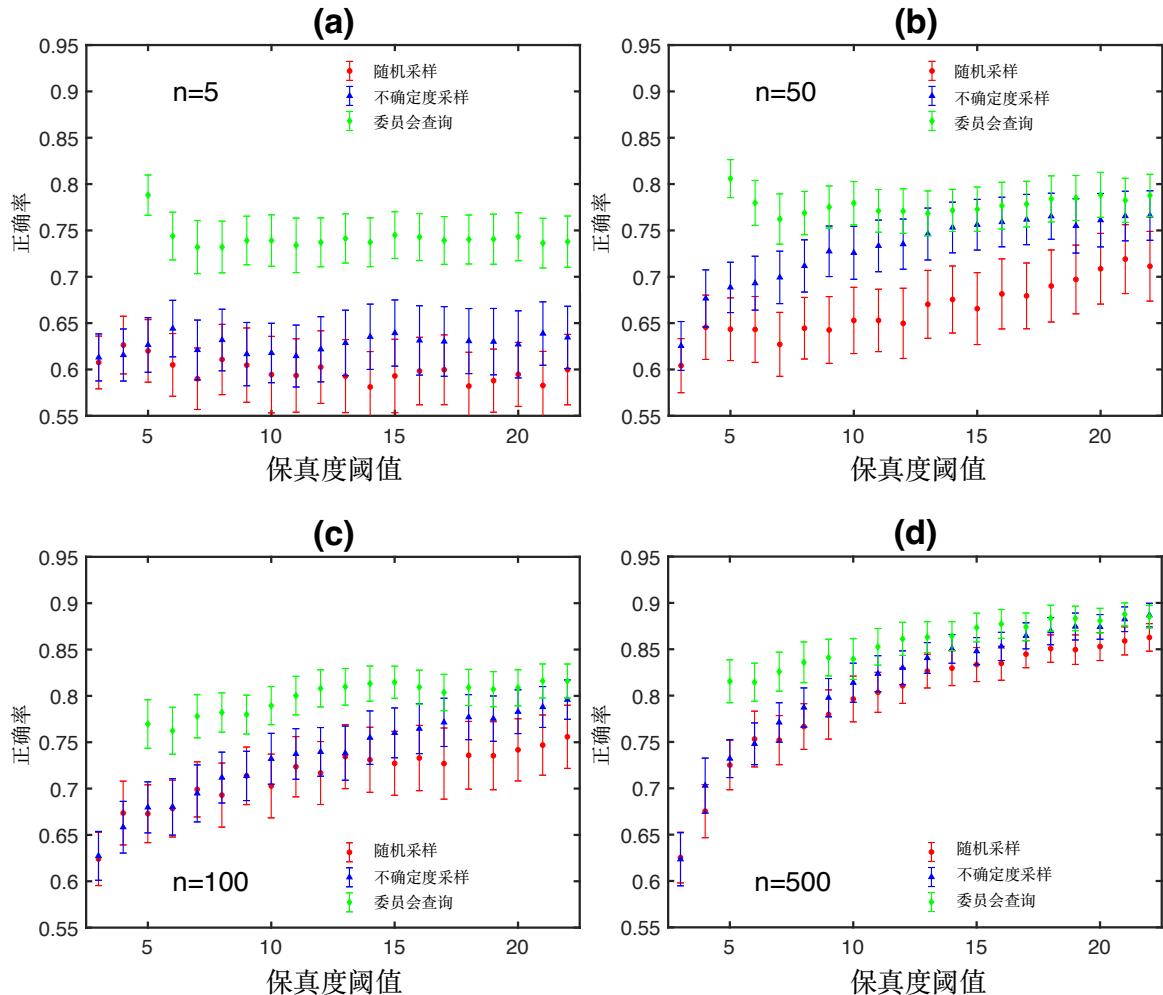


图 4.3 分类模型 (SVM) 的平均正确率，其中使用不同的采样策略，包括随机采样（红色点），USAMP（蓝色三角形）和 QBC（绿色菱形）。误差条表示 0.95 的置信区间。每个量子比特在一个集合上进行采样，其中 (a) 为 5，(b) 为 50，(c) 为 100，(d) 为 500。其他参数与图 4.2 中的相同。

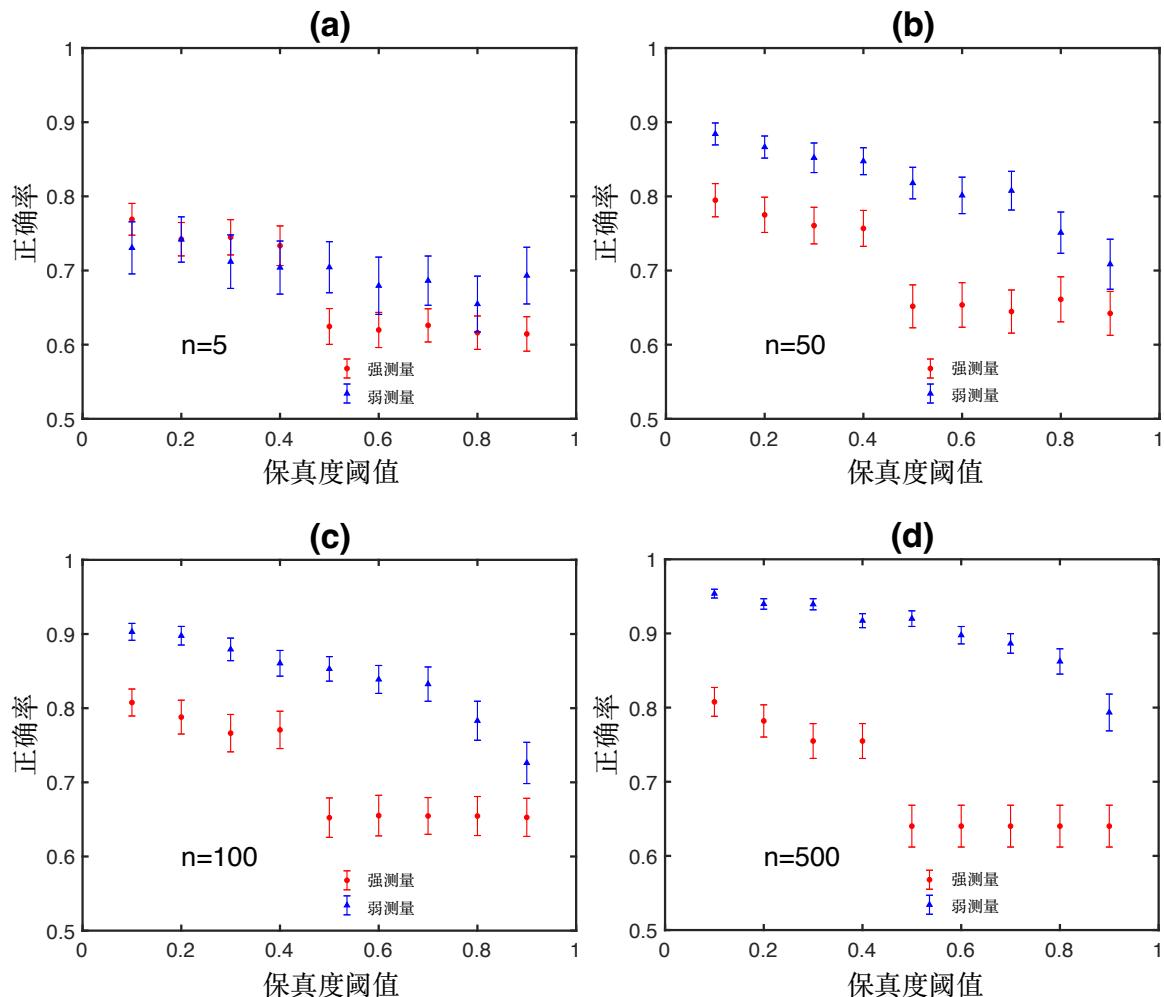


图 4.4 分类模型 (SVM) 使用 USAMP 策略的平均正确率。每个量子比特通过强测量进行标记（红色点）和通过弱测量进行标记（蓝色三角形）。参数与先前的图中保持一致。

4.2.4 结论与讨论

我们介绍了用于通过最优实验设计检索量子信息的主动学习方案。此外，我们通过通过弱测量从量子比特中提取信息来对完整的二进制分类任务进行了举例说明。此外，我们比较了使用 USAMP、QBC 和随机抽样的选择策略，以及使用弱测量和强测量的标记技术。对于前者，我们的数值模拟结果表明，仅使用 5% 的标记样本，我们就实现了近 90% 的估计正确率。我们观察到弱测量策略优于强测量。我们的框架包括权衡和动态预测的概念，其效率可能与生成模型相关^[131]。这项工作的一个直接扩展将是在 qudits 上解决多类分类问题，在这种情况下，USAMP 的其他方法，如边缘抽样或基于熵的抽样，不再等效于最小置信度，这在下一节中得到展示。另一个潜在的应用平台候选者是量子记忆电阻器^[132]，因为它们基于允许通过反馈控制其与环境的耦合的弱测量方案。增强型主动学习的量子记忆电阻器可能是用于非马尔可夫系统或神经形态量子计算的更有效的构建块。

4.3 三能级系统信息检索

根据量子信息理论，带有更高 Hilbert 空间维度的载体比作为两级系统的量子比特编码更多信息。在这里，我们考虑了一个在二进制分类问题中的非平凡扩展，将量子比特替换为量子三能级系统。通过量子测量从量子三能级系统中提取信息用于分类，其中标记的成本被定义为一致性的保真度损失。

4.3.1 密度矩阵重建

量子三能级系统是一个允许在能级之间进行独立转换的三能级系统，可以通过从双光子系统中选择的逻辑基态构造。我们只考虑一个任意的量子三能级波函数 $|\Psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle + c_3|2\rangle$ ，通过量子测量进行标记，而不关注其物理实现。该量子三能级系统处于三个正交基的叠加态，其中每个基表示一个类别。一旦查询了一个量子三能级系统，我们的目标是通过量子测量检索其每个基的占据情况，并将其标记为人类注释者的最大占用类别。由于弱测量被引入为从量子系统中提取信息而不导致其崩溃的 Von Neumann 测量的扩展，我们在我们的框架中使用了弱测量以减小保真度损失。用于标记二进制类别的弱测量可以通过将一个辅助比特作为仪表耦

合到比特上来简化。期望值 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle$ 可以通过来自仪表的弱值来估计，将样本量子比特分类为 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle > 0$ 的类别 0，而对于 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle < 0$ 的类别 1。然而，对于自旋-1 算符 Z 方向的期望值 $\langle \hat{S}_z \rangle = |c_1|^2 - |c_3|^2$ 不再包含足够的信息来挑选出最大占用的基。例如，如果 $P(c_1) = 0.1$, $P(c_2) = 0.7$ 和 $P(c_3) = 0.2$, 则量子三能级系统可以是类别 2，或者如果 $P(c_1) = 0.3$, $P(c_2) = 0.3$ 和 $P(c_3) = 0.4$, 则它可以是类别 3，但是它们都具有相同的期望值 $\langle \hat{S}_z \rangle = -0.1$ 。在量子三能级系统中，等效评估最大占用的技巧不再可用，因此需要检索每个基的振幅或系统密度矩阵的对角元。我们使用最近提出的（精确的）直接重构方案^[133]，通过弱测量来检索量子三能级系统中的信息，允许任意耦合强度而无需近似。

弱测量方案通常包括两个步骤：将量子系统与量子仪表耦合形成一个新系统，然后在仪表上执行投影测量。我们不使用位置的高斯仪表，而是使用辅助比特作为两级仪表。我们通过以下相互作用哈密顿量将辅助比特与 qutrit 耦合：

$$H_I(t) = g(t)\hat{A} \otimes Y, \quad (4.16)$$

其中 $g(t)$ 是时间相关的耦合， \hat{A} 是待弱测量的可观测量， Y 是 Y 方向上的自旋-1/2 Pauli 算符。qutrit 在 t_0 之后与仪表耦合，由以下幺正算符描述：

$$U = \mathcal{T} \exp \left[-i \int_0^{t_0} g(t) \hat{A} \otimes Y dt \right] = \exp \left(-i\theta \hat{A} \otimes Y \right). \quad (4.17)$$

此外，表达式(4.17)可以改写为

$$U = (\mathbb{I} - \Pi) \otimes \mathbb{I} + \Pi \otimes \exp(-i\theta Y), \quad (4.18)$$

当可观测量 \hat{A} 是投影算符时，对所有耦合 θ 都有效。通过任意弱测量强度可以实现对密度矩阵的精确直接重构，其中 $\theta = \pi/2$ 提供了最大强度的测量。为了检索携带在 qutrit 中的量子信息，需要两个辅助比特 A 和 B 作为仪表。初始系统由以下描述：

$$\rho_{\text{ini}} = \rho \otimes |0\rangle_A \langle 0| \otimes |0\rangle_B \langle 0|, \quad (4.19)$$

其中密度矩阵 ρ_{jk} 的元素可以在 d 维希尔伯特空间的正交基中表示（对于 qutrit, $d = 3$ ，正交基为 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ ）。我们将投影算符 $\Pi_{a_j} = |a_j\rangle \langle a_j|$ 耦合到第一个辅助比特

的 Y 方向, 给出演化算符

$$U_{A,j} = (\mathbb{I} - \Pi_{a_j}) \otimes \mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B + \Pi_{a_j} \otimes \exp(-i\theta_A Y_A) \otimes \mathbb{I}_B, \quad (4.20)$$

然后耦合到第二个辅助比特 $\Pi_{b_0} = |b_0\rangle\langle b_0|$

$$U_B = (\mathbb{I} - \Pi_{b_0}) \otimes \mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B + \Pi_{b_0} \otimes \mathbb{I}_A \otimes \exp(-i\theta_B Y_B), \quad (4.21)$$

其中 $|b_0\rangle = d^{-1/2} \sum_j |a_j\rangle$ 与 j 或 k 无关。系统通过以下演化:

$$\rho_{\text{couple},j} = U_B U_{A,j} \rho_{\text{ini}} U_{A,j}^\dagger U_B^\dagger, \quad (4.22)$$

可以通过在基 $|a_j\rangle$ 上对 qutrit 进行投影测量 (后选择) 以及对辅助比特进行相应的测量来准备信息提取。为了标记 qutrit 样本, 我们需要每个基的粒子数, 即 qutrit 密度矩阵的对角元。可以通过以下期望值进行测量:

$$\langle \hat{A}_A \hat{A}_B \rangle_{j,k} = \text{Tr} \left[\left(\Pi_{a_k} \otimes \hat{A}_A \otimes \hat{A}_B \right) \rho_{\text{couple},j} \right]. \quad (4.23)$$

具体地, 可以精确估计对角元:

$$\rho_{jj} = 16 N_{AB}^2 \langle \Pi_{1A} \Pi_{1B} \rangle_{j,k}, \quad (4.24)$$

其中定义 $\Pi_{1A,B} = |1\rangle_{A,B}\langle 1|$ 为 Pauli Z 算符的本征基 $|1\rangle$ 上的投影算符, 与 k 无关。因子 $N_{AB} = d/(4 \sin \theta_A \theta_B)$ 可以通过在估计所有元素后对密度矩阵进行归一化来推断, 如果耦合强度 $\theta_{A,B}$ 是未知的。与上一节中的弱测量方案不同, 由于这里的辅助比特不是具有低位置精度的高斯仪表, ρ_{jj} 的估计对于任何 θ 都是精确的。同时, 为了重建密度矩阵, 信号应当被 $\sin^4 \theta$ 的比例放大。尽管统计误差在任意测量强度下是不可避免的, 但由于双二次弱信号, 误差变得更加相关。类似地, 对于测量相关函数 $\langle \Pi_{1A} \Pi_{1B} \rangle$ 以检索 ρ_{jj} , 在给定 n 个拷贝以进行测量时, 可以通过 $1/\sqrt{n}$ 减小带有一定 θ_A 和 θ_B 的统计误差。为了评估标记成本, 我们计算初始 qutrit 密度矩阵 ρ 和耦合后密度矩阵 $\tilde{\rho}$ 之间的保真度:

$$F = \left[\text{Tr} \left(\sqrt{\sqrt{\tilde{\rho}} \rho \sqrt{\tilde{\rho}}} \right) \right]^2, \quad (4.25)$$

其中 $\tilde{\rho}$ 被定义为对辅助比特进行偏迹后的子系统

$$\tilde{\rho} = \text{Tr}_{A,B}(\rho_{\text{couple},j}) = \sum_i (\mathbb{I}_{\text{qutrit}} \otimes \langle b_i |) \rho_{\text{couple},j} (\mathbb{I}_{\text{qutrit}} \otimes |b_i \rangle) \quad (4.26)$$

其中 $|b_i\rangle$ 是辅助比特子希尔伯特空间的正交基。

4.3.2 任务设计

现在我们演示一个三类别分类问题的 AL，其中要检索的量子信息被编码在 qutrits 中。我们通过双光子实现 qutrits，其中逻辑基态由光子的偏振选择如下：

$$|0\rangle = |HH\rangle, |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|HV\rangle + |VH\rangle), |2\rangle = |VV\rangle, \quad (4.27)$$

其中 H 和 V 分别表示光子的水平和垂直偏振模式。可以使用适当的实验设置准备任意状态，从而实现对 qutrits 的有效操作。考虑到 qutrit 在量子通信中的优势，我们使用了远程状态准备 (RSP) 方案^[134]，其实验设置也与初始弱测量框架兼容。Alice 想要将一个 qutrit 态 $|\Psi\rangle = c_1|0\rangle + c_2|1\rangle + c_3|2\rangle$ 远程发送给 Bob。为此，Alice 首先准备了一个最大纠缠的 qutrit 态

$$|\Psi_{\text{ent}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle_a|0\rangle_b + |1\rangle_a|1\rangle_b + |2\rangle_a|2\rangle_b), \quad (4.28)$$

然后通过测量她的 qutrit a ，使用投影 $|\Psi^*\rangle = c_1^*|0\rangle + c_2^*|1\rangle + c_3^*|2\rangle$ 。如果 Bob 从 Alice 那里得到正面信号，宣称她成功地将她的 qutrit a 投影到 $|\Psi^*\rangle$ ，则 Bob 将接受他的 qutrit b 。否则，qutrit 将被丢弃，并由 RSP 的新迭代替换。Alice 了解到任意的投影都应满足 $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ ，决定用以下任务测试 Bob；假设 c_i 是 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ 的函数，其中 Bob 没有 $c_j(\mathbf{x})$ 的信息。Alice 根据函数 $c_j(\mathbf{x}_i)$ 准备了 $l+u$ 个 qutrits，其中 \mathbf{x}_i 是 d 维参数空间中的点。Alice 要求 Bob 以最小的保真度损失对这些 qutrits 进行分类，推断出点 \mathbf{x}_i 与类别 c_j 之间的关系。Alice 允许 Bob 请求发送 $l+u$ 个样本中的任意一个 qutrit，允许对他的 qutrit 进行所有可能的量子操作。

4.3.3 数值试验

在图 4.5 (a) 中，Alice 准备了一个包含 $21 \times 21 = 441$ 个 qutrits 的格点上的量子态，编码了映射 $x_1, x_2 \rightarrow c_1, c_2$ 和 c_3 ，它们是逻辑基态的振幅。Bob 从 Alice 那里接

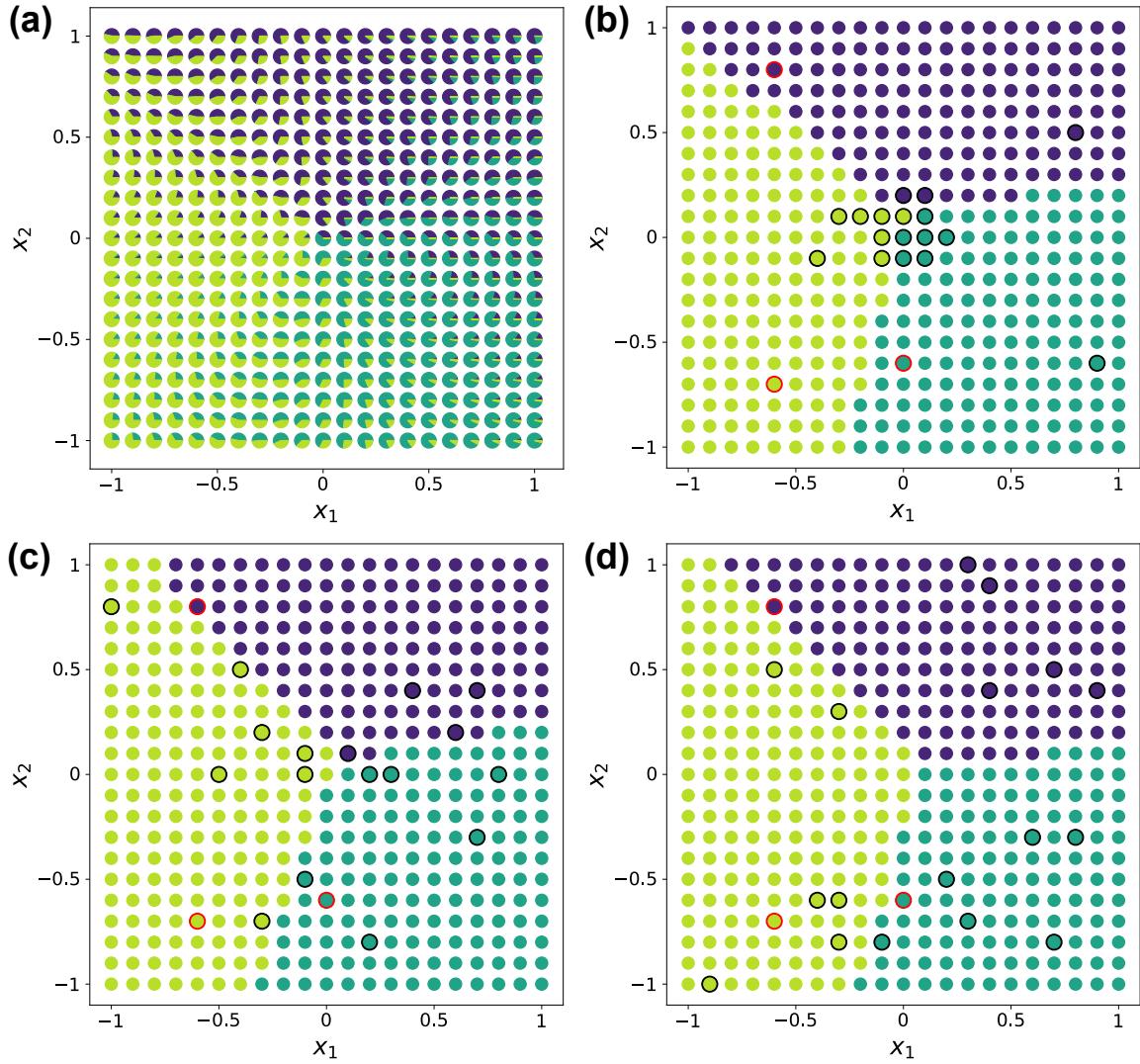


图 4.5 ((a) 由 Alice 准备的点阵包含 $21 \times 21 = 441$ 个量子三能级 (qutrits)，用于三元分类。用饼图展示了 qutrit 状态，其中的比例分别为 $|c_1|^2$ 、 $|c_2|^2$ 和 $|c_3|^2$ 。(b)、(c) 和 (d) 分别展示了使用最低置信度、边缘采样和随机采样作为基线的 USAMP 方案。Bob 通过由 Alice 提供的三个 oracle 初始化 logistic 回归模型 (用红色圈出)。模型查询的 qutrits 由黑色圈出，并用类颜色的小圆圈覆盖。我们发现，即使使用相同的训练集初始化模型，查询行为也会有所不同。与此同时，USAMP 策略能够快速实现模型收敛并得到令人满意的估计。

收到三个 qutrits 的正确标签，它们属于不同的类别，用于初始化分类模型。在线性可分的假设下，Bob 选择了逻辑回归，因为它是概率性的且简单。Bob 通过直接重构 qutrit 的密度矩阵来标记一个 qutrit，随机检索一个对角元素，并将其标记为类别 j ，如果 $\rho_{jj} > 0.5$ 。否则，Bob 检索另一个对角元素，它携带足够的额外信息来标记 qutrit。通过这种方式，Bob 根据不确定性从未标记的样本中选择候选样本，该不确定性由各种标准定义，如最小置信度、边缘采样和熵采样，将它们添加到用于调整模型的训练集中 [见图 4.5 (b-d)]。该模型在少于 5% 的标记样本下收敛到近 90% 的准确率。我们注意到不同的采样策略给出了类似的估计，但不同的采样分布模式。例如，最小置信度倾向于选择位于参数空间中间的 qutrits，而边缘和熵采样更有可能查询靠近两个类别边界的 qutrits。在这里，我们忽略了由于 $\langle \Pi_{1A} \Pi_{1B} \rangle_{j,k}$ 的统计误差而导致的样本可能被错误标记的概率，该误差可以通过请求更多 qutrit 候选的拷贝来减小。换句话说，在大 n 极限下，我们只考虑被准确标记的样本的 AL。尽管统计误差导致决策边界上的样本标记误差率较大，但通过后续小节中进行额外的数值实验，我们表明这些错误并没有显著影响 AL 的性能。

为了定量研究 AL 的不同策略，我们通过平均保真度损失定义了在具有任意耦合强度的密度矩阵直接重构中的标记成本。我们限制了训练集中标记样本的数量或保真度损失，以比较这三种策略。在图 4.6(a) 中，结果表明所有三种策略在性能上均优于基线随机采样 (RS)，这表明 AL 在该数据集上应用 logistic 回归模型是有效的，这一点我们不应该默认为必然，这在后续小节的一个反例中得到体现。在后一种情况下，我们在系统的保真度达到阈值时停止标记 qutrit。尽管我们几乎无法区分这些策略，但根据图 4.6(a) 中呈现的数值实验，我们可以选择边缘采样，因为它的曲线更为平滑且性能更加稳定。不同于前一节的方案，我们不再将 n 个副本视为变量，即所有样本都被正确标记。因此，很明显较弱的耦合强度 θ_i 应该导致更好的性能 [参见图 4.6(b)]，而无需在不同样本上进行权衡，否则会增加污染训练集的错误标签的概率。有关错误标签的相应情况也在后续小节具体分析。

4.3.4 统计误差与算法鲁棒性

我们已经忽略了由于统计误差可能导致的测量类别错误，通过对 qutrit 进行多次测量来减轻这种误差。实际上，对可观测量 $\langle \Pi_{1A} \Pi_{1B} \rangle_{j,k}$ 的测量引入了统计误

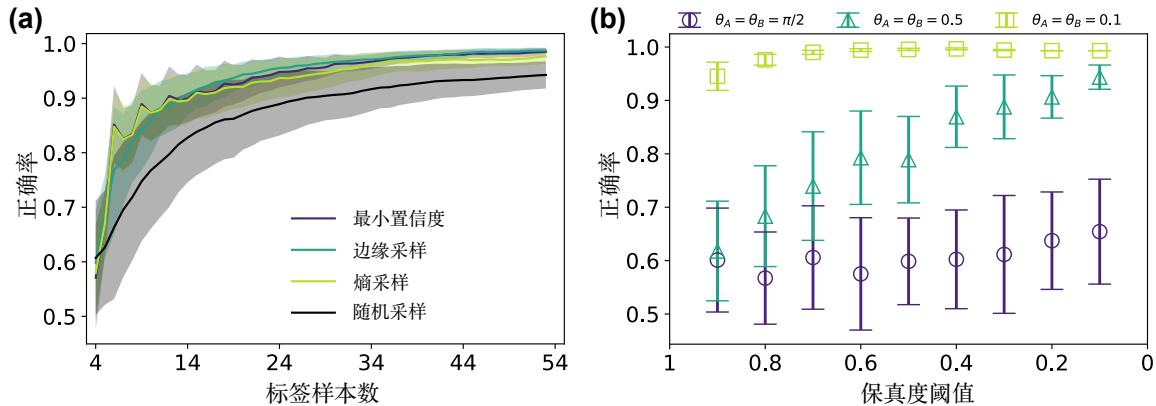


图 4.6 (a) 使用随机采样（基线）、最低置信度、边缘采样和熵采样等不同采样策略的三类模型的平均正确率。透明颜色填充的置信区间表示基于 200 次数值实验的标准差。(b) 使用边缘采样的三类模型的平均正确率。每个 qutrit 都通过不同强度 θ_A 和 θ_B 的测量进行标记。参数与前一个子图相同。

差，当我们计算密度矩阵的对角元时，这些误差会被放大。根据方程 (4.24)，误差与测量强度 θ_i 成反比。因此，靠近决策边界的样本更容易被错误标记。有人可能会提出，忽略统计误差，即考虑在大 n 极限的集合中进行测量，自然有利于主动学习方法。我们同意这一观点，通过以下数值实验研究标签误差和编码信息之间的权衡。

在图 4.7 中，我们使用与图 4.6(a) 相同的设置，将三种 USAMP 主动学习策略与作为基线的 RS 进行比较。在计算密度矩阵的对角元 ρ_{jj} 后，我们通过随机高斯数 $\delta\rho_{jj}$ 进行扰动，其中标准偏差被人为地设置为不同的值。尽管 RS 由于较少的标签错误而更为受益，但基线仍未超越主动学习。我们得出结论，主动学习查询具有最大不确定性的样本对标签错误具有鲁棒性。

此外，我们研究了在不同测量强度下具有统计误差的主动学习性能。在图 4.8 中，我们展示了边际采样的平均正确率，其设置与图 4.6(b) 相同。我们将高斯扰动的标准差设置为 $\sigma = 10^{-4}/(\theta_A^2\theta_B^2)$ 。我们注意到，测量越弱，统计误差就越显着。尽管主动学习的优势仍然存在，但标签错误降低了弱测量在小 θ_i 处的性能，这可能通过其他测量方案进行改进或部分避免，而该设计超出了本工作的范围。

4.3.5 数值实验反例

在这里，我们提供有关在三能级量子比特中进行量子信息检索的额外数值实验的其他信息。除了主文中描述的数据集 (*Case I*) 之外，我们还在另一个没有旋转对称性的配置上测试主动学习算法 (*Case II*)。我们介绍生成数据集的函数如下。

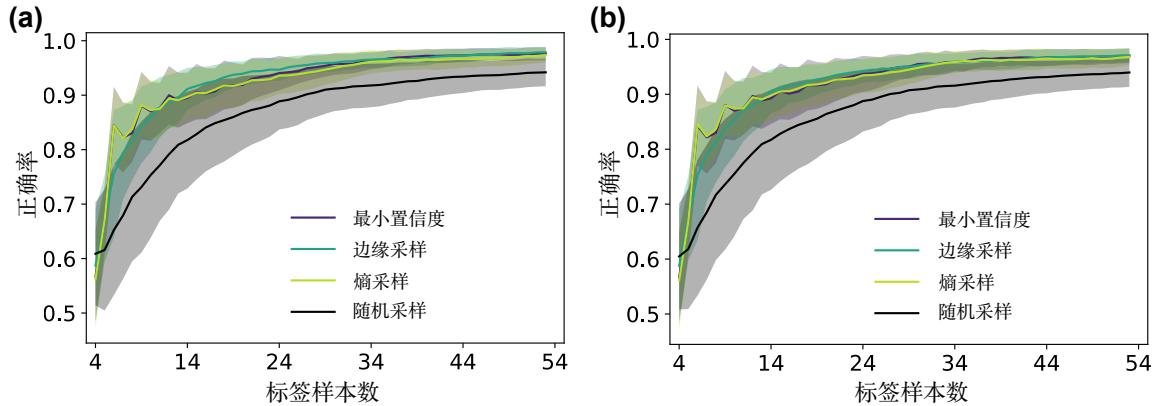


图 4.7 在具有统计误差的情况下，使用随机采样（基准）、最低置信度、边际采样和熵采样作为不同采样策略的三重分类模型的平均正确率。透明颜色填充的置信区间表示基于 200 次数值实验的标准偏差。我们通过在从测量输出计算得到的密度矩阵的对角元素上引入扰动 $\delta\rho_{jj}$ 来模拟统计误差。标准偏差分别为 (a) $\sigma = 0.05$ 和 (b) $\sigma = 0.1$ 。

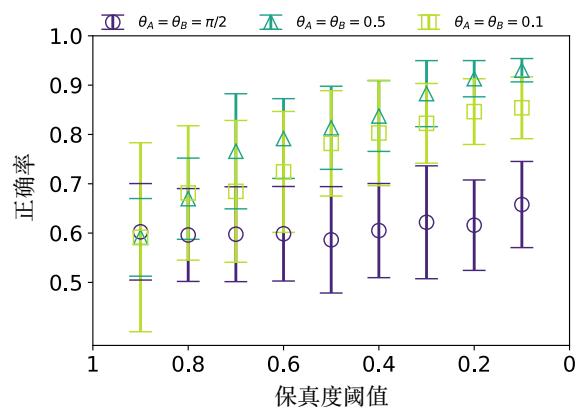


图 4.8 在统计误差的情况下，使用边际采样作为不同采样策略的三重分类模型的平均正确率。每个量子比特由不同强度 θ_A 和 θ_B 的测量标记。我们将高斯扰动的标准差设置为 $\sigma = 10^{-4}/(\theta_A^2\theta_B^2)$ 。

Case I.—我们在参数空间 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ 上定义旋转操作 $\mathbf{x}' = R(\theta)\mathbf{x}$, 其中

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

我们有三个独立的参数空间 $\mathbf{x}^{(1)} = R(0.32)\mathbf{x}$, $\mathbf{x}^{(2)} = R(2\pi/3 + 0.32)\mathbf{x}$, 和 $\mathbf{x}^{(3)} = R(4\pi/3 + 0.32)\mathbf{x}$, 对应的角度参数为 $\phi^{(i)} = \arctan(x_2^{(i)}/x_1^{(i)})$ 。因此, 我们通过以下方式生成数据集:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_i(x_1, x_2) &= \frac{1}{2} (1 + \sin \phi^{(i)}), \quad x_1^{(i)} \geq 0, \\ &= \frac{1}{2} (1 - \sin \phi^{(i)}), \quad x_1^{(i)} < 0, \end{aligned} \quad (4.30)$$

其中振幅 c_i 由 \tilde{c}_i 的归一化得到。

Case II.—在这里, 参数空间定义在 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T \in [0, \pi/4] \times [0, \pi/4]$ 上, 每个基态的振幅为

$$\begin{aligned} c_1(x_1, x_2) &= \sin^2(x_1 + x_2), \\ c_3(x_1, x_2) &= \cos^2(x_1 + x_2), \\ c_2(x_1, x_2) &= \sqrt{|1 - c_1^2 - c_3^2|}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

基准采样策略.—在主文中, 我们展示了使用不同采样策略训练 logistic 回归模型的主动学习算法的性能。对于案例 *I*, 边际采样给出了一个更平滑的正确率曲线 [参见图 4.6(a)]。在这里, 我们在图 4.9 中呈现了最低置信度和熵采样的正确率。正如我们所期望的, 它们的性能几乎无法区分。

朴素贝叶斯分类器与 Case I—正文已经提到不能盲目地认为 AL 一定能带来好处。AL 选择距离决策边界更近的样本。这样一来, 它可能不会查询远离决策边界的其他类别的样本。一旦模型的估计基于样本类别的权重, 这对模型的性能产生重大影响, 导致基线 RS 优于所有 USAMP 方法。

在这里, 我们测试 AL 算法以有效地训练朴素贝叶斯分类器, 旨在解决 qutrits 中的量子信息检索问题。在 *Case I* 中, 我们证明了逻辑回归模型在 USAMP 的配合下能

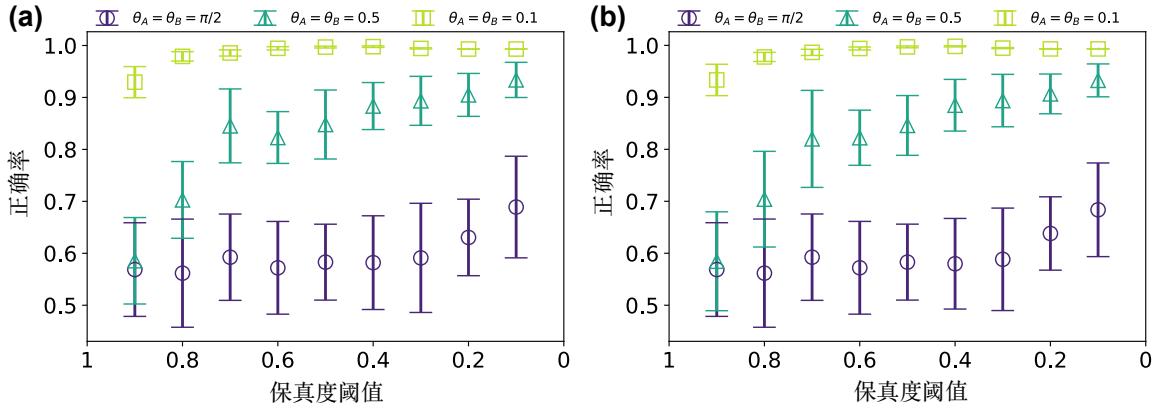


图 4.9 逻辑回归三分类模型的平均正确率，使用最低置信度（a）和熵采样（b）作为采样策略，分别针对 Case I。每个量子态都通过不同强度的 θ_A 和 θ_B 的测量进行标记。参数与图 4.6(a) 中的相同。

够给出令人满意的预测，并且明显优于 RS。然而，对于相同的任务，我们在训练朴素贝叶斯分类器时遇到了一些困难（参见图 4.10）。我们测试了三个类别的 OvR；尽管 USAMP 的性能随着更多标记样本的增加而超过 RS，但两者显示出类似的行为。我们认为这种相似的表现是合理的，因为量子信息数据集是通过旋转对称生成的，使得每个类别都是平衡的。因此，RS 在少量标记样本的情况下优于所有 USAMP 策略。

Case II.— 我们想知道 Case I 中的现象是否存在于其他情景中，这激发了我们在另一个数据集（*Case II*）上测试朴素贝叶斯分类器的想法。我们在图 4.11 和图 4.12 中展示了一个直观的演示和定量研究。我们发现在 *Case II* 中，相对于 *Case I*，RS 明显优于 USAMP 策略。

现在我们分析在这样的模型和数据集中 AL 算法失败的机制。AL 算法与 ML 模型协作，根据模型的估计查询最具信息的样本。如果概率模型基于先验，对训练集中样本的标签很敏感，那么它可能会被误导。实际上，通过朴素贝叶斯分类器对未知样本的预测与 $P(y)$ 成正比作为先验。例如，如果第三类的样本在初步训练集中的数量不足，那么模型将忽略第三类的概率，因为该类别的样本很少。因此，模型在 AL 时执行几乎是二进制分类，只有在几乎所有样本都被查询时才能纠正。相比之下，RS 查询在参数空间均匀分布的样本。尽管被查询的样本应该信息较少，但通过查询在参数空间均匀分布的样本，RS 确保了对 $P(y)$ 更好的估计。

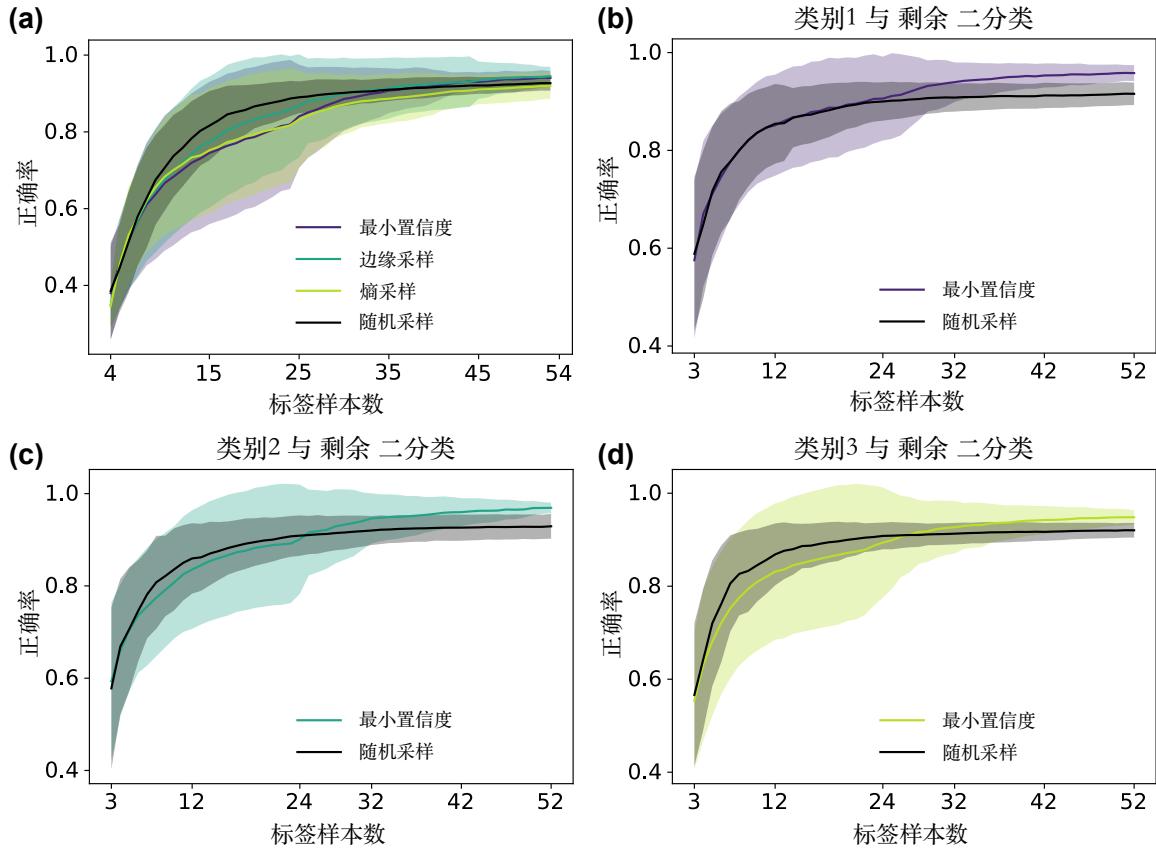


图 4.10 (a) 在 Case I 中, 朴素贝叶斯三分类模型的平均正确率, 使用随机抽样 (基准线)、最低置信度、边缘抽样和熵抽样作为不同的采样策略。透明的置信区间表示基于 200 次数值实验的标准差。(b-d) 类别 1、2、3 与其余类别的平均正确率, 其中 USAMP 策略在二分类问题中是等效的。其他参数保持不变。

4.4 量子多体系统相界

标签成本是指通过提取样本中的量子信息引起的保真度损失, 这可以扩展到各种情景中的其他定义。例如, 许多体物理学的异乎寻常的特征可以通过数值模拟或实验室实验来研究, 这两者都需要大量的时间和资源。我们利用主动学习来研究一个相变估计问题, 旨在高效地对模型中的多个相进行分类。

4.4.1 几何阻挫系统

三角格子上的反铁磁伊辛模型 (Triangular Lattice Antiferromagnetic Ising Model, TIAF) 在横向磁场下具有如下的量子哈密顿量:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x \quad (4.32)$$

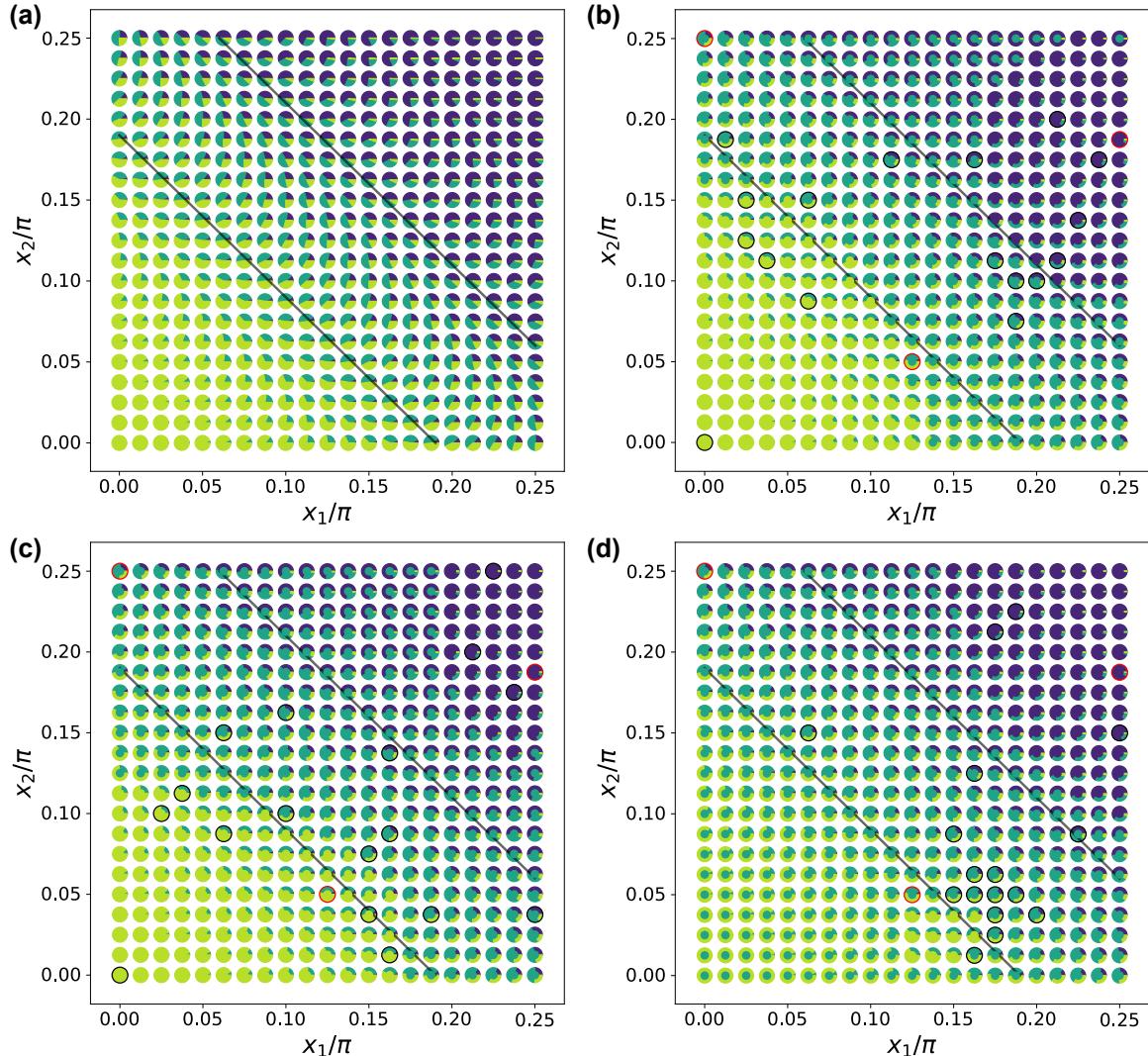


图 4.11 (a) 由 Alice 准备的晶格，编码 Case II 的量子信息，包含 $21 \times 21 = 441$ 个用于三重分类的 qutrit。这些 qutrit 的状态用饼图表示，其中的比例为 $|c_1|^2$, $|c_2|^2$ 和 $|c_3|^2$ 。(b), (c) 和 (d) 使用最低置信度、边缘抽样和熵抽样作为查询策略的 USAMP 方案，分别。Bob 通过由 Alice 提供的三个 Oracle 初始化了一个朴素贝叶斯模型（由红色圈圈出）。模型查询的 qutrit 由黑色圈圈出，并用各个类别颜色的较小圆圈覆盖。

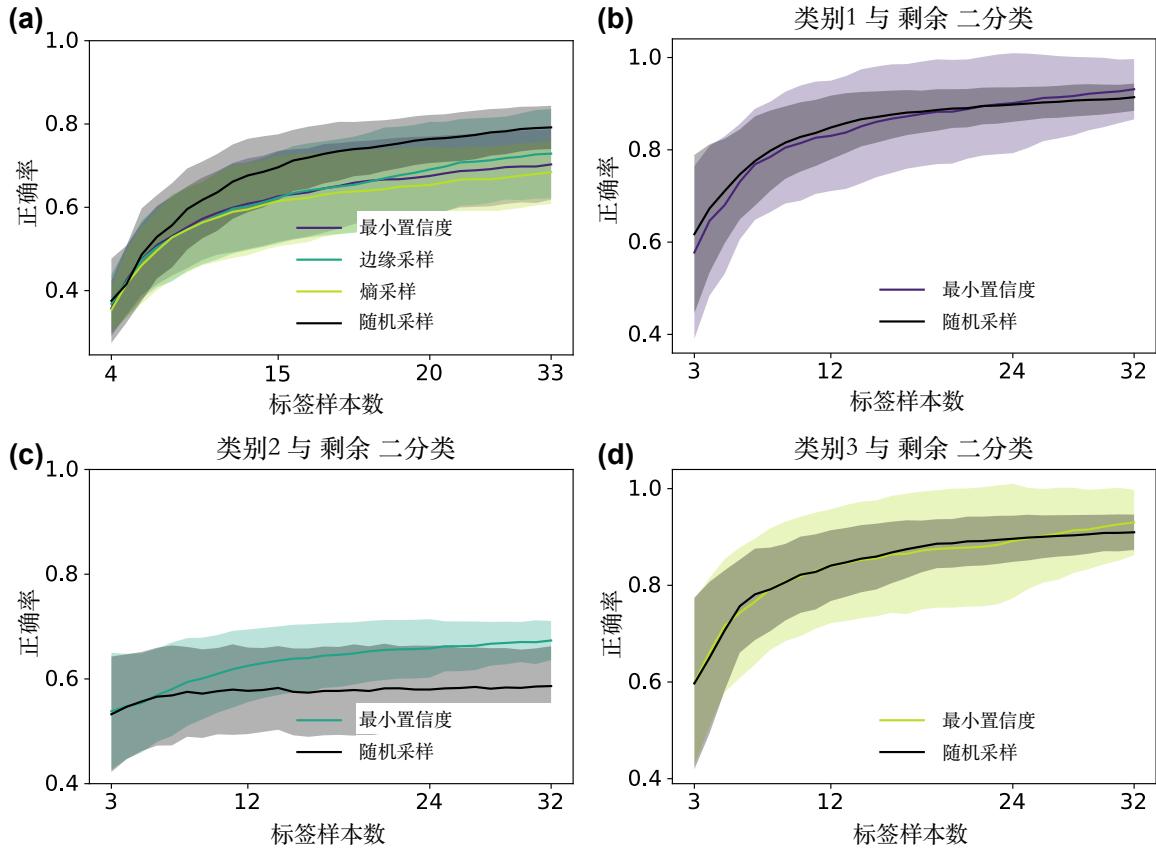


图 4.12 (a) Case II 的朴素贝叶斯三重分类模型的平均正确率, 使用随机抽样 (基准线)、最低置信度、边缘抽样和熵抽样作为不同的抽样策略。透明的颜色填充置信区间, 表示基于 200 次数值实验的标准偏差。(b-d) 类别 1、2、3 与其余的平均正确率, 其中 USAMP 策略对于二元分类问题是等效的。其他参数保持不变。

其中求和遍历三角格子上的最近邻, 这可能是实现几何阻挫的最简单的模型之一 [参见图 4.13(a)]。在横向场下, TIAF 模型存在一个广泛的临界相, 其与亚格子有序相和顺磁相之间由两个 KT 相变分隔。可以使用解析方法研究它的量子动力学^[135], 从而在任意有限温度和横向场强度下定量预测相图, 给出了 KT 相和顺磁相的相界:

$$\frac{T_2}{J} = b \frac{\Gamma}{\Gamma_c} \ln^\nu \left(\frac{\Gamma_c}{\Gamma} \right) \quad (4.33)$$

其中 $b = 0.98$ 是通过重整化固定的数值常数, $\nu \approx 2/3$ 是三维 XY 模型的指数, $\Gamma_c = 1.65J$ 是横向场的临界强度。相应地, 通过替换 $T_1 = (4/9)T_2$, 我们得到 KT 相和有序相的边界 [参见图 4.13(b)]。 b 和 Γ_c 的数值取值是通过先前对该系统的密度矩阵重整化群 (DMRG) 和蒙特卡洛研究所建议的^[136]。

与此同时, 我们意识到系统的统计性质可以从其配分函数 $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ 推导出来, 其中 $\beta = 1/(k_B T)$ (为简单起见, 取 $k_B = 1$)。根据 Suzuki-Trotter 定理^[137],

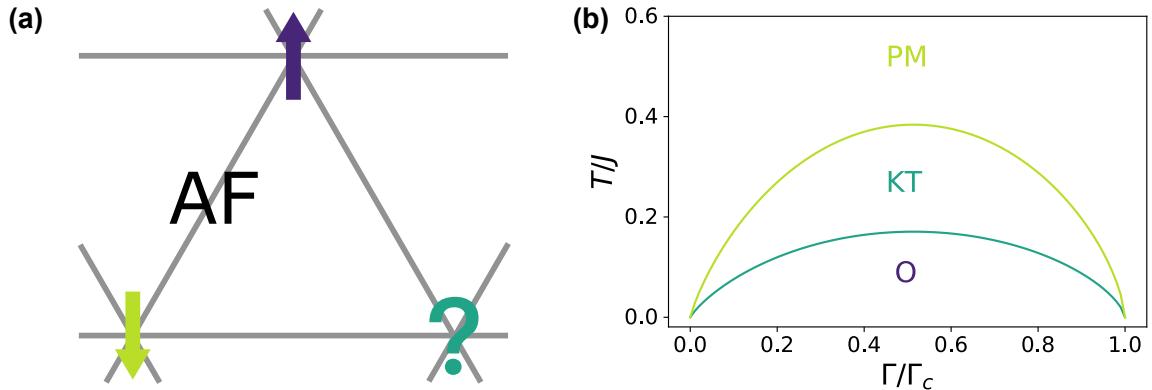


图 4.13 (a) 这里直观地说明了几何磁性阻挠模型在三角格子上的产生，其中自旋与相邻自旋反平行排列以最小化能量。当其他两个自旋反平行排列时，一个自旋会受到阻挠，因为任一方向都会产生相同的能量。(b) 在横向场下的模型相图，其边界由先前的研究给出^[135]，方程为 Eq. (4.33)。由于阻挠效应作用于每个自旋，存在一个时钟（有序）相，使得基态具有六重简并性。在顺磁相和时钟相之间浮动着一个临界（Kosterlitz-Thouless，KT）相，在相界处发生 KT 相变。

我们可以用经过简化的哈密顿量表示量子哈密顿量的配分函数，形成一个堆叠的经典伊辛模型

$$H_{2+1} = \sum_{\langle i,j \rangle, k} K_{ij} s_{ik} s_{jk} - \sum_{i,k} K_{\perp} s_{ik} s_{ik+1}, \quad (4.34)$$

其中 s_{ik} 表示具有值 ± 1 的经典伊辛自旋， k 是 (2+1)-D 经典系统中虚时间方向的索引。它包括每个层内的反铁磁耦合 $K_{ij} = J/(nT)$ 和层间的铁磁耦合 $K_{\perp} = (1/2) \ln(nT/\Gamma)$ 。当 Trotter 数 n 趋向无穷大时，量子到经典系统的映射变得精确。因此，我们可以通过使用连续时间蒙特卡洛算法^[138]来对横场 TIAF 进行数值研究，该算法避免了系统高度呈 $\exp(2K_{\perp})$ 指数增长的问题。我们不是在每个 Trotter 步骤中离散虚时间方向并存储 ± 1 的值，而是采用连续时间极限来应用 Swendsen-Wang 集群更新方法的方案^[139]。我们通过具有速率 $1/\Gamma$ 的泊松过程切割长度为 $t < \beta$ 的连续段 $\tilde{S}_i \{[t_0, t_0 + t]\}$ 。接下来，我们用概率 $1 - \exp(-2Jt)$ 将空间相邻的段 $\tilde{S}_i \{[t_1, t_2]\}$ 和 $\tilde{S}_j \{[t_3, t_4]\}$ 连接起来，重叠长度为 $t = \text{len}([t_1, t_2] \cap [t_3, t_4])$ 。通过这种方式，我们构建了连接段的簇，随机分配它们的值为 ± 1 ，在每个段中去除不必要的切割，得到 (2+1)-D 系统的新配置。我们通过 Metropolis 接受准则 $p = \min\{1, \exp(-\Delta E)\}$ 来更新系统，其中 ΔE 是原始配置和新配置之间的能量差。我们通过将自旋 σ_i 的加权长度除以 β 来检索局部磁化 m_i ，从而可以检测横场 TIAF 的相，而不受 T 、 J 和 Γ

的任意选择的影响。

4.4.2 任务设计

解析描述和计算方法为我们提供了研究具有几何阻挫和相界的磁体的工具。我们假设 Bob 对系统没有足够的先验知识，即 Bob 只知道横场 TIAF 模型中存在三个可区分的相，分别是高温或强横场下的铁磁（无序）相，低温或弱横场下的顺时针（Clockwise 有序）相，以及它们之间的漂浮 KT（临界）相。Bob 的目标是通过机器学习模型预测相界，其中样本为 $\mathbf{x}_i = (\Gamma, T, J)$ 。Bob 可以通过计算物理方法或凝聚态物理实验检测参数 \mathbf{x}_i 下模型的相，将样本标记为结果 y_i 。考虑到通过任一方法标记样本可能是耗时且昂贵的，Bob 使用主动学习进行最佳实验设计，通过模型评估的最大不确定性标记样本。在标记尽可能多的样本后，SSL 紧随 AL 之后，对应于用于人工标记的实验预算。

4.4.3 数值实验

与在有限量子三能级系统格点上采样不同，Bob 面对的是一个连续的参数空间，可以在空间离散化之后简化。由于 Bob 已经知道在其他相之间有一个 KT 相，他选择了一个具有高斯核的非线性支持向量机（SVM）。尽管 SVM 不是一个概率模型，但可以通过其决策函数等效地评估不确定性。因此，Bob 通过将两个 one-vs-rest (OvR) 结合来将三类分类问题转化为二类分类问题。不同的相由决策函数的正负值特征化。显然，相界的估计是值为零的等高线。为了评估 AL 及其与 SSL 的组合的性能，必须通过将决策函数的值与真实值进行比较来定义正确率。需要强调的是，即使解析分析为我们提供了相界的优雅表达式，如 Eq.(4.33) 中所示，参数 b 、 ν 和 Γ_c 仍然是由先前的数值研究建议的，而不是从头计算得出。换句话说，这些参数具有它们的不确定性，由 DMRG 或 MC 数值实验的射击所限制。因此，Alice 假设解析表达式和实验值的组合可以刻画相界，即 Alice 将 Eq.(4.33) 作为分类器，用于获取样本的真实标签以进行模型评估，这可能并不完全描述自然中的相界。同时，各种计算物理方法和超参数会导致不同的相检测结果，特别是当样本接近真实相界时。因此，Bob 从 Alice 处查询样本的相，而不是进行数值模拟，以公平地评估 AL 算法。为了模拟数值或实验中的统计误差，Alice 将误差建模为一个错误标记的概率，通过以下方式

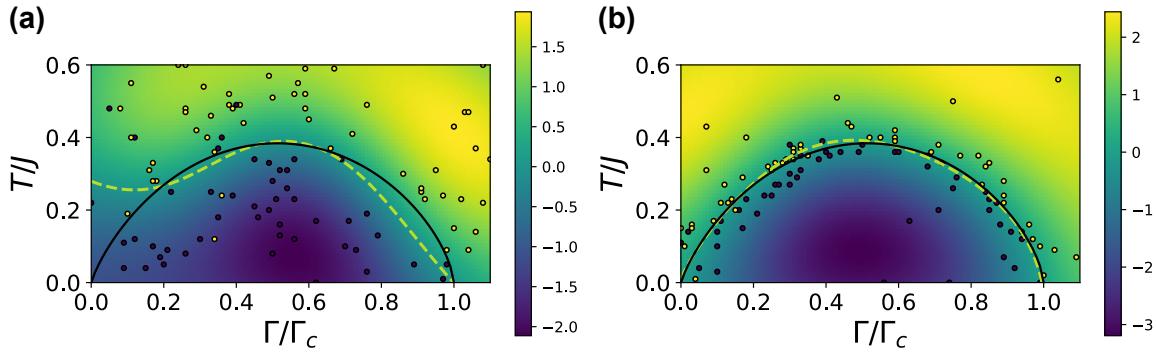


图 4.14 (a) 一个二元分类模型，采用随机抽样策略，区分顺磁相和其他相。我们展示了决策函数的热度图，并通过其标签绘制了 100 个查询样本。标签误差由方程 (4.35) 建模，其中 $k = 50$ 。通过标记不到 2% 的样本，模型实现了 94% 的准确率。(b) 策略是边际抽样，将性能提高到了 99%，而其他参数保持不变。我们绘制了由实线黑曲线表示的地面真实相界 (4.33)，以及模型的决策边界由黄色虚线表示。

翻转 Oracle 的 OvR 类：

$$P_{\text{flip}} = \frac{1}{2} \exp(-kd), \quad (4.35)$$

其中 k 是一个可调参数， d 是从样本点在参数空间中到曲线的距离。

在图 4.14 中，我们展示了通过使用 RS 作为基线和 USAMP 来预测顺磁相和其他相界的演示。我们注意到 USAMP 查询接近解析相界的样本，获得了比 RS 更好的估计。然后，我们通过组合两个具有高斯核的非线性 SVM 进行量化研究，以区分三个量子相。我们将要采样的空间设置为 $\Gamma/\Gamma_c \in [0, 1.1]$, $T/J \in [0, 0.6]$ 用于顺磁相与其他相， $T/J \in [0, 0.3]$ 用于有序相与其他相，其中晶格长度为 0.01。我们通过 RS 对比 USAMP 在不同标签错误率下的性能 [参见图 4.15(a)]；由 $k = 100$ 建模的 USAMP 在三元分类问题上实现了近 90% 的速率估计，明显优于 RS。我们还注意到， $k = 100$ 的 RS 实现了比 $k = 5$ 的 USAMP 更精确的估计。我们推断这是合理的，因为 $k = 5$ 具有更高的样本错误标签的概率。更具体地说，当标记靠近相界的样本时存在权衡，因为它们减少了不确定性，但模型更有可能被引入错误的标签而被误导。相比之下，RS 均匀选择样本，它们大多数远离相界。尽管它们的标签不像 USAMP 那样显著地减少不确定性，但错误标签的可能性显著减小，特别是在我们的错误模型中参数 k 足够小的情况下。我们进一步考虑实验预算非常有限的情况，即只能标记少量样本，需要 AL 和 SSL 之间的合作。在图 4.15(b) 中，我们使用 SSL 来探讨一旦人工标记样本的数量达到上限，是否可以改进由 AL 训练的模型。我们验证 SSL 几乎不能提

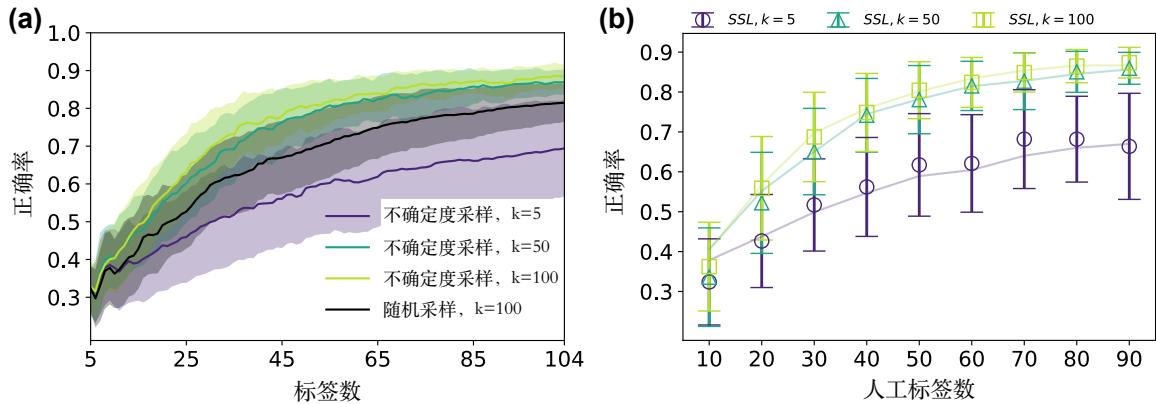


图 4.15 (a) 在顺磁相和其他相的边界估计上，使用随机抽样 (baseline)、USAMP ($k=5, 50, 100$) 作为不同的抽样策略和标签错误率时的平均正确率。透明颜色的置信区间表示基于 100 次数值实验的标准偏差。(b) AL 训练的模型的平均正确率，后跟 SSL，在标注者标记的样本数量达到上限后。透明线表示未使用 SSL 的 AL 训练模型的平均正确率。其他参数与前一个子图相同。

高由 AL 训练的模型的性能。因此，我们得出结论，AL 提供了一种实验的最优设计，充分利用每个查询样本中的信息。

4.4.4 连续时间蒙特卡洛算法

为了公正评估具有真实值的 ML 模型，我们没有使用连续时间蒙特卡洛算法来通过检测其相来标记样本，而是模拟了与分析分析相对应的数值误差模型。我们认为介绍该算法是有必要的，因为这可能有助于听众将 AL 算法应用于许多体物理学中的其他任务，其中人们的目标是预测许多体系统的未知特性，即不再需要模型评估。

为了进行可靠的蒙特卡洛模拟，人们必须验证所研究系统中是否存在符号问题。在横向 TIAF 模型中只有正权重，也就是说，对于这个具有几何磁阻的系统，不存在符号问题。根据铃木-特洛特定理，2D 量子伊辛模型等效于 (2+1)-D 经典伊辛模型，其离散化版本由于尺度极限而难以模拟。因此，人们可以使用连续（虚拟）时间算法，它不再将经典自旋变量视为格点，而是一段特定长度的连续片段： $s_{ik} = s_{ik+1} = \dots = s_{ik+N} \rightarrow \tilde{S}_i[t_0, t_0 + t]$ ，其中 $t = N/(nT)$ 。片段的边缘称为切割点，在这些切换时间，自旋会翻转到另一个值。

配置是通过 Swendsen-Wang 方法更新的，包括插入新切割点和将片段聚类为两个主要步骤。对于虚拟时间方向上的相邻经典自旋 s_{ik} 和 s_{ik+1} ，它们共享相同值的

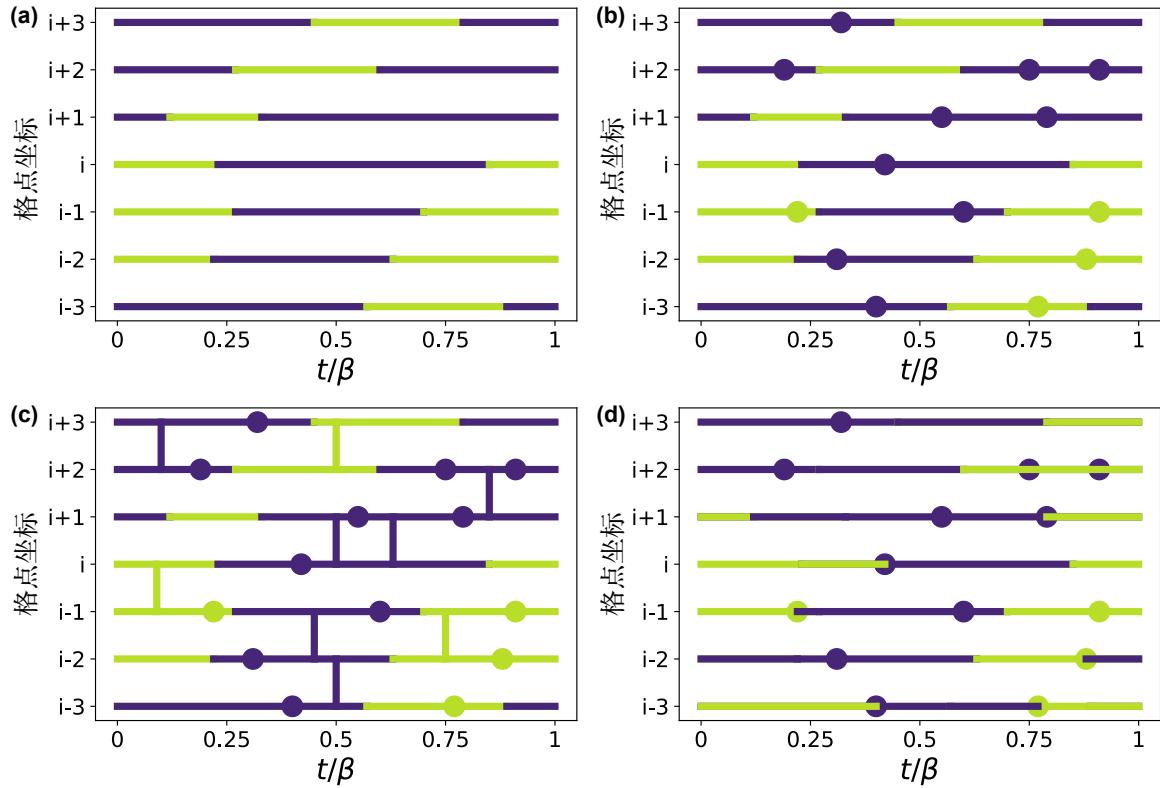


图 4.16 (a) 系统的初始配置, 由虚拟时间方向上的自旋片段组成。(b) 根据泊松过程 (4.36) 插入新的切割点。(c) 连接片段进行聚类 (4.37)。(d) 在每个簇中随机赋值后的新配置。必须在新的迭代之前删除片段内的多余切割点。

概率为 $p_i = 1 - \exp(-2K_{\perp}) = 1 - (\Gamma/nT) + O(1/n^2T^2)$ 。因此, 在连续极限中, 长度为 t 的虚拟时间方向上的经典自旋连接概率为

$$(p_i)^{ntT} = (1 - \Gamma/nT)^{ntT} \rightarrow \exp(-\Gamma t) \quad (4.36)$$

它表示一个衰变时间为 $1/\Gamma$ 的泊松过程。类似地, 我们通过概率

$$1 - (1 - p_{ij})^{ntT} = 1 - (1 - 2K_{ij}/nT)^{ntT} \rightarrow 1 - \exp(-2K_{ij}t) \quad (4.37)$$

连接相邻的空间片段 $\tilde{S}_i\{[t_1, t_2]\}$ 和 $\tilde{S}_j\{[t_3, t_4]\}$, 其中 $t = \text{len}([t_1, t_2] \cap [t_3, t_4])$, 形成新的簇, 为 ± 1 赋值的概率相等。图 4.16 显示了聚类更新方法的示意图。

获取物理量的测量是直截了当的, 例如, 局部磁化 m_i 可以通过对带有权重 ± 1 的片段长度进行平均, 然后除以 $\beta = 1/T$ 来计算, 从而得到局部磁化率

$$\chi_i = \int_0^\beta \langle \sigma_i^z(\tau) \sigma_i^z(0) \rangle d\tau = \beta \langle m_i^2 \rangle, \quad (4.38)$$

通过在蒙特卡洛步骤上生成的构型上进行平均。为了标记样本，即检测相，我们简要介绍完成这样的任务所需的量。Landau-Ginzberg-Wilson 理论表明，复杂的 XY 序参量^[140] 是

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 \exp(i\phi) = \left[m_1 + m_2 \exp\left(\frac{i4\pi}{3}\right) + m_3 \exp\left(-\frac{i4\pi}{3}\right) \right] / \sqrt{3}, \quad (4.39)$$

它对于铁磁相和临界相为零，其中 m_i 是三角子晶格中自旋的局部磁矩。一旦在无限大的三角反铁磁中磁矩消失，还可以计算磁化率。通过检查六重对称性破缺项

$$c_6 = \frac{\langle \psi_0^6 \cos 6\theta \rangle}{\langle \psi_0^6 \rangle}, \quad (4.40)$$

可以检测到钟相，对于 (+ - -) 或 (+0-) 相，它等于 ± 1 ，对于铁磁相和临界相为零。还有一个区分铁磁相和临界相的量是 Binder 累积量

$$U = 1 - \frac{\langle \psi_0^4 \rangle}{3\langle \psi_0^2 \rangle^2}, \quad (4.41)$$

在无限大系统大小极限下，在铁磁相收敛为 0，在临界相内的位置依赖的 \tilde{U} ，在顺时针有序相为 $2/3$ 。临界相的位置也可以通过尺度分析^[141] 和 KT 理论^[142] 来确定，这在对该模型的数值研究中进行了详细介绍。

4.5 结论

本章节中，我们以一个量子信息二分类问题开始，展现了主动学习的一个开创性应用，并证明了 AL 算法在物理学中研究多类别分类问题的优势，其中包括用三能级量子系统进行量子信息检索和在多体物理中预测相界两个代表性案例。AL 算法显著减少了标记成本，可以在理论上或实际上定义，分别通过量子信息检索中的保真度损失或物理实验中的操作成本。利用三能级量子系统进行 AL 辅助信息检索可以通过纠缠的光子进行实验验证，其中 Alice 局部投影的双光子由 Bob 远程准备，然后通过两个辅助光子进行信息提取。AL 算法实现了最优模型训练，因此在不计算信息熵减少的情况下通过模型性能提高等效量化了量子保真度损失与相应的经典信息增益之间的关系^[143]。人们还应该注意到，AL 的性能也与 ML 模型本身有关。尽管它对大多数任务显著减少了模型训练所需的标签，但当 ML 模型对给定的数据分布不起作用或甚至误导预测时，它会失败，我们展示了反例。

该工作的一个可能的扩展可能涉及将提出的框架与深度学习相结合。人工神经网络（ANN）作为一个通用的函数逼近器，可能会取代统计 ML 模型作为鉴别器。预训练的 ANN 也可以作为生成模型工作，从根本上与权衡和动态预测的起源有关^[131]，或者用于有效训练一个具有更多可解释性的较简单模型的注释样本^[144]。这个扩展的困难在于用更新的数据集重复训练 ANN 会消耗太多的计算资源，违反了通过自身进行有效训练的目的。这种扩展需要计算机科学领域动态数据集的培训理论的支持。

另一个扩展是多标签分类，这不应与本文中提出的多类别分类混淆。多标签分类涉及对每个样本可以预测多个标签，这自然允许在量子系统中通过叠加进行编码。在选择要采样的标签时包含有关数据密度的信息是增强本文中所呈现的研究的另一种可能性，以避免选择接近决策边界但不代表数据集的样本。最后，我们想强调在物理学中使用 AL 显然不仅仅局限于检索量子信息和研究多体物理。AL 算法帮助物理学家设计最优实验策略并分析数据输出，从而在粒子物理学和宇宙学等领域具有广泛的应用前景，其中实验成本极为敏感。

在展示了主动学习训练经典机器学习模型用于量子信息处理、多体物理相界预测等任务的可行性后，我们将在下一章节将这一思想推广到量子机器学习中，并在模型架构上进一步探索实现少样本学习的方案。

第五章 量子主动学习

在上一章节提出的主动学习框架的基础上，我们认识到可以将这一思想用于量子机器学习模型的训练，以更少的被标注的量子数据获得不亚于全标签的模型表现，从而在量子机器学习中实现少样本学习。这一量子主动学习框架是基于采样算法层面的，由于其不受限于具体模型，可以允许在量子神经网络架构角度出发，进一步优化性能。

在物理学中见证了主动学习（AL）取得成功后，我们探索了其在量子机器学习（QML）中的应用^[145-146]，在标题中引入了术语量子主动学习（QAL）。QML 利用量子系统的独特特性处理量子数据，这些数据可能编码着经典信息，具有非凡的效率，在嘈杂的中间规模时代相对于经典方法^[147]，呈现出实际优势。除了利用量子计算来优化 AL 算法外，QAL 的主要重点是在工作流程中用量子神经网络（QNN）取代经典机器学习模型。通过 QAL，可以通过将其输出映射到所有类别的概率分布来完善 QML 模型的训练。为了初步验证其可行性，最近有关利用光子量子处理器用 QAL 训练简单量子分类器的实验性工作^[148]。实际上，QAL 并不局限于任何特定模型，通过旨在促进少样本学习的架构设计，可以潜在地增强模型性能。

在经典机器学习中，模型架构方面的一种策略是通过几何深度学习在模型设计中融入对称性^[149]。这一概念已经扩展到了等变量量神经网络的设计领域，引领出了几何量子机器学习（GQML）的突出领域^[150-156]。类似于其经典对应物，几何先验被引入为一种归纳偏置，以增强模型性能，利用量子力学中对称性的普遍存在。与采用统一归纳偏置的量子神经网络相比，GQML 通过降低表达能力来解决贫瘠高原问题^[157-160]，从而导致更加聚焦的搜索空间。因此，将 GQML 整合到 QAL 框架中有望提高效率，促进量子领域在算法和架构水平上的少样本学习的进步。

本工作的主要贡献在于我们在门模型量子计算范式中首次提出了 QAL，并构建了等变深度量子神经网络。对于计算机科学背景知识有限的读者，我们从在经典机器学习环境中解释 AL 开始，然后定义 QNN。随后，我们简明地解释了对称性和等变 QNN 的概念，这对于理解 GQML 的概念至关重要。在建立了必要的基础知识之

后，我们通过切甜甜圈的例子来说明 QAL，在 \mathcal{Z}_2 对称性的二维参数空间内呈现所有细节。数值实验证实了 QAL 和 GQML 对少样本学习的积极影响。此外，我们解决了一个涉及 \mathcal{D}_4 对称性的更复杂问题，类似于井字棋，在这里我们观察到了一个可以理解的负面结果。我们分析了这一负面结果，揭示了标准抽样策略的相关缺陷，并通过各种数值实验证明了我们的发现。此外，我们还提供了关于未来研究的见解，旨在通过整合互补方法来优化和定制 QAL，以适应各种量子数据和任务。我们相信，QAL 作为一个框架有望降低分析量子实验结果的总体成本，并通过 QML 设计量子实验。

5.1 预备知识

在此我们介绍理解本章节工作所需的预备知识。鉴于主动学习的理论已在上章节详细介绍，其中所有采样策略都是基于模型的，这意味着它们只关注模型所做的估计，我们对它们不再赘述。在某些情况下，这类采样可能会有问题，因为具有最少确定性的异常样本位于分类边界上。然而，这并不一定传达了分布中其他样本的特征，使得知道其标签能够增强测试集的整体准确性的可能性很小。这个问题可以通过在策略设计中明确地建模相似性的分布来解决。其中心概念是，信息量丰富的样本不仅仅应该是不确定的。它们还应该表明潜在分布，意味着它们位于输入空间 \mathcal{X} 的密集区域。因此，可以定义一个基于数据的策略。

定义 1：(密度加权采样) 模型查询未标记样本 \mathbf{x}_{DS} ，使得

$$\mathbf{x}_{DS} = \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmax}} \left[\frac{1}{U} \sum \text{Sim}(\mathbf{x}, \mathbf{x}(u)) \right], \quad (5.1)$$

其中 $U < N$ 是未标记池的大小， $\mathbf{x}(u)$ 是池中除了 \mathbf{x} 本身以外的样本。基于模型和基于数据的采样可以结合起来查询样本以获得更好的性能。

5.1.1 量子神经网络

QNN 是一种可以在量子设备中实现的参数化幺正操作。对于经典数据，它由具有可训练参数 θ 的幺正近似 $U(\theta)$ 和用于数据加载的编码器 $E(\mathbf{x})$ 组成，后跟对可观测量 \hat{O} 的测量。由于无复制定理，将数据多次编码到量子电路中，即所谓的数据重

新上传^[161-162]，对于增强 QNN 的表达能力是有效的。因此，对 \mathbf{x} 的预测给出为

$$h_\theta(\mathbf{x}) = \text{Tr}[U_d(\theta)E(\mathbf{x}) \cdots U_1(\theta)E(\mathbf{x})|0\rangle\langle 0|^{\otimes k} E^\dagger(\mathbf{x})U_1^\dagger(\theta) \cdots E^\dagger(\mathbf{x})U_d^\dagger(\theta)\hat{\mathcal{O}}], \quad (5.2)$$

其中 d 是拟设层数。因此，可以构造损失函数 $\mathcal{L}(h_\theta)$ ，其中包含对期望可观测量 $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle$ 的期望，通过经典优化器最小化，以拟合用于将分布 $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ 映射的函数。

同时，QNN 也可以用于研究量子实验中的量子数据 ρ ，作为密度矩阵。相应地，它具有以下形式：

$$\begin{aligned} h_\theta(\rho) &= \text{Tr}[U(\theta)\rho^{\otimes k}U^\dagger(\theta)\hat{\mathcal{O}}], \\ &= \text{Tr}[\mathcal{W}_\theta(\rho^{\otimes k})\hat{\mathcal{O}}] \end{aligned} \quad (5.3)$$

其中 k 是量子数据 ρ 的复制数， $\mathcal{W}\theta$ 是一个带有参数 θ 的可训练的量子通道。对于 $k = 1$ ，每个 ρ_i 都被单独处理和测量。对于 $k \geq 2$ ，多次但相同的量子实验结果被存储在量子存储器中，并同时进行处理和测量。在用于量子数据的 QNN 中，不存在数据重新上传层，而幺正近似层可以由一个幺正操作符表示。然而，有趣的是指出，如果数据仅被加载一次，即 $E(\mathbf{x})$ 作为量子态准备，将 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ 映射到具有相同维度的 Hilbert 空间中的 ρ ，则用于经典和量子数据的 QNN 共享相同的框架。

将 AL 的原理与 QNN 相结合指明了通往 QAL 的道路，这是一个有前景的框架（如图 5.1 所示），可以通过有限的量子和经典标记数据来增强模型的效率。由于量子力学的性质，将 QNN 映射到概率模型是显而易见的。例如，对于 $\langle \hat{Z} \rangle$ ，在 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 上的幅度的平方实际上就是标签估计的概率。

5.1.2 几何量子机器学习

如图 5.2(a) 所示，GQML 是一个专门用于设计具有归纳偏置的 QNN 的方案，这些偏置基于要学习的数据中的对称性。具有几何先验的 QNN 可以从很少的数据中进行泛化，这在标记样本数量有限时也是有利的。

GQML 的理念是，无论是在经典领域还是来自量子实验的数据，通常都是对称的，即在某些变换之后性质仍然保持不变 [见图 5.2(b)]。这些性质可以与数据的标签相关联，导致以下定义。

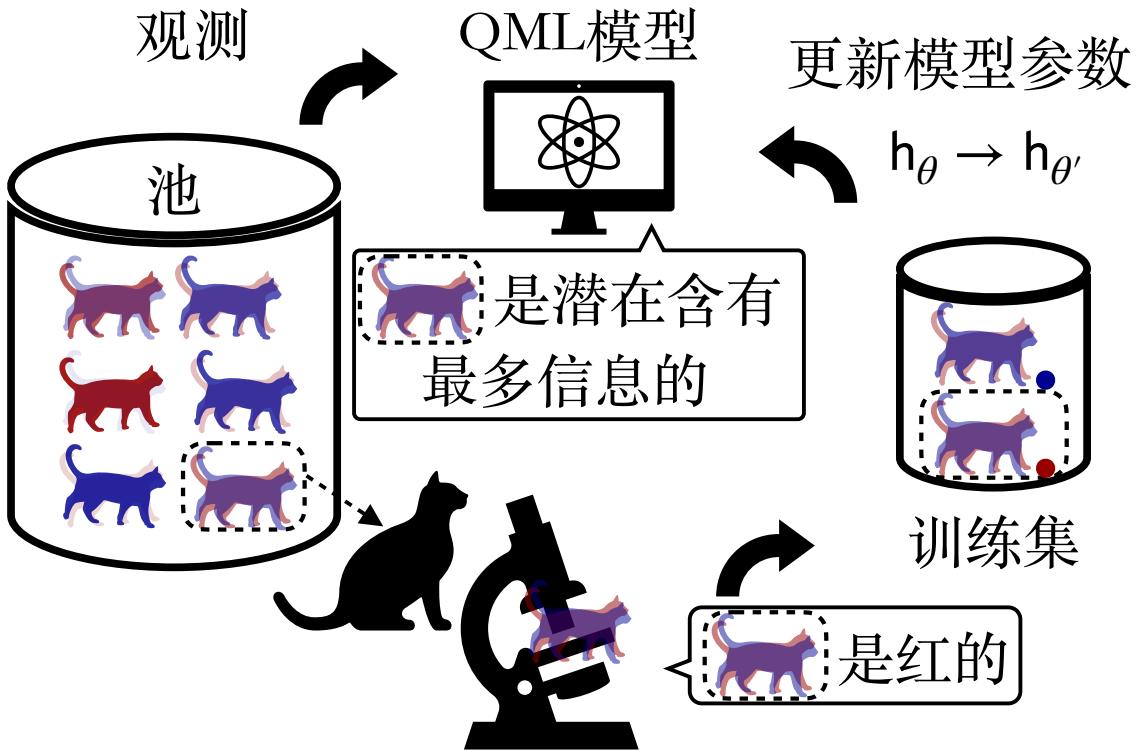


图 5.1 QAL 的示意图。量子数据（或编码为量子态的经典数据）被 QML 模型 h_θ 观察（或上传）。模型估计哪些样本在被专家标注者用实验标记后会引入更多知识。标注者标记被查询的样本，并将其发送到训练集进行监督学习，更新 QML 模型的参数。

定义 2: (量子数据中的标签不变性) \mathcal{G} 是一个群，对于 $\forall U \in \mathcal{G}$, $U\rho U^\dagger$ 的一些性质保持不变。如果对于属于标签 y_i 的所有 ρ_i , 群引入标签不变性，即

$$f(U\rho_i U^\dagger) = f(\rho_i) = y_i, \quad (5.4)$$

定义 3: (经典数据中的标签不变性) \mathcal{S} 是一个对称群，具有表示 R 。如果对于所有 $g \in \mathcal{S}$, 群引入标签不变性，即

$$f(\rho_{R(g)\cdot\mathbf{x}_i}) = f(\rho_{\mathbf{x}_i}) = y_i, \quad \forall g \in \mathcal{S}, \quad (5.5)$$

其中 $\rho_{\mathbf{x}_i}$ 是经典数据 $\Psi(\mathbf{x}_i) : \mathbf{x}_i \rightarrow \rho_{\mathbf{x}_i}$ 的编码结果。

例如，类似象棋的游戏的赢家如果棋盘被旋转或翻转，是不会改变的。在量子力学中， d 维希尔伯特空间中的量子态的纯度在幺正操作 $U(d)$ 下是保持不变的。同时，量子态的纠缠程度，例如，纠缠熵，在局部操作或 SWAP 之后也是不会改变的。换句话说，如果样本的标签取决于这些性质，我们可以构建一个 QML 模型 h_θ ，在群元素的任何作用下保证标签不变性。

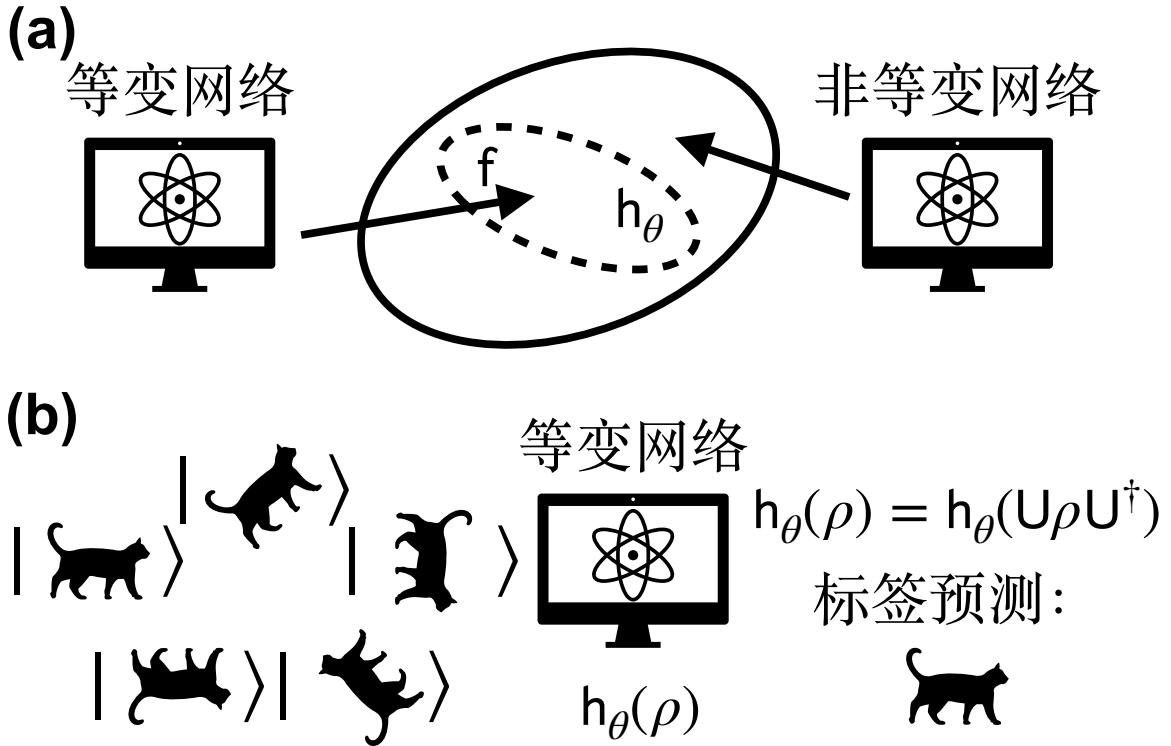


图 5.2 (a) 具有几何先验的等变 QNN h_θ 通过利用量子数据的对称性，减少了逼近标签映射函数 f 的搜索空间。(b) 要设计等变 QNN，量子数据（或编码后的经典数据）在变换后保留了确定标签的性质。

在 k -复制的量子实验中，应满足等变条件以确保 h_θ 在 \mathcal{G} 下不变：

$$\mathcal{W}_\theta \left[U^{\otimes k} \rho_i^{\otimes k} (U^\dagger)^{\otimes k} \right] = U^{\otimes k} \mathcal{W}_\theta \left[\rho_i^{\otimes k} \right] (U^\dagger)^{\otimes k}, \quad \forall U \in \mathcal{G}, \quad (5.6)$$

$$[\hat{\mathcal{O}}, U^{\otimes k}] = 0, \quad \forall U \in \mathcal{G}. \quad (5.7)$$

这样的等变性可以与经典数据通过等变编码 Ψ 关联起来，相对于群元素 g ，如果且仅当存在由编码诱导的幺正表示 $R_q(g)$ 满足

$$\rho_{R(g)\cdot \mathbf{x}_i} = R_q(g) \rho_{\mathbf{x}} R_q^\dagger(g). \quad (5.8)$$

因此，我们假设存在由厄米生成元 G 生成的量子门

$$U_G(\theta) = \exp(-i\theta G), \quad G \in \mathcal{G}, \quad (5.9)$$

将我们引向以下的等变条件。

定义 4: (门不变性) 由 G 生成的门 $U_G(\theta)$ 关于对称性 \mathcal{S} 是等变的, 如果

$$[U_G(\theta), R_q(g)] = 0, \forall \theta \in \mathbb{R}, \forall g \in \mathcal{S}. \quad (5.10)$$

构造等变量子门集的最实用方法之一是所谓的旋转公式, 如下定义所示。

定义 5: (旋转公式) 设 \mathcal{S} 是对称群, R 是 \mathcal{S} 的表示。

$$T_R[G] = \frac{1}{|\mathcal{S}|} \sum_{g \in \mathcal{S}} R(g) G R^\dagger(g), \quad (5.11)$$

定义了一种对算符集的旋转, 满足 $[T_R[G], R(g)] = 0, \forall X$ 和 $g \in \mathcal{S}$ 。

通过这种方式, 我们从门 $U_G(\theta) = \exp(-i\theta G)$ 移动到旋转后的 $U' = \exp(-i\theta T_R[G])$, 确保一个生成元与给定表示对易。虽然本小节中简要介绍了 GQML 的最重要背景, 但我们建议读者参考教材^[150-151,155], 以获取有关不变性、等变性、证明和该领域中的其他方法的更多细节。

5.2 切甜甜圈: \mathcal{Z}_2 对称性

从本节开始, 我们使用等变 QNN 的 QAL 作为模型, 来演示在有限标签下的最佳训练策略。为了说明这个提议, 我们首先考虑一个玩具模型, 即 Alice 和 Bob 之间的名为“切甜甜圈”的游戏。

5.2.1 问题描述

Alice 创建了一个临时数据集, 其中参数空间中的空间分布类似于一个甜甜圈。样本的标签遵循 \mathcal{Z}_2 对称性, 即 $y_i = f(\mathbf{x}_i) = f[R(\sigma) \cdot \mathbf{x}_i] = f(-\mathbf{x}_i)$, 其中 σ 是 \mathcal{Z}_2 群的非同一元素。完整的数据集 (见图 5.3) 根据比例为 3 : 1 : 1 随机分为训练池、验证集和测试集进行进一步处理。Alice 邀请 Bob 训练一个 QML 模型, 该模型用于对甜甜圈进行二元分类, 但只能使用训练池中有限的样本进行标记。Bob 知道样本在参数空间中的位置, 但对标签没有信息。然而, Bob 可以向 Alice 查询所选样本的标签进行监督学习。

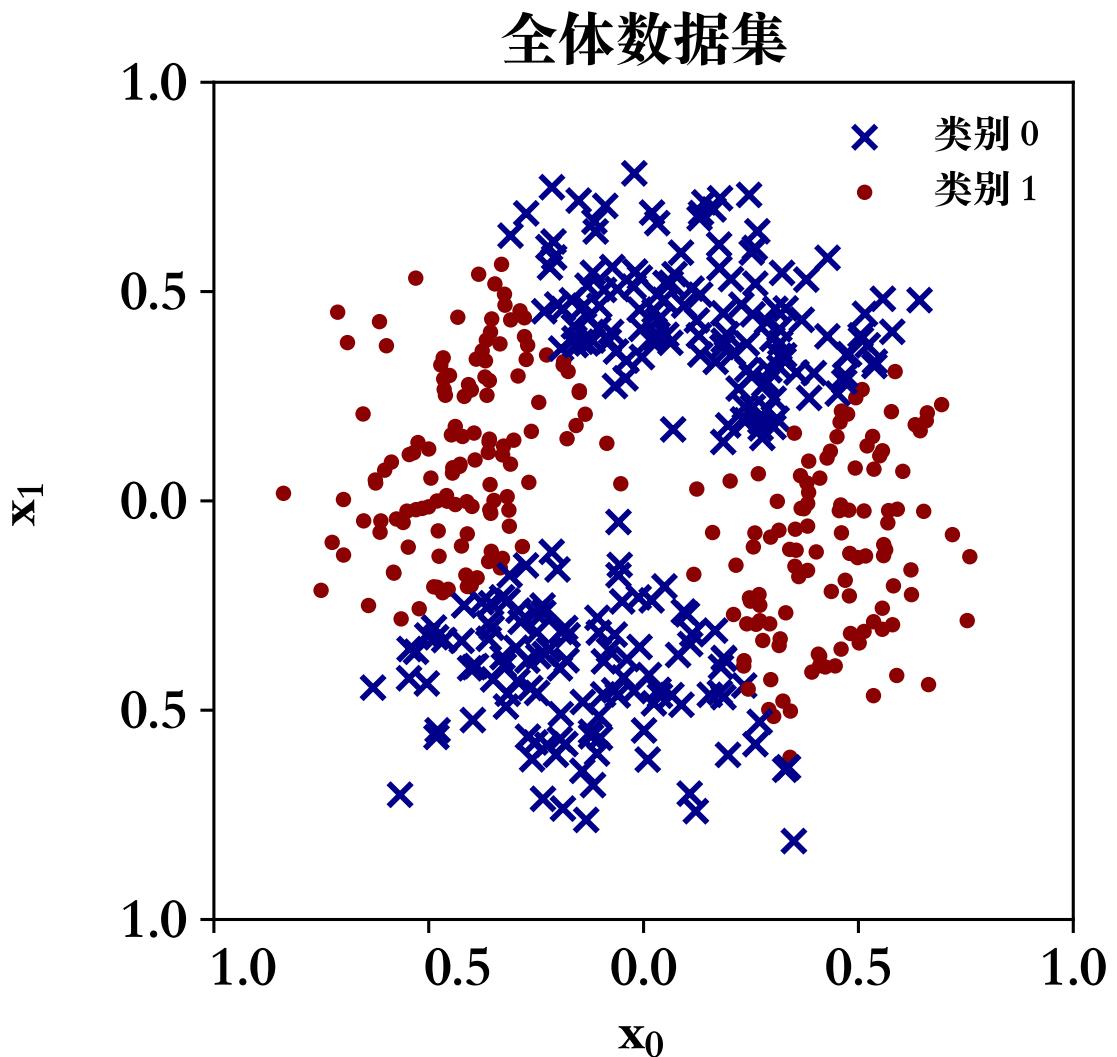


图 5.3 甜甜圈样本数据集，具有 \mathcal{Z}_2 标签对称性。我们通过将极坐标 (r_i, θ_i) 映射到 $\mathbf{x}_i = (x_0, x_1)$ 来生成 500 个样本，其中半径和极角分别遵循高斯分布 $G(\mu = 0.5, \sigma = 0.15)$ 和均匀分布 $[0, 2\pi]$ 。为了确保 \mathcal{Z}_2 标签对称性，我们计算 $\cos(2\theta_i + 0.58)$ ，如果值为负/正，则将样本标记为类别 0/1。随后，数据集按比例 3 : 1 : 1 随机划分为训练池、验证集和测试集，用于 Alice 和 Bob 之间的游戏。

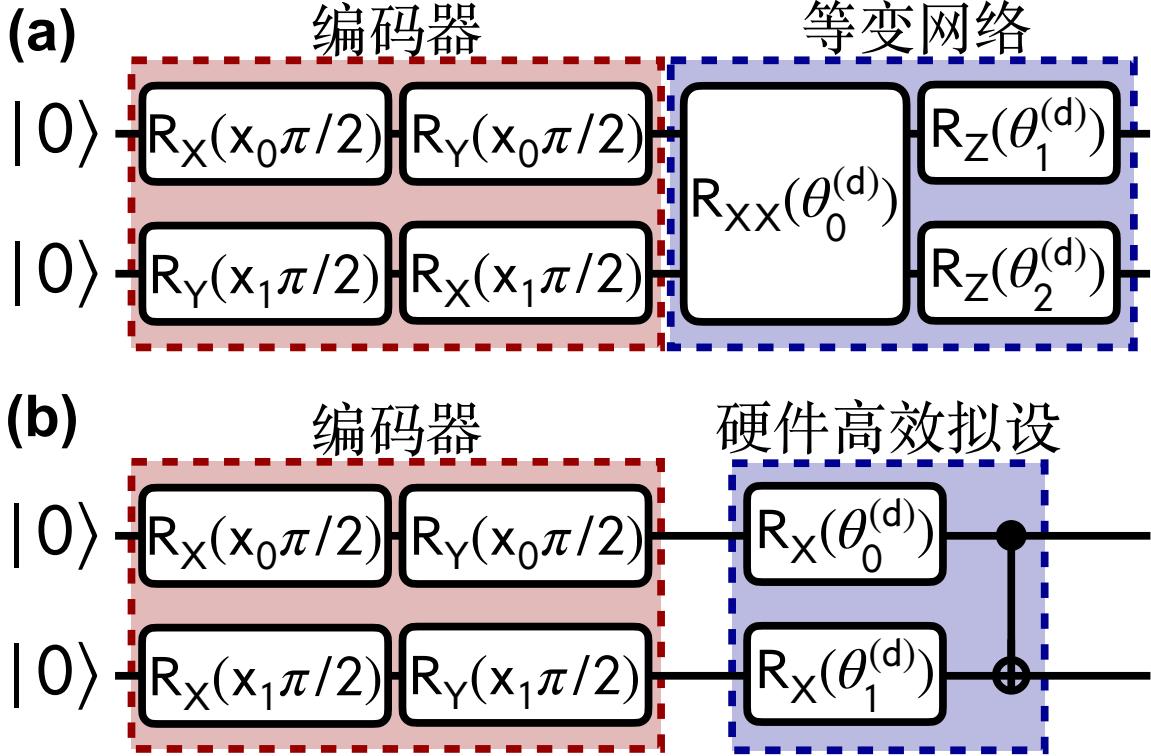


图 5.4 (a) EQNN-Z 的 QNN 结构设计为具有几何先验的量子机器学习模型, (b) HEA 以伪对称性为基准进行设计。这两种 QNN 都在开始时仅加载一次经典数据, 使用编码器。经过重复 d 层的拟设后, 将等变算子 $\langle \hat{O} \rangle = (\hat{Z}_0 + \hat{Z}_1)/2$ 的期望值作为模型的输出进行测量。

5.2.2 量子机器学习模型

现在我们介绍 Bob 在数值实验中使用的 QML 模型。为了将 QAL 与 GQML 结合起来, Bob 选择了一种最先进的等变网络, 称为 EQNN-Z, 如图 5.4(a) 所示, 该网络最初是针对不同数据集的初步工作中提出的^[156]。为了将经典数据编码为量子态, 模型从具有旋转门 R_X 和 R_Y 的编码层开始。我们强调, 在这里, R_X 和 R_Y 的顺序在第一个和第二个量子比特上是不同的, 以打破编码层的一个不希望的伪对称性。我们可以验证, 在数据编码后的波函数中存在 SWAP 伪对称性 $x_i^0 \leftrightarrow x_i^1$, 如果它们是相同顺序的话, 选择 $\langle \hat{O} \rangle = \langle \hat{Z}_0 + \hat{Z}_1 \rangle / 2$ 作为要测量的可观测量会导致相同的期望。

一旦选择了数据编码方式, 它自然地诱导了群元素 σ 的幺正表示。我们用幺正算子 $U(x_i^0, x_i^1) = [R_Y(x_i^0 \cdot \pi/2) \otimes R_X(x_i^1 \cdot \pi/2)][R_X(x_i^0 \cdot \pi/2) \otimes R_Y(x_i^1 \cdot \pi/2)]$ 表示编码器 $\Psi(\mathbf{x}_i) : \mathbf{x}_i \rightarrow \rho_{\mathbf{x}_i}$ 。因此, 我们注意到以下方程

$$U(-x_i^0, -x_i^1) = (\hat{Z} \otimes \hat{Z})U(x_i^0, x_i^1)(\hat{Z} \otimes \hat{Z}), \quad (5.12)$$

其中 $\hat{Z} \otimes \hat{Z} = R_q(\sigma)$ 是非恒等群元素 σ 的编码诱导幺正表示，满足等变编码的条件 (5.8)。

为了构建等变拟设，我们选择三个生成器 $G \in \hat{Z} \otimes I, I \otimes \hat{Z}, \hat{X} \otimes \hat{X}$ ，与幺正表示 $R_q(\sigma) = \hat{Z} \otimes \hat{Z}$ 对易，因为如果 $[G, R_q(g)] = 0$ ，那么 G 的所有幂次与 $R_q(g)$ 对易，满足定义 4(5.10) 的门不变性。我们也可以使用扭转公式(5.11)来验证这一点。

$$T_R[G] = \frac{1}{2} \left[I_{4 \times 4} G I_{4 \times 4} + (\hat{Z} \otimes \hat{Z}) G (\hat{Z} \otimes \hat{Z}) \right] = G, \quad (5.13)$$

扭转后的生成器 $T_R[G]$ 不变。因此，我们有单比特和双比特门 (5.9)

$$\begin{aligned} R_Z(\theta) &= \exp(-i\theta \hat{Z}), \\ R_{XX}(\theta) &= \exp[-i\theta(\hat{X} \otimes \hat{X})], \end{aligned} \quad (5.14)$$

这导致了 d 次重复的拟设层，有 $3d$ 个独立参数

$$U_{\text{EQNN}}(\boldsymbol{\theta}^{(d)}) = [R_Z(\theta_1^{(d)}) \otimes R_Z(\theta_2^{(d)})] R_{XX}(\theta_0^{(d)}). \quad (5.15)$$

通过要测量的等变算子，即， $(\hat{Z} \otimes \hat{Z})(\hat{Z}_0 + \hat{Z}_1)(\hat{Z} \otimes \hat{Z})/2 = (\hat{Z}_0 + \hat{Z}_1)/2$ ，我们确保 EQNN-Z 在网络结构中利用几何先验来保持标签对称性。

同时，我们需要构建一个没有几何先验的模型，通过使用硬件高效拟设 (HEA) 来最大化表达能力。我们通过在两个量子比特上以相同方式排序 R_X 和 R_Y 门来引入不希望的伪对称性。HEA 包括两个独立参数化的 R_X 门，它们不属于等变门集合，并且一个 CNOT 门用于纠缠两个量子比特。

$$U_{\text{HAE}}(\boldsymbol{\theta}^{(d)}) = \text{CNOT}[R_X(\theta_0^{(d)}) \otimes R_X(\theta_1^{(d)})]. \quad (5.16)$$

要测量的算子与 EQNN-Z 中的相同。这个 QNN (参见图 5.4(b)) 也应该作为基线进行训练，以验证 GQML 并研究 QAL 中模型的选择。

5.2.3 模型训练

QAL 的假设是，通过为少量标记数据中 QNN 估计的信息最丰富的样本标记，可以实现令人满意的模型性能。在实施 QAL 之前，我们需要验证模型是否能够使用完整信息对两个类别进行分类，这意味着训练池中的所有样本都被标记并用于模型训

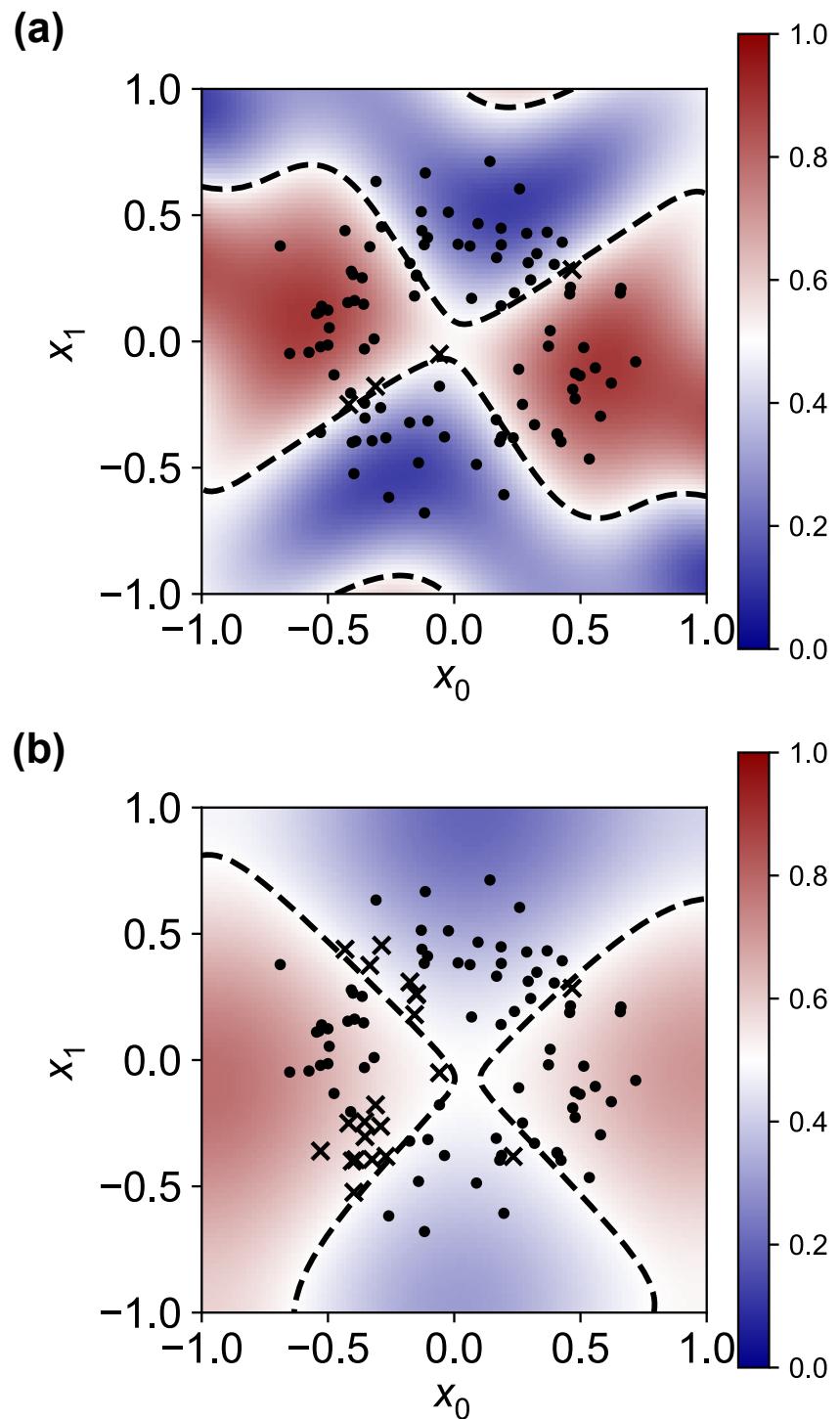


图 5.5 在参数空间上的模型估计和 (a) 具有几何先验的 EQNN-Z 和 (b) 作为基线 QNN 的 HEA 的决策边界。这些模型是使用训练池中所有样本的完整标签进行训练的。在测试集中被正确分类和错误分类的样本分别绘制为点和十字。虚线曲线描述了切甜甜圈的决策边界。

练。QNN 中的所有参数都是在 $[-\pi, \pi]$ 范围内的均匀分布中随机初始化的。我们使用二元交叉熵作为损失函数

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathcal{U}}, \boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{|\tilde{\mathcal{U}}|} \sum_{y_i \in \tilde{\mathcal{U}}} [y_i \log \langle \hat{y}_i \rangle + (1 - y_i) \log(1 - \langle \hat{y}_i \rangle)], \quad (5.17)$$

其中 $\tilde{\mathcal{U}}$ 是训练集, $y_i = 0/1$ 是样本 \mathbf{x}_i 的真实标签, $\langle \hat{y}_i \rangle = (\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle + 1)/2$ 是基于测量算符的期望值的 QNN 的重新归一化输出 $\hat{\mathcal{O}} = \langle \hat{Z}_0 + \hat{Z}_1 \rangle / 2 \in [-1, 1]$ 。我们使用 Adam 优化器优化损失函数, 学习率为 0.1, 迭代 100 次, 不使用批处理方法。在最小化损失函数的同时, 我们监控验证集上的分类准确度, 并记录历史最佳准确度, 以在测试集上评估模型。在图 5.5(a) 中, 我们展示了模型在参数空间上的估计和两个类别之间的决策边界, 使用 $d = 3$ 层等变模型, 保持了严格的 Z_2 标签对称性, 实现了 96% 的令人满意的准确率。为了公平比较 EQNN-Z 和 HEA, 我们必须将电路深度限制为相同的级别。注意 $RXX(\theta)$ 作为 Mølmer-Sørensen 门在所有量子平台上都无法直接实现。因此, 我们将其分解为 $RXX(\theta) = (H \otimes H)CNOT[I \otimes R_Z(2\theta)]CNOT(H \otimes H)$, 以实现最大的兼容性。通过仅在分解后计算二量子门的数量来计算电路深度, 我们将 HEA 的层数设置为 $d = 6$, 用于基准测试的数值实验, 结果显示准确率为 79%, 如图 5.5(b) 所示。在对 40 种不同的随机初始化下对训练池中的全部样本进行 EQNN-Z 和 HEA 训练后, 我们实现了平均准确率为 $(91.63 \pm 4.24\%)$ 和 $(77.30 \pm 2.06\%)$, 在训练 49.88 ± 28.62 和 34.40 ± 15.23 次历史性最佳后评估验证集, 证明了我们的超参数选择足以实现模型收敛。

5.2.4 数值试验

在证明了 GQML 可以通过足够数量的标记样本实现高准确性后, Bob 开始使用基于模型的 USAMP 策略进行切甜甜圈, 并采用 QAL。请注意, 对于二元分类, 传统 USAMP 中的三种抽样策略是等价的; 也就是说, 如果样本在其他样本中距离决策边界最近, 则将查询该样本。基于损失函数, Bob 将模型的置信度定义为 $|\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\mathbf{x}}|$, 并查询样本 $\mathbf{x} QAL = \text{argmax}_{\mathbf{x}} |\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\mathbf{x}}|$ 的真实标签。在图 5.6 中, 我们通过记录决策边界的变化和相应的查询样本, 展示了 EQNN-Z 和 HEA 的 USAMP 抽样行为, 分别在测试集上达到 95% 和 69% 的准确率。值得注意的是, 在 EQNN-Z 的情况下, Bob 仅通过向 Alice 查询了 6 个标签就实现了 QAL 和 GQML 结合的最满意准确率, 接近初

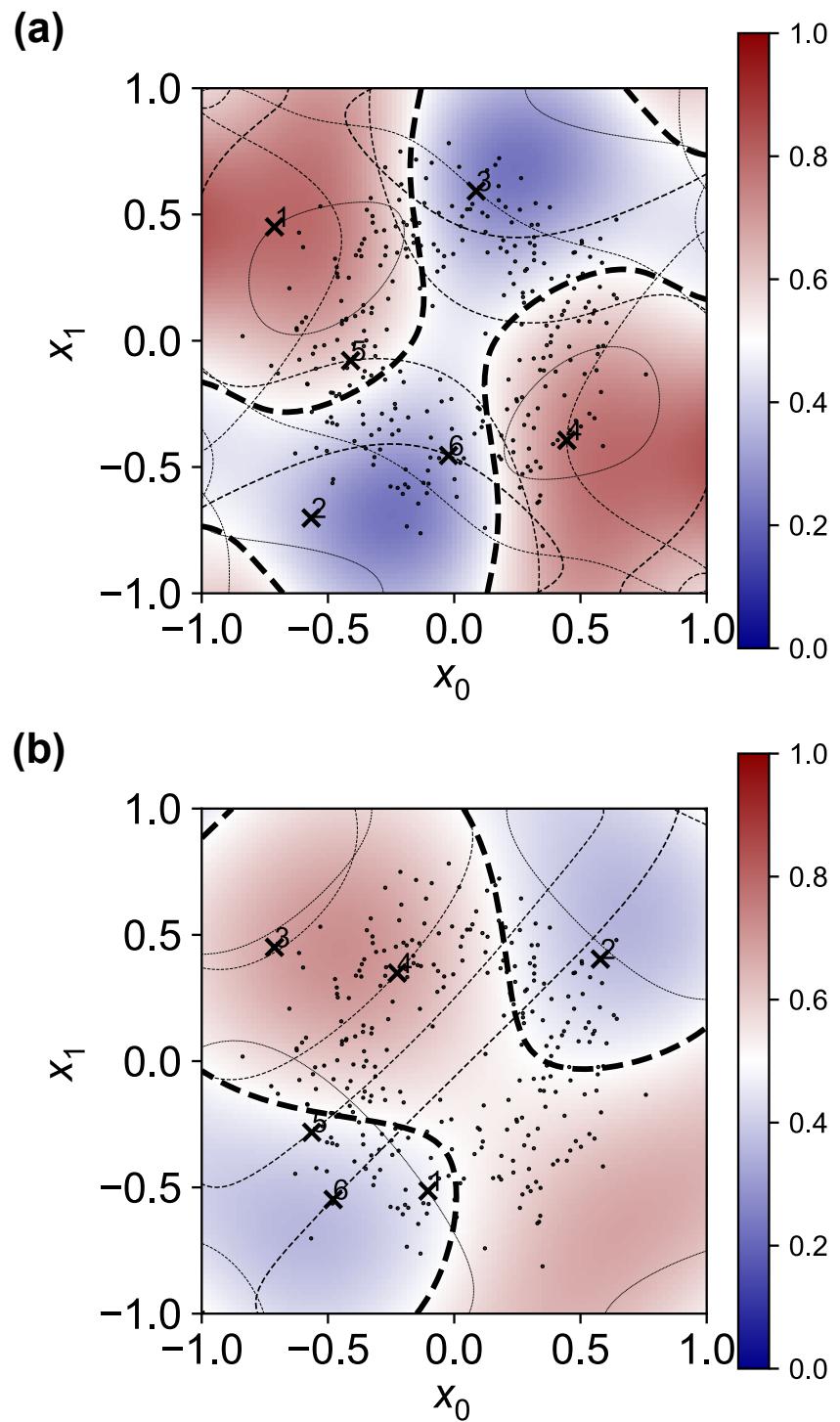


图 5.6 (a) EQNN-Z 和 (b) HEA 为模型对应的 USAMP 的采样行为。我们绘制了每次标签查询后决策边界的变化，从细到粗的线条。标记了被查询样本的位置和顺序，用十字表示，而训练池中的其他可用样本则以点表示。

步实验估计的理论最大值。

一旦我们确定了电路深度和可行标签的数量，我们就可以公平地比较不同的抽样策略和网络结构。在图 5.7(a) 中，我们展示了我们的 QAL 和 GQML 结合的定量基准测试，对比了随机抽样和没有几何先验的网络作为基线。QAL 有效性的最具说服力的证据是，USAMP 在 EQNN-Z 上表现优于随机抽样，两者之间的准确率差异符合一个标准偏差。我们还通过定义相似度为编码后的保真度 $\text{Sim}(\mathbf{x}, \mathbf{x}(u)) = [\text{Tr}(\sqrt{\sqrt{\rho_{\mathbf{x}}} \cdot \rho_{\mathbf{x}(u)} \cdot \sqrt{\rho_{\mathbf{x}}}})]^2$ 将 定义 1 扩展为量子版本。请注意，由于训练池中的样本在角向上稠密且几乎均匀，因此这样的数据驱动抽样在这个特定问题中会表现得像随机抽样。因此，我们将保真度抽样策略视为 USAMP 和密度加权抽样的组合（见绿色十字）：

$$\mathbf{x}_{\text{FSAMP}} = \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}} \left\{ |\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\mathbf{x}} - 0.5| + \frac{\lambda}{U} \sum \left[1 - \text{Tr}(\sqrt{\sqrt{\rho_{\mathbf{x}}} \rho_{\mathbf{x}(u)} \sqrt{\rho_{\mathbf{x}}}}) \right]^2 \right\}, \quad (5.18)$$

这里 $\lambda = 0.1$ 是数值实验中的超参数。可以注意到，USAMP 和保真度抽样的性能几乎无法区分，因为训练集中没有奇异样本。换句话说，保真度抽样只能修正导致更好分类的抽样行为 [见图 5.7(b)]，这是我们的数据集没有遇到的问题。同时，USAMP 和随机抽样的性能也无法区分，因为 HEA 答案对于该问题来说不是一个合适的模型，考虑到其在全标签信息下的最大平均正确率为 77.30%。

通过这个玩具模型，我们证明了如果有足够的可学习性和模型表达能力与等变性之间的权衡，那么 QAL 是有效的。此外，如果经典数据 \mathbf{x}_i 在定义域 \mathcal{X} 中的分布是连续的（例如，类似甜甜圈的数据集）或者来自量子实验的输出 ρ_i 在整个希尔伯特空间中（例如，根据纯度对单量子比特密度矩阵进行分类），那么它也应该适用于具有离散或连续标签对称性的二元分类数据集。这样，模型可以轻松选择最靠近决策边界的样本进行标记，使优化后的抽样行为比那些到决策边界几乎相同距离的抽样更加有效。

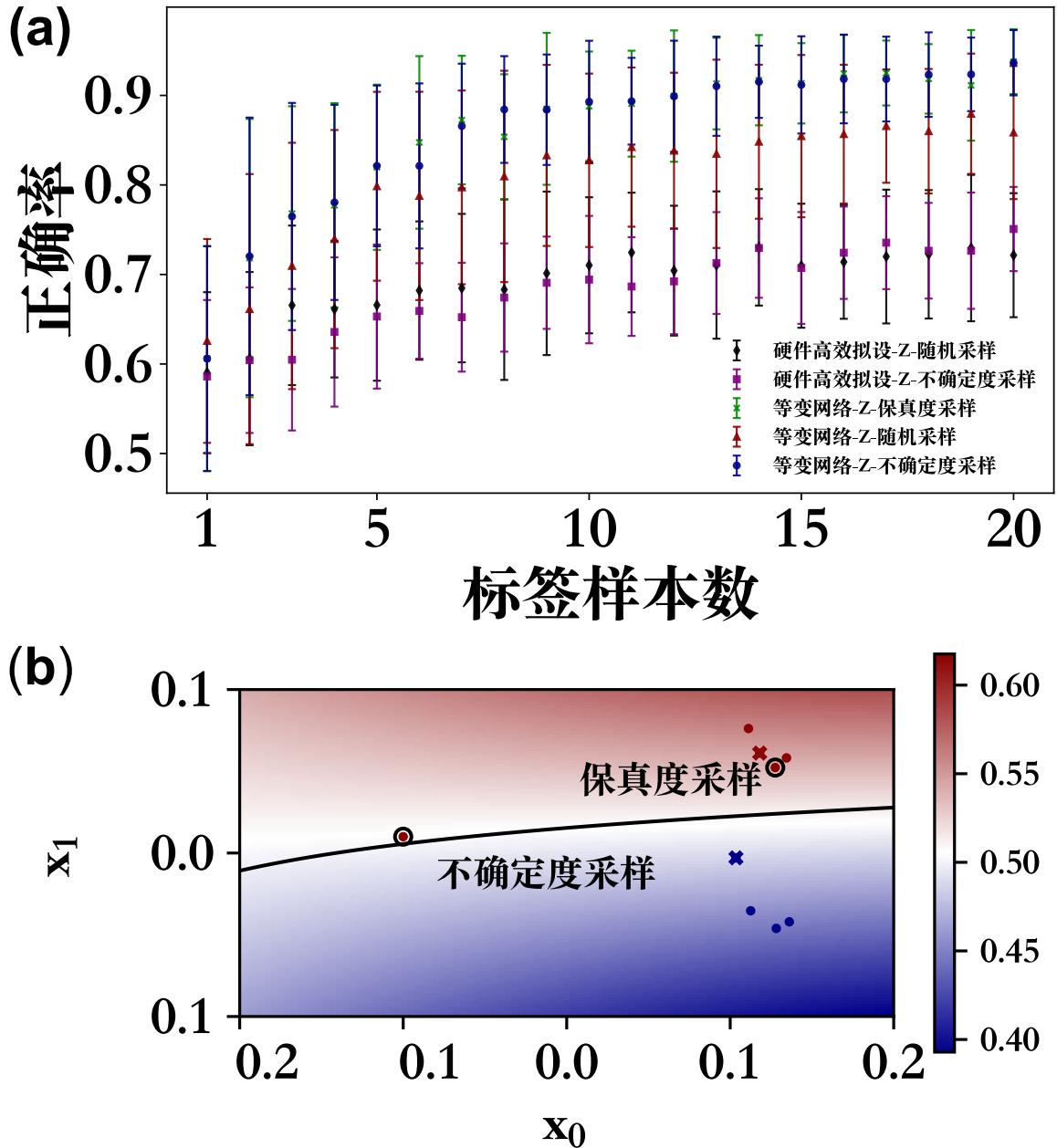


图 5.7 (a) 随机抽样、USAMP 和保真度抽样作为不同的抽样策略解决切甜甜圈问题的量子机器学习模型的平均正确率。误差线表示一个标准偏差。(b) 在一个特定数据集上的纠正抽样行为。模型是 $d = 6$ HEA-Z，只用了两个查询样本（红色和蓝色十字）。根据 USAMP，左侧圈出的样本最接近决策边界。然而，根据 FSAMP (5.18)（超参数 $\lambda = 1$ ），通过考虑数据分布，查询右侧圈出的样本可能会引入更多信息。

5.3 井字棋: \mathcal{D}_4 对称性

5.3.1 问题描述

在研究了使用连续数据编码的 QAL 后, 我们使用井字棋作为另一个玩具模型来研究离散数据编码上的性能。tic-tac-toe 棋盘有三种类别: ”cross \times 赢”、”circle \circ 赢”和”draw -”, 可以通过检查任何玩家 (\times 或 \circ) 是否在行、列或对角线上连续放置相同标记来分类。同样, Alice 拥有来自 500 场 tic-tac-toe 游戏的结果, 按照 $3 : 1 : 1$ 的比例分为训练池、验证集和测试集。Alice 要求 Bob 使用从池中选择的有限标记样本来为这个多类别分类问题训练一个 QML 模型。具有讽刺意味的是, Bob 在井字棋方面缺乏常识, 所以他即使可以完全访问所有棋盘的配置, 也无法推断出赢家。因此, 就像他在切甜甜圈时所做的那样, 他必须在从池中选择一个棋盘后向 Alice 请求标签信息。

5.3.2 量子机器学习模型

尽管 Bob 缺乏经典确定性分类方法的常识, 但他是群论的专家。他决定将游戏的对称性纳入模型设计中。如图 5.8 左侧所示, 任意棋盘的标签在 $0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$ 的旋转和相应的关于垂直轴的翻转下保持不变。Bob 明白这种对称性是由具有 8 阶的二面角群 \mathcal{D}_4 刻画的。

这种对称性确保了角落保持映射到角落, 边缘映射到边缘, 中间在操作后保持不变。这启发了使用一热编码, 将棋盘上的每个位置映射到一个量子比特, 简化了编码诱导的标签对称性 \mathcal{D}_4 的表示为 SWAP。棋盘被数字化为 $\mathbf{g} = g_0, \dots, g_8$, 其中每个位置的状态为 $g_i = +1, -1, 0$, 对应于 $\times, \circ, -$ 。然后将它们映射到旋转角度 $x_i = 2\pi g_i/3$, 用于 $R_X(x_i)$ 门的编码 [见图 5.8 的中间部分]。在 QNN 结构中被标记为”T”的编码器层会在电路中反复出现以进行数据重新上传。因此, 排列型对称性导致了具有可视化网格上的对称性的等变门。例如, $\pi/2$ 角度的旋转应该在以下映射后保持标签不变: 角落的映射 $0 \rightarrow 6 \rightarrow 8 \rightarrow 2$ 和边缘的映射 $1 \rightarrow 3 \rightarrow 7 \rightarrow 5$ 。这对应于操作 $\text{SWAP}_{06}\text{SWAP}_{28}\text{SWAP}_{08}$ 和 $\text{SWAP}_{37}\text{SWAP}_{15}\text{SWAP}_{35}$, 分别。类似地, 垂直翻转 $0 \leftrightarrow 2$, $3 \leftrightarrow 5$, $6 \leftrightarrow 8$ 对应于 $\text{SWAP}_{02}\text{SWAP}_{35}\text{SWAP}_{68}$ 。因此, 单量子比特门应该作用于同一类别的量子比特, 具有相同的参数, 即 $R_Y(\theta_{1j}^{(l,d)})R_X(\theta_{0j}^{(l,d)})$, 其中 $j = \{\text{”C”, ”E”, ”M”}\}$

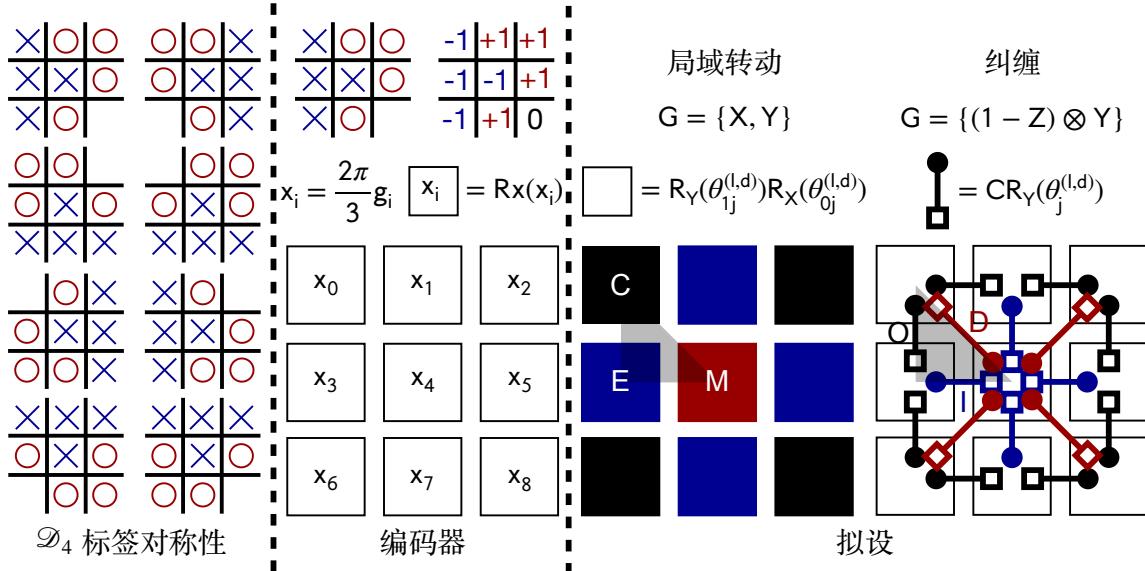


图 5.8 在井字棋游戏中，获胜者与旋转和翻转无关，表明具有二面角群 D_4 的标签对称性。棋盘 \mathbf{g} 可以被数字化为 QML 任务中 $g_i \in 1, 0, -1$ 中的整数序列。编码器（表示为”T”）由用于数据编码的参数为 $x_i = \frac{2\pi}{3}g_i$ 的 R_x 门组成。具有几何先验的拟设由角落（黑色”C”）、边缘（蓝色”E”）和中间（红色”M”）上的单量子比特门 (R_X 和 R_Y) 组成，其中同一类别、重复和层中的门共享可训练参数。受控 R_Y 门作为纠缠器连接角落与边缘（黑色”O”）、边缘与中间（蓝色”I”）以及中间与角落（红色”D”），构建阴影三角形以覆盖带有标签对称性的量子比特网格。QNN (l, d) 具有 l 层可训练块，每个块以编码器”T”开始，后跟拟设”CEMOID”的 d 个排列。

表示角落 (C)、边缘 (E) 和中间 (M) 上的量子比特。纠缠门也应该遵循这种对称性，例如， $CR_Y(\theta_j^{(l,d)})$ ，将所有相邻的角落对称地连接到边缘，导致角落到边缘 (O)、边缘到中间 (I) 和中间到角落 (D)。门的对称性在图 5.8 的右侧进行了说明。门集的正确性可以通过计算降低对称性的 twirling 来验证，确保例如量子比特 0 和量子比特 2 之间的对称性得到满足。对于带有生成器 X_0 的单量子比特门 R_X ，我们有 twirling 公式

$$\begin{aligned} T_R[X_0] &= \frac{1}{2}[IX_0I + SWAP_{02}X_0SWAP_{02}] \\ &= (X_0 + X_2)/2, \end{aligned} \quad (5.19)$$

通过 $\exp(-i\theta T_R[X_0])$ 得到量子比特 0 和量子比特 2 上的 R_X 门，将所有参数中的系数吸收。与此同时，对于以量子比特 4 为控制量子比特且具有生成器 $G = (1 - Z)4 \otimes Y_0$ 的两量子比特门 CR_Y ，公式如下

$$T_R[G] = \frac{1}{2}\{I_{402}[(I - Z)_4 \cdot \otimes Y_0 \otimes I_2]I_{402}$$

$$\begin{aligned}
& + [I_4 \otimes \text{SWAP}_{02}][(I - Z)_4 \otimes Y_0 \otimes I_2][I_4 \otimes \text{SWAP}_{02}] \\
& = \frac{1}{2}[(I - Z)_4 \otimes Y_0 \otimes I_2 + (I - Z)_4 \otimes I_0 \otimes Y_2], \tag{5.20}
\end{aligned}$$

生成作用于量子比特 0 和量子比特 2 的具有相同参数的 CR_Y 门。具有几何先验的 QNN 由 l 层组成，每层包含一个编码器”T”，后跟 d 次等变拟设”CEMOID”的重复。请注意，拟设配置可以是”CEMOID”的排列，而不会丢失等变性。在数值实验中，我们采用 $(l, d) = (2, 5)$ 的 QNN 配置，其结构用”TCEMOIDCEMOIDCEMOIDCEMOIDCEMOIDTCEMOIDCEMOIDCEMOIDCEMOIDCEMOID”表示。将 QNN 应用于 $|0\rangle^{\otimes 9}$ 后，通过测量等变观测量来获取每个类别的预测

$$\hat{O}_o = \frac{1}{4} \sum_c Z_j = \frac{1}{4}[Z_0 + Z_2 + Z_6 + Z_8], \tag{5.21}$$

$$\hat{O}_- = Z_M = Z_4, \tag{5.22}$$

$$\hat{O}_x = \frac{1}{4} \sum_E Z_j = \frac{1}{4}[Z_1 + Z_3 + Z_5 + Z_7] \tag{5.23}$$

得到期望值向量 $\hat{\mathbf{y}} = [\langle \hat{O}_o \rangle, \langle \hat{O}_- \rangle, \langle \hat{O}_x \rangle]$ ，其中每个期望值都在 $[-1, 1]$ 范围内，并找到最大期望值。

5.3.3 数值实验

在应用 QAL 之前，我们需要评估从训练池中标记了所有样本的模型性能。我们使用均方误差（MSE）损失函数

$$\mathcal{L}(\tilde{\mathcal{U}}, \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{\tilde{\mathcal{U}}} \sum_{\mathbf{g}_i \in \tilde{\mathcal{U}}} \|\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{g}_i, \boldsymbol{\theta}) - \mathbf{y}_i\|^2, \tag{5.24}$$

其中 \mathbf{y}_i 是棋盘 \mathbf{g}_i 的一热编码标签，对于正确的类别分配为 $+1$ ，对于其他类别分配为 -1 。使用 Adam 优化器最小化损失函数，学习率为 0.1，在不进行批处理的情况下进行 200 轮。所有设置，包括数据集分离、参数初始化方法和停止标准，均与切甜圈实验中使用的设置保持一致。我们选择均方误差（MSE）损失函数而不是交叉熵损失函数，以加快学习过程，减少迭代轮数并提高学习率。我们对模型使用 40 种不同的随机参数初始化方法进行训练，覆盖训练池中的所有标记棋盘。在平均训练

了 127.58 ± 61.20 轮之后，达到了 $76.89 \pm 6.54\%$ 的准确率，我们得出结论，超参数设置是合适的，模型能够对井字棋棋盘进行分类。它还与其他数值实验的结果显示出良好的一致性，这些实验首次提出了这个等变 QNN 家族^[15]。值得注意的是，我们可以在 40 个结果中挑选出 88.89% 的准确率，显著优于 33.33% 的基线，对应于在三分类问题中的盲目猜测。

对于三分类问题，这些采样策略不再等效。此外，有必要将期望值向量映射到概率分布以用于 USAMP。这可以通过使用 softmax 函数来实现

$$P_{y_i} = \frac{\exp(y_i)}{\exp(\langle \hat{O}_o \rangle) + \exp(\langle \hat{O}_- \rangle) + \exp(\langle \hat{O}_x \rangle)}, \quad (5.25)$$

其中 y_i 是向量中的期望值。因此，当评估不确定性时，可以考虑所有类别的概率，通过熵采样

$$\mathbf{g}_{\text{ES}} = \underset{\mathbf{g}}{\operatorname{argmax}} \left[- \sum_j P_\theta(y_j | \mathbf{g}) \log P_\theta(y_j | \mathbf{g}) \right] \quad (5.26)$$

根据模型估计来查询更具信息量的棋盘 \mathbf{g} 。在图 5.9 中，我们展示了在 40 种不同的参数初始化情况下，对于井字棋的 QAL 进行了边界采样。与随机采样进行基准比较后，QAL 在从训练池中查询了 20 个棋盘之后未能超越基线。

井字棋场景中量子主动学习的无效性可以归因于几个因素。首先，井字棋棋盘在信息性方面可能没有显著变化。即使模型认为特定的棋盘更具信息性，标记它后的不确定性减少可能不足以与标记其他棋盘相比。此外，在高维输入空间（如井字棋）的多类别分类任务中，与特定类别相关的观察结果可能分布在不连通的决策子空间中。这种复杂性导致了偏向性的采样行为，类似于只关注单个气泡表面而不考虑输入空间中的更广泛分布。在我们的实验中，我们观察到 QAL 主要查询属于“交叉”和“圈圈”类别的样本，而忽略了“平局”样本。这种偏差导致了不平衡的训练集，最终导致了与随机采样相比的性能下降，后者确保了跨类别更多样化的样本选择。

为了进一步调查我们的假设，Bob 使用了三个棋盘来代表每个类别的预设值来初始化模型。后来，Bob 采用了熵采样，并将其性能与随机采样进行了比较（如图 5.9 中的黑色菱形所示）。有趣的是，使用预设值的熵采样最初表现优于随机采样，突显了包含信息性样本的好处。然而，随着更多的样本添加到训练集中，由于其偏向性的采样行为，随机采样最终超过了 QAL。在图 5.10 中，我们考虑了问题的简化版本，仅

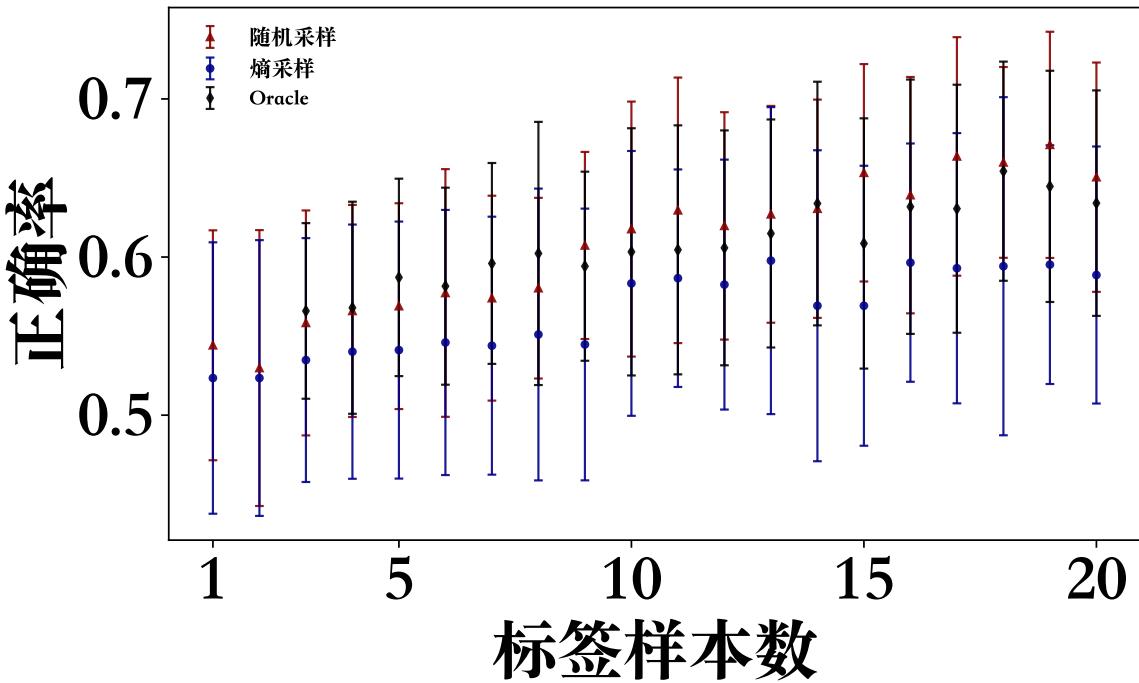


图 5.9 量子机器学习模型的平均正确率，采用随机采样、熵采样以及具有未偏置预先训练集的熵采样作为不同的采样策略，用于对井字棋游戏进行分类。误差条表示一个标准偏差。

关注具有确定获胜者（ \times 或 \circ ）的棋盘的分类。虽然损失函数保持不变，但我们修改了观测向量 $\hat{\mathbf{y}}$ ，仅包括这两个类别的期望值。在这种无偏的情况下，QAL 表现出明显优势，证实了我们关于 QAL 在多类别分类任务中失败的假设。这些额外的实验进一步支持了我们的论点。

5.4 结论

我们引入了主动学习 (QAL) 作为一种实现量子机器学习高效性的方法，该方法仅使用有限数量的样本。我们利用量子神经网络 (QNN) 来估计样本池中未标记样本的不确定性，并通过人工注释者迭代地标记查询样本，从而扩展训练集。通过将这一形式主义与几何先验的广义量子机器学习 (GQML) 相结合，具有几何先验的 QNN 引入了等变性和可表达性之间的权衡，从而在最小样本数量下显著增强了模型性能。我们的方法通过在两种不同场景下进行的数值实验进行了阐释：一种是具有二元分类的 Z_2 对称性的切甜甜圈问题，另一种是具有三元分类的 D_4 对称性的井字棋问题。与随机采样进行基准测试时，我们的方法产生了积极和消极的结果，突显了 QAL 的微妙性质。我们对消极结果进行了分析，并通过额外的专门设计的数值实

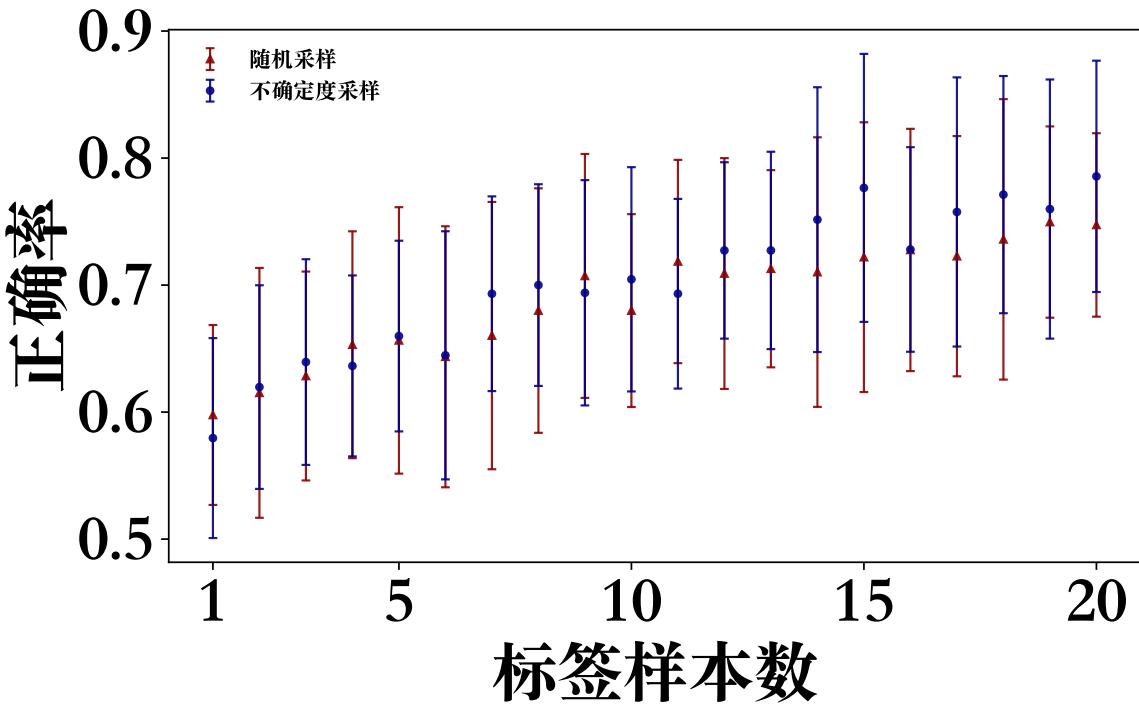


图 5.10 用随机采样和不确定性采样进行二元分类的量子机器学习模型在分类井字棋游戏中的平均正确率。误差线表示一个标准偏差。

验得到了证实。我们的研究结果表明，QAL 的有效性取决于查询行为的适当性。显然，标准的采样策略并非对所有问题都适用，因为它们可能导致偏向性的采样行为，从而影响模型性能。这种现象并不是 QAL 所特有的，在上一章节的经典机器学习中已经观察到，在应用于带有量子数据的多类别分类任务中的贝叶斯模型中尤其如此。为了减轻这种偏向性，必须优化采样策略，例如对具有非标准分布的数据集使用密度加权采样。因此，未来研究的一个有趣方向是探索 QAL 策略，以减轻这里所示的偏向性采样行为，这超出了本研究的范围。

这项研究的一个自然延伸是将 QAL 应用于量子数据，特别是从量子实验生成的数据。QAL 可以有效地与 GQML 协作，因为量子数据通常具有取决于所采用的分类方法的标签对称性。因此，利用这种协同作用可以显著提高具有几何先验的 QNN 的性能，这些 QNN 专为分析传统和量子增强实验的输出而设计。

另一个值得探索的途径涉及将 QAL 与各种其他量子机器学习模型相结合。虽然 GQML 提供了一种增强少样本学习能力的有效方法，但它并不总能捕捉到未标记数据集中存在的所有相关对称性。因此，有趣的是研究替代量子机器学习模型的潜力，例如量子支持向量机^[163]、量子卷积神经网络^[164]或循环量子神经网络^[165]，以解决

具有有限样本的各种问题。此外，对于需要少样本学习的应用，元学习技术可能非常有价值^[166]，通过优化经典参数来有效初始化量子神经网络。这一提案的可行性已在关于量子近似优化算法的初步研究中得到证明^[167]。

在以上所有章节中，我们展现了以强化学习、主动学习为主的机器学习算法在量子调控、量子信息领域的问题的应用。值得注意的是，其中多个模型中有弱测量理论的参与，例如提取量子系统状态用于调控决策，从编码经典信息的量子系统中提取信息用于分类等。通过对弱测量这一奇妙理论的研究与运用，使我们在下一章节中提出了一个新颖的，与机器学习无关的处理量子调控、量子信息问题的新范式。

第六章 弱测量诱导的超振荡量子调控

在之前章节中介绍的工作积累下，我们通过对弱测量理论、量子调控问题、量子信息问题的研究，意识到可以使用弱测量直接驱动受控目标，在受控目标的子空间上构造出由弱测量诱导的超振荡算符。这一方案将为我们带来独立于已有量子调控、量子算法的新范式。

超振荡的概念最初是在 1980 年代末由 Y. Aharonov 等人在一项关于量子测量的著名研究的脚注中提出的^[34]。当一个带限函数以其谱内允许的方式比其最快的傅里叶分量任意快地变化时，就会出现这种现象。换句话说，超振荡波是一个在局部振荡频率远高于全局带限波的整体频率的局域特征。这种直观但在物理上允许的属性被 M. Berry 等人称为快于傅里叶^[168-169]，这为通过打破衍射障碍实现的光学应用提供了希望^[170]。它已经应用于超分辨成像，使用时空调整的光束操纵纳米粒子、电子和原子^[171-174]。

与此同时，随着最先进的量子技术的出现，巧妙地利用弱测量的方案现在可用于各种量子应用^[175]，包括量子引导^[176]、量子层析成像^[177-178]、几何信息^[179-181]和跃迁检测^[182-183]。此外，通过将算符的放大弱值从反复预选和后选的系统编码到仪表的耦合量子态中，顺序弱测量实现了超振荡的产生^[184]。这启发我们构建一个使用超振荡的通用量子控制框架，适用于那些需要对特定的量子态调控方案进行量子信息编码的应用场景，如量子状态调控和波包操控。

在这章节中，基于过去几年对量子调控、量子算法、量子弱测量的持续研究，我们提出了一个名为超振荡量子控制 (SQC) 的框架。SQC 通过测量诱导的超振荡算符函数和预选与后选的最佳设计，高效地操控仪表波函数。我们展示了两个初步的结果：单个被约束离子的非绝热输运和加速的量子搜索算法。在相同的能量成本^[185]下，考虑了概率成本后，SQC 通过轻微扰动基态，提供了比传统绝热控制/计算更高的保真度，类似于量子绝热捷径。此外，通过研究开放系统中的噪声，我们揭示了选择轮次和保真度之间的权衡，展示了 SQC 方案速度和鲁棒性的两种机制及其后果。

6.1 超振荡量子调控框架

在量子控制中，弱测量的传统应用是从系统中提取量子信息，并将其转换为具有低信噪比的经典信息。因此，可以部分地监测量子态并做出决策，类似于闭环控制。

相反，SQC 是一个用于通过顺序弱测量驱动量子系统的新型框架。SQC 的哈密顿量是弱测量极限下的最一般形式，具有两个自由度，一个作为系统算符 \hat{S} ，另一个作为仪表算符 \hat{A} ，即 $H_{\text{SQC}} = g\hat{S} \otimes \hat{A}$ 。一旦预选系统 $|i\rangle$ 在纠缠后被后选为 $|f\rangle$ ，系统算符在仪表上记录了一个弱值 $S_w = \langle f|\hat{S}|i\rangle/\langle f|i\rangle$ 。

区别于原始的具有 N 个系统和仪表副本的超振荡外，我们在系统的 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 之间执行顺序选择，如图 6.1 所示，产生了一个在仪表波函数上的超振荡算符函数 $f(\hat{A})$ ，形式如下：

$$|\Psi_A^F\rangle = |\langle f|i\rangle|^N \underbrace{\left[\cos\left(\frac{gT}{\hbar} \frac{\hat{A}}{N}\right) - iS_w \sin\left(\frac{gT}{\hbar} \frac{\hat{A}}{N}\right) \right]^N}_{=:f(\hat{A})} |\Psi\rangle, \quad (6.1)$$

其中 T 是总操作时间，均匀地分成 N 轮顺序选择， $S_w > 1$ 是实弱值，用于满足数学性质。由于它在任何选择失败时都会丢弃波函数，因此 SQC 的发生概率为 $|\langle f|i\rangle|^{2N}$ 。尽管 SQC 并非没有代价，但通过超振荡函数 $f(\hat{A})$ ，它为我们提供了足够的灵活性，以通过累积弱值设计和加速仪表波函数的量子控制。

6.2 原子运输-平移高斯仪表

最著名的仪表是与自旋通过 $H = g\hat{\sigma}_x \otimes \hat{p}$ 耦合的不精确的高斯波函数。SQC 可以在没有最终运动激发的情况下移动仪表。通过一个简化模型，我们以单个被约束离子为例，阐释了 SQC 对其相干传输的影响。

在 Lamb-Dicke 极限下，操作时间内应满足 $\eta\sqrt{\langle(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2\rangle} \ll 1$ 。Lamb-Dicke 哈密顿量包含红侧带和蓝侧带作为谐振。第一个红侧带 $\delta = -\nu$ 为

$$H_{\text{rsb}} = \frac{\hbar}{2}\Omega\eta [\hat{a}\hat{\sigma}_+ \exp(i\phi_r) + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_- \exp(-i\phi_r)], \quad (6.2)$$

其中 ϕ_r 是激光的相位，给出了具有有效拉比频率 $\Omega\sqrt{n}\eta$ 的跃迁 $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n-1\rangle|e\rangle$ 。它

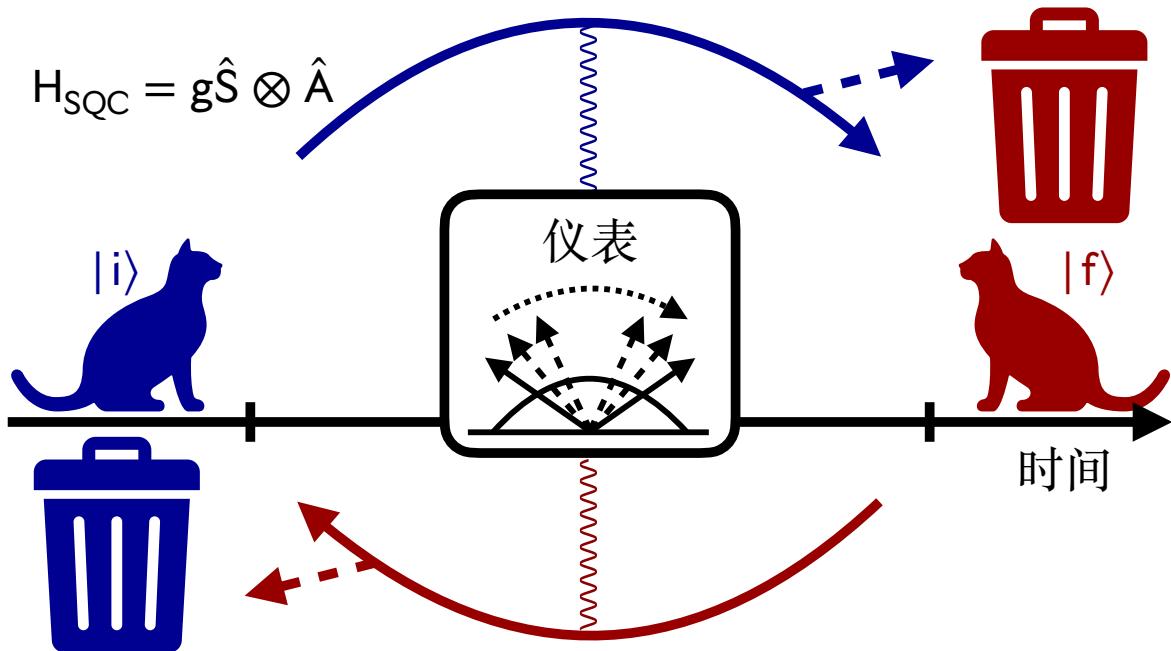


图 6.1 实现 SQC 的示意图。预选系统和仪表通过相互作用哈密顿量耦合，然后通过后选来在仪表上记录弱值。通过顺序选择累积弱值，超振荡函数 $f(\hat{A})$ 演化仪表到目标状态，为仪表波函数的高效和鲁棒的量子控制提供了可能。

耦合了单个被约束离子的内部态和运动模式。类似地，我们写出第一个蓝侧带 $\delta = -\nu$ 为

$$H_{\text{bsb}} = \frac{\hbar}{2} \Omega \eta [\hat{a}^\dagger \hat{\sigma}_+ \exp(i\phi_b) + \hat{a} \hat{\sigma}_- \exp(-i\phi_b)], \quad (6.3)$$

给出了另一个跃迁 $|n\rangle|g\rangle \leftrightarrow |n+1\rangle|e\rangle$ ，其有效拉比频率为 $\Omega\sqrt{n+1}\eta$ 。这些共振导致了众所周知的 Jaynes-Cummings 和反-Jaynes-Cummings 哈密顿量，分别。我们通过打开双色激光来实现光与物质相互作用，并将 Lamb-Dicke 哈密顿量化简为

$$H_{\text{bic}} = H_{\text{rsb}} + H_{\text{bsb}} = -i \frac{\hbar \Omega}{2} \eta \hat{\sigma}_x (\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \quad (6.4)$$

其中 $\phi_r = -\pi/2$ 且 $\phi_r = \pi/2$ 。通过将 $\hat{a} = \sqrt{M\nu/2\hbar}(\hat{x} + i\hat{p}/M\nu)$ 和 $\hat{a}^\dagger = \sqrt{M\nu/2\hbar}(\hat{x} - i\hat{p}/M\nu)$ 代入 (6.4)，我们导出了相互作用哈密顿量 $H = g\hat{\sigma}_x \otimes \hat{p}$ ，其中 $g = \eta\Omega x_0$ 且 $x_0 = \sqrt{\hbar/2M\nu}$ 。

为了在图 6.2(a) 所示的设置中实现 SQC，我们通过将系统交替投影到初始态 $|i\rangle$ 和最终态 $|f\rangle$ ，并在两次选择之间将系统弱耦合到仪表，应用 N 轮的顺序量子态预选和后选。根据方程(6.1)，对系统的顺序选择可以对仪表的量子态产生长时间的影响，

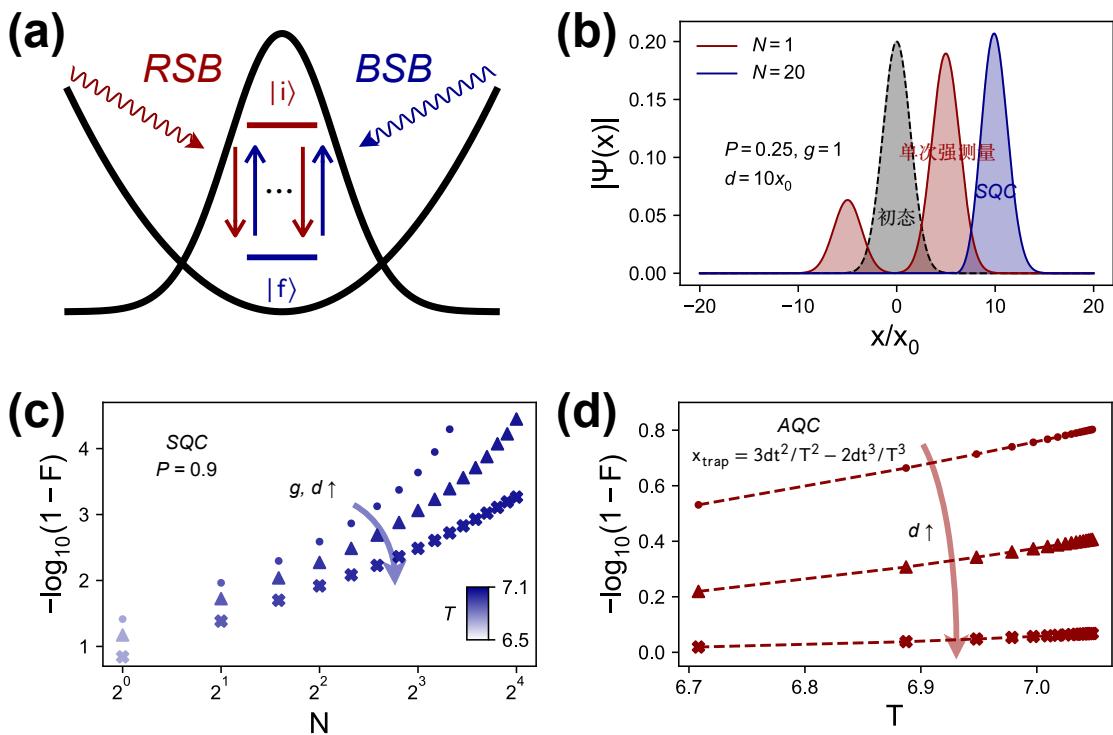


图 6.2 (a) 离子阱量子平台中 SQC 的示意图，其中两束激光调谐到第一个红侧带和蓝侧带，将内部自旋态耦合到运动模式。它通过在两能级系统上进行 N 轮顺序选择来实现 SQC，这些选择发生在 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 之间，如果所有选择都成功，则将离子传输到目标。(b) 单次强测量和 SQC ($N = 20$) 在传输离子 $d = 10x_0$ 时的比较。单次选择显示出两个不重叠的红色波包，无法实现单向离子传输。相关的无量纲质量和陷阱频率为 $M = \nu = 1$, $P = 0.25$ 。(c) 通过 SQC 进行传输的 Fidelity 随 N 的变化，传输距离为 $d = 7.5x_0$ (点)、 $10x_0$ (三角形) 和 $15x_0$ (叉)，其中 $g = 0.75, 1, 1.5$, $P = 0.9$ 。(d) 对于与 (c) 中相同的传输距离，通过 AQC 进行传输的保真度随 T 的变化。我们通过定义 $x_{\text{trap}} = 3dt^2/T^2 - 2dt^3/T^3$ 移动离子阱的中心。

导致最终态给出为

$$|\Psi_A^F\rangle = |\langle f|i\rangle|^N f(\hat{p}) |\Psi(x)\rangle = |\langle f|i\rangle|^N |\Psi(x + Ng\delta T \sigma_{xw})\rangle,$$

其中 $\sigma_{xw} = \langle f|\hat{\sigma}_x|i\rangle/\langle f|i\rangle$ 是 $\hat{\sigma}_x$ 的弱值， $\delta T = T/N$ 是两次选择之间的时间间隔。通过在每一轮中将仪表的位置踢动 $\delta x = gT\sigma_{xw}/N$ ，它在仅有单个离子的情况下被放大了 N 倍。

我们意识到 SQC 并非无成本，而只在概率 $|\langle f|i\rangle|^{2N}$ 的情况下发生。因此，有必要分析概率与传输距离之间的关系并优化选择。为了获得一个实值且大于一的弱值，我们构造了两个选择态

$$|i\rangle, |f\rangle = \sqrt{\frac{1 \mp \sqrt{1-p}}{2}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1 \pm \sqrt{1-p}}{2}}|1\rangle, \quad (6.5)$$

其中 p 是成功投影的概率，它可以产生一个优化的弱值 $\sigma_{xw} = 1/\sqrt{p}$ 。因此，SQC 方案可以通过 $d = gT/\sqrt{p}$ 来移动被约束的离子，代价是 $P = p^N$ 。乍一看，这似乎有问题，因为位移与选择次数 N 无关，并且总概率呈指数下降。也就是说，可以在单次测量的时间间隔 T 内耦合内部态和运动模式。然而，耦合强度可能太大 ($gT \gg x_0$)，以至于后选不再作为运动波函数上的平移算符演化。

我们对弱到强的量子测量进行了详细计算，以展示为什么需要使用 SQC 而不是单次强测量。我们选择进行预选和后选的状态，并将它们表示为测量算符的本征基矢，例如，

$$\begin{aligned} |i\rangle &= a_0|+\rangle + a_1|-\rangle, \\ |f\rangle &= \tilde{a}_0|+\rangle + \tilde{a}_1|-\rangle, \end{aligned} \quad (6.6)$$

如果我们测量 $\hat{\sigma}_x$ 的弱值。这样的量子测量过程，无论测量强度如何，都可以写为

$$\begin{aligned} \langle f| \exp(-igT\hat{\sigma}_x \otimes \hat{p}) |i\rangle \otimes |\Psi(x)\rangle \\ = c_0 |\Psi(x - gT)\rangle + c_1 |\Psi(x + gT)\rangle, \end{aligned} \quad (6.7)$$

其中 $c_0 = a_0 \tilde{a}_0^*$, $c_1 = a_1 \tilde{a}_1^*$ 。我们可以将这两个波包重新标准化为猫态，如下所示

$$|\text{cat}\rangle = \frac{c_0 |\Psi(x - gT)\rangle + c_1 |\Psi(x + gT)\rangle}{\sqrt{[c_0^* \langle \Psi(x - gT) | + c_1^* \langle \Psi(x + gT)] [c_0 |\Psi(x - gT)\rangle + c_1 |\Psi(x + gT)\rangle]}},$$

$$= \frac{c_0|\Psi(x - gT)\rangle + c_1|\Psi(x + gT)\rangle}{\sqrt{|c_0|^2 + |c_1|^2 + (c_0^*c_1 + c_0c_1^*)\langle\Psi(x - gT)|\Psi(x + gT)\rangle}}. \quad (6.8)$$

我们通过 $\langle\Psi(x - gT)|\Psi(x + gT)\rangle = \exp(-\Gamma^2)$ 来量化测量中的量子干涉，并定义干涉因子 $\Gamma = gT/(\sqrt{2}x_0)$ 。通过计算从初始高斯基态到猫态的中心位置漂移，我们得到测量结果

$$\delta x = \langle\text{cat}|\hat{x}|\text{cat}\rangle = \frac{(|c_0|^2 - |c_1|^2)gt}{|c_0|^2 + |c_1|^2 + (c_0^*c_1 + c_0c_1^*)\exp(-\Gamma^2)} \quad (6.9)$$

在弱耦合情况下，我们有 $\langle\delta x\rangle|_{\Gamma \rightarrow 0} = \frac{(|c_0|^2 - |c_1|^2)gt}{|c_0|^2 + |c_1|^2 + c_0^*c_1 + c_0c_1^*} = \sigma_{xw}gt$ 。然而，在强耦合情况下， $\langle\delta x\rangle|_{\Gamma \rightarrow \infty} = \frac{(|c_0|^2 - |c_1|^2)gt}{|c_0|^2 + |c_1|^2}$ 并不总是放大期望值 $\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle$ 。在之前，我们选择了原子传输的最佳选择

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1-p}}{2}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1-p}}{2}}|1\rangle, \\ |f\rangle &= \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1-p}}{2}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1-p}}{2}}|1\rangle, \end{aligned} \quad (6.10)$$

其中弱值是 $1/\sqrt{p}$ ，期望值是 $\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle = \sqrt{p}$ 。然而，在强测量极限下，我们观察到的读数是 $\frac{2\sqrt{p}}{1+p}$ 。为了使测量读数和期望值相等，我们人为地设计了一个预选和后选，例如，

$$|i\rangle = |0\rangle, |f\rangle = \sqrt{p}|0\rangle + \sqrt{1-p}|1\rangle, \quad (6.11)$$

其弱值和期望值分别是 $\frac{\sqrt{1-p}}{\sqrt{p}}$ 和 $2\sqrt{-(-1+p)p}$ ，后者与强耦合极限中的测量读数一致。我们在图 6.3 中展示了两种设置下的弱到强的过渡。

更重要的使用弱测量的原因是，在弱测量极限下，当 $p \rightarrow 1$ 时，位移可以被放大。为了保持单向平移，我们通过每隔 $\delta T = T/N$ 就周期性地解耦系统和仪表来构建 SQC，确保每次测量都处于弱测量区域。图 6.2(b) 绘制了目标距离为 $d = 10x_0$ 时单次测量和 SQC 之间的差异，总概率较低，为 $P = 0.25$ ，以增加结果对比度。

在图 6.2(c) 中，我们将概率设置为 $P = 0.9$ ，并将选择的次数从 $N = 1$ 变化到 16，以测试我们的方案在不同测量强度下的理想性能。我们通过让耦合强度与传输距离成正比来固定每组设置中与 N 相对应的操作时间，具体设置如下：(i): $g = 0.75, d = 7.5x_0$ ，(ii): $g = 1, d = 10x_0$ ，(iii): $g = 1.5, d = 15x_0$ 。结果支持了我们的理论，即保真度应随 N 的增加而增加，并随传输距离的增加而减小。

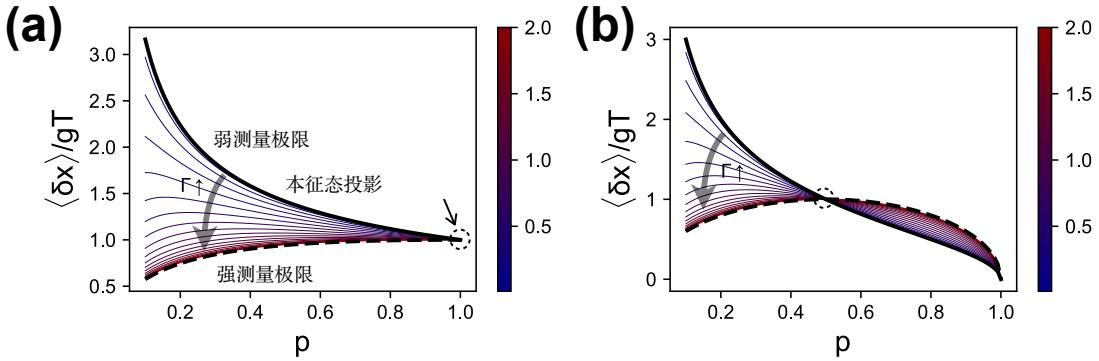


图 6.3 相对于初始高斯态到猫态的中心位置漂移 $\langle \delta x \rangle / gT$ 作为选择概率 p 的函数，具有不同测量强度的干涉因子 $\Gamma = gt/(\sqrt{2}x_0)$ 。(a) 我们设置预选和后选状态分别为 $|i\rangle = \sqrt{\frac{1-\sqrt{1-p}}{2}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-p}}{2}}|1\rangle$ 和 $|f\rangle = \sqrt{\frac{1+\sqrt{1-p}}{2}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1-\sqrt{1-p}}{2}}|1\rangle$ 。厚实的黑色实线表示弱测量极限 $\Gamma \rightarrow 0$ 下的弱值读数 $\sigma_{xw} = 1/\sqrt{p}$ 。厚黑色虚线表示强测量极限 $\Gamma \rightarrow \infty$ 下的奇异读数 $2\sqrt{p}/(1+p)$ ，与期望值 $\langle f|\hat{\sigma}_x|f\rangle = \sqrt{p}$ 不一致。其他可能的读数曲线在颜色上介于它们之间，其颜色根据 Γ 的值而定。我们用圆圈标出了 $|+\rangle$ 的本征态投影点，其中弱测量和强测量无损地相遇。(b) 我们将预选和后选状态分别设置为 $|i\rangle = |0\rangle$ 和 $|f\rangle = \sqrt{p}|0\rangle + \sqrt{1-p}|1\rangle$ ，以在强测量极限下使期望值和读数相等为 $2\sqrt{-(-1+p)p}$ 。弱测量输出为 $\frac{\sqrt{1-p}}{\sqrt{p}}$ 。这里的本征态投影概率为 0.5。其他配置定义与前一个子图相同。

我们注意到 SQC 的额外时间成本（与 $N = 1$ 的 $T = 6.708$ 相比）并不显著，因为左侧的非重叠波包几乎可以忽略不计，对于 $P \approx 1$ ，系统状态的选择几乎是平行的。此外，我们强调 SQC 在系统状态选择几乎平行时趋于无损失的期望值放大（也是本征值 $\langle \hat{\sigma}_x \rangle = 1$ ）。在这种情况下，装置的两支波包退化为单支波包 $|\Psi(x - gT)\rangle$ ，并在任一极限中均等于弱值 $1/\sqrt{p}$ 或先前的奇怪读数 $2\sqrt{p}/(1+p)$ 。同样在图 6.2(d) 中，我们通过将离子阱的中心移动到目标位置，以下轨迹 $x_{\text{trap}} = 3dt^2/T^2 - 2dt^3/T^3$ 对我们的方案进行基准测试。我们的方案在保真度 $F = |\langle \Psi(x, T)|\Psi_G\rangle|^2$ 方面表现出色，其中 $|\Psi_G\rangle$ 是目标位置的高斯基态，甚至在考虑了选择的概率时也占优势。

6.3 量子搜索-旋转量子比特仪表

正如我们强调过的，SQC 是一个通用的量子控制框架，可以应用于任意设备。实际上，我们可以在量子比特波函数的角参数上累积弱值，用于量子信息处理。SQC 可以模拟标准的 Grover 算法^[186]，在数字化量子计算的背景下，该算法从数据库 $|\Psi\rangle$ 中搜索目标 $|t\rangle$ ，复杂度为 $\mathcal{O}(\sqrt{N_G})$ ，其中 N_G 是条目的数量。如果我们实现一个相互作用哈密顿量 $H = g\hat{\sigma} \otimes \hat{J}$ ，将系统和设备耦合起来，通过累积弱值 $\sigma_w = \theta/g\delta T$ ，

顺序选择可以在设备上引起以下 SQC

$$|\Psi_A^F\rangle = |\langle f|i\rangle|^N f(\hat{J})|\Psi(\theta/2)\rangle = |\langle f|i\rangle|^N |\Psi(\theta/2 + N\sigma_w g\delta T)\rangle, \quad (6.12)$$

$f(\hat{J})$ 等效于标准的 Grover 算子 $\hat{G}^N = (U_\Psi U_t)^N$, 其中 Oracle 算子 $U_t = I - 2|t\rangle\langle t|$ 和 Diffusion 算子 $U_\Psi = 2|\Psi\rangle\langle\Psi| - I$ 分别翻转目标子空间和初始数据库的波函数相位。

一个更有趣的图景是 SQC 和用于完美查询 $|t\rangle$ 的绝热 Grover 算法之间的类比。在图 6.4(a) 中, 我们使用一个两比特系统来演示该算法, 其中一个是控制比特 (系统), 另一个是目标比特 (设备), 作为搜索目标状态 $|t\rangle = |0\rangle$ 的最小量子模型, 其中有 $N_G = 2$ 个条目。假设初始数据库是 $|\Psi\rangle = |+\rangle = \sin(\pi/4)|0\rangle + \cos(\pi/4)|1\rangle$, 我们可以通过设置 $g\delta T\sigma_{yw} = \pi/4N$ 来实现完美查询, 而这在标准的 Grover 算法中是不可行的。因此, 我们使用自旋-自旋相互作用来实现 SQC, 该相互作用是海森堡型的 $H_{\text{SQC}} = -g\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y$ 。我们在公式 (6.5) 的系数上加上相对相位项 $\exp(-i\pi/2)$, 在概率和弱值累积之间进行权衡。

我们进行了一项定量研究, 比较了 SQC 和 AQC 的能量成本。在 AQC 方法中, 我们演化时间相关的哈密顿量

$$H(t) = [1 - \lambda(t)]H_i + \lambda(t)H_f$$

, 其中 $\lambda(t)$ 在操作时间内从零变化到某个值。我们使用第一型哈密顿量作为特定量子搜索的基准^[187], 给出为

$$H_{\text{I}}(t) = (1 - t/T)\Omega\hat{\sigma}_x + (t/T)\Delta\hat{\sigma}_z, \quad (6.13)$$

其中 Ω 是拉比频率, Δ 是失调。此外, 我们使用更一般的第二型哈密顿量^[188]

$$H_{\text{II}}(t) = (1 - t/T)K(I - |\Psi\rangle\langle\Psi|) + (t/T)K(1 - |t\rangle\langle t|), \quad (6.14)$$

作为基准, 其中 K 是一个缩放系数。我们通过在图 6.4(b) 中使用相同的概率 $P = 0.9$ 和耦合强度 $g = 1$ 来测量不同 N 上的保真度 $F = |\langle\Psi(T)|t\rangle|^2$ 来评估 SQC 的性能。显然, 通过在第一型哈密顿量中使用更大的拉比频率和失调, 或者在第二型哈密顿量中等比例增加 K , 可以提高保真度而不增加操作时间 T 。因此, 为了进行公平比较, 定义了能量成本, 该能量成本限制了系统的输入能量。我们使用总哈密顿量的

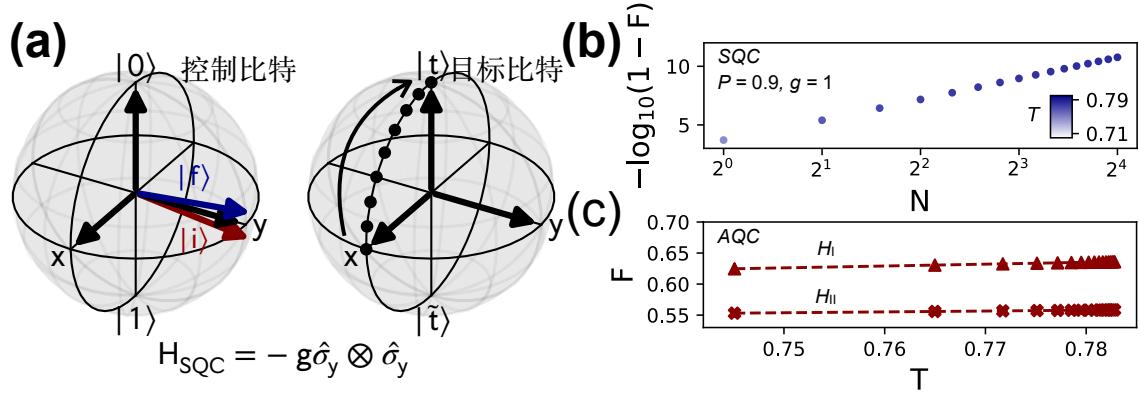


图 6.4 (a) 使用 SQC (6.12) 的量子搜索算法的示意图。通过自旋-自旋相互作用哈密顿量 $H_{\text{SQC}} = -g\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y$ 驱动的控制比特上的 $N = 8$ 轮选择, 将目标比特从初始数据库 $|\Psi\rangle = |+\rangle$ 旋转到目标态 $|t\rangle = |0\rangle$ 。(b) 通过 SQC 的 Fidelity 与 N 的关系。SQC 的概率和耦合强度设置为 $P = 0.9$ 和 $g = 1$ 。(c) 通过 AQC 的 Fidelity 与 T 的关系。能量成本是有界的, AQC 的哈密顿量 (6.13) (红色三角形)、(6.14) (红色交叉) 在取决于 SQC 算法中的选择轮数的 T 上演化。

Frobenius 范数来定义演化的瞬时成本 $\partial_t C = \|H(t)\|$, 并在操作时间内对其进行积分和平均得到

$$C = \frac{1}{T} \int_0^T \|H(t)\| dt,$$

这导致超振荡量子搜索的 $C_{\text{SQC}} = 2g$ 。假设 $\Omega = \Delta$, 我们得到第一型和第二型哈密顿量的成本分别为 $C_I = \Omega[2\sqrt{2} - \log(-1 + \sqrt{2}) + \log(1 + \sqrt{2})]/4$ 和 $C_{II} = K[4 + 3(-\log 1 + \log 3)]/8$ 。图 6.4(c) 展示了绝热算法的能量成本与 SQC 的对比, 以及绝热量子搜索的两种哈密顿量在 T 内的保真度, 对应于 N 轮选择。数值结果证明了 SQC 显著加速了绝热 Grover 算法, 即使考虑了概率和能量成本。

此外还可以通过在多量子比特上应用这个模型, 实现对任意数据库的扩展。对于条目 $N_G > 2$, 需要多个量子比特作为数据库来编码量子信息。因此, 在更高维度的希尔伯特空间中, 不能再使用极小模型中的布洛赫球的物理图像, 需要对更高维度中的希尔伯特空间中的旋转进行泛化。假设量子搜索目标态 $|t\rangle$ 的初始数据库为

$$|\Psi\rangle = \sin \frac{\theta}{2} |t\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\tilde{t}\rangle, \quad (6.15)$$

其中 $|\tilde{t}\rangle = \sum_{N_G-1} c_i |i\rangle$ 是所有其他条目的叠加的互补基。为了实现量子搜索的 SQC, 我们需要构建一个可以使参数化波函数旋转 $\exp(-i\phi\hat{J})|\Psi(\theta/2)\rangle = |\Psi(\theta/2 + \phi)\rangle$ 的一般角动量 \hat{J} 。我们仍然可以通过模仿极小模型中的旋转来构建这样的角动量。例如,

如果所有基的振幅都是实数，我们可以围绕有效的 Y 轴将波函数旋转到目标处。我们用以下记号表示有效的正态和负态

$$\begin{aligned} |\tilde{+}\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2}|t\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|\tilde{t}\rangle, \\ |\tilde{-}\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2}|t\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|\tilde{t}\rangle, \end{aligned} \quad (6.16)$$

从而得到一般的角动量算符

$$\hat{J}_y = -\frac{i}{2}(|\tilde{-}\rangle\langle\tilde{+}| - |\tilde{+}\rangle\langle\tilde{-}|), \quad (6.17)$$

这会如我们所期望的那样旋转参数化的波函数。

6.4 非理想情况下的鲁棒性

实验室中的实现需要考虑模拟误差以评估其鲁棒性，并验证结论在非理想实验中是否仍然成立。首先，耦合系数上的系统误差和系统上的选择误差，这些误差偏离理想的预/后选择，都会被 $1/\sqrt{N}$ 缓解，从整体角度证明了 SQC 的显著优势而不会挑战结论。从系统的角度来看，鲁棒性问题等同于对系统和设备的 N 个副本（在选定状态上有扰动）的弱值平均是否确实是理想弱值。这个问题在上世纪九十年代弱测量的概念提出时已经得到了解答^[189]。已经证明了平均弱值的期望是理想弱值，标准差减小了 $1/\sqrt{N}$ 。请注意，这里的整体需要 N 个副本中的所有后选择都成功，其概率与 SQC 的概率相同。

为了更有说服力，我们将投影误差建模为 SQC 语言。我们可以重新表达参数化的 Bloch 球上的预选择和后选择：

$$|i\rangle = \left[\cos\left(\frac{(\pi/2 - \theta + \phi_1)}{2}\right), \sin\left(\frac{(\pi/2 - \theta + \phi_1)}{2}\right) \exp(i\beta_1) \right]^T, \quad (6.18)$$

$$\langle f | = \left[\cos\left(\frac{(\pi/2 - \theta + \phi_2)}{2}\right), \sin\left(\frac{(\pi/2 - \theta + \phi_2)}{2}\right) \exp(-i\beta_2) \right], \quad (6.19)$$

其中理想预选择和后选择之间的角度是 θ 。这里， ϕ_i 和 β_i 描述了纵向和横向方向上预选择和后选择的误差。在后选择之后的设备给出

$$\sigma_{wx} = -\frac{2i - (\beta_1 - \beta_2) + (\beta_1 + \beta_2) \sin \theta}{(-2i + \beta_1 - \beta_2) \cos \theta - i(\phi_1 - \phi_2) \sin \theta}, \quad (6.20)$$

在 $\phi_i, \beta_i \rightarrow 0$ 的极限下给出理想弱值 $\sec \theta$ 。物理图像非常清晰，纵向和横向误差分别对复弱值的实部和虚部的偏差有贡献。需要强调的是，复弱值与实值不同，因为它在设备上积累（在这里表示为一个高斯波函数），导致非幺正演化。Richard Jozsa^[190]得出的结论是，在后选择之后的设备给出

$$\langle q \rangle_f = \langle q \rangle_i + gTa, \quad (6.21)$$

$$\langle p \rangle_f = \langle p \rangle_i + 2gTbVar_p, \quad (6.22)$$

其中 a 和 b 是弱值的实部和虚部，如果设备波函数是实值的。还观察到弱值的虚部在设备上演化为一个非幺正操作，导致在后选择后设备的大小增加或减小。在这种情况下，可以轻松验证选择过程引起的设备的偏差在经过 N 轮 SQC 后被平均，假设误差的大小遵循高斯分布。因此，标准差减小了 $1/\sqrt{N}$ 。

在本章节第二个例子中，投影误差也可以以类似的方式建模。在这种情况下，设备是一个量子比特，弱值的实部将设备波函数围绕 Y 轴旋转。此外，复弱值导致系统大小的增加或减小，表明非幺正算符不是迹保持的。因此，我们得到了后选择后设备的期望值

$$\langle \sigma_y \rangle_f = \langle \sigma_y \rangle_i + 2gb [1 - \langle \sigma_y \rangle_i^2], \quad (6.23)$$

$$\langle \sigma_x \rangle_f = \langle \sigma_x \rangle_i + 2ga \langle \sigma_z \rangle_i - 2gb \langle \sigma_x \rangle_i \langle \sigma_y \rangle_i, \quad (6.24)$$

$$\langle \sigma_z \rangle_f = \langle \sigma_z \rangle_i + 2ga \langle \sigma_x \rangle_i - 2gb \langle \sigma_z \rangle_i \langle \sigma_y \rangle_i, \quad (6.25)$$

其中 SQC 的鲁棒性仍然保持。另一个微不足道但有趣的错误是脉冲长度误差 $g(t) \rightarrow g(t)(1 + \delta)$ ，这也被 SQC 平均。总之随着选择次数的增加，SQC 会缓释而非积累前后选择与耦合强度的误差，这对量子噪声减少的量子系统来说是重大利好。

此外，我们在开放量子系统中评估了 SQC。我们考虑不完美的选择可能引入原子损失和量子噪声，通过固定比例 P_{error} 减少保真度。这些机制可以在保真度和选择次数之间创建一种权衡，其中保真度在达到最大值后随着 N 的增加而减小到临界值以下。需要注意的是，由量子噪声引起的第一类权衡并非在所有情况下都存在。随着 N 的增加，该方案保留了 SQC 更好的特性，即随着额外的操作时间提高保真度，同时随着量子噪声对系统的影响加剧而降低保真度。这种权衡是否存在取决于哪个

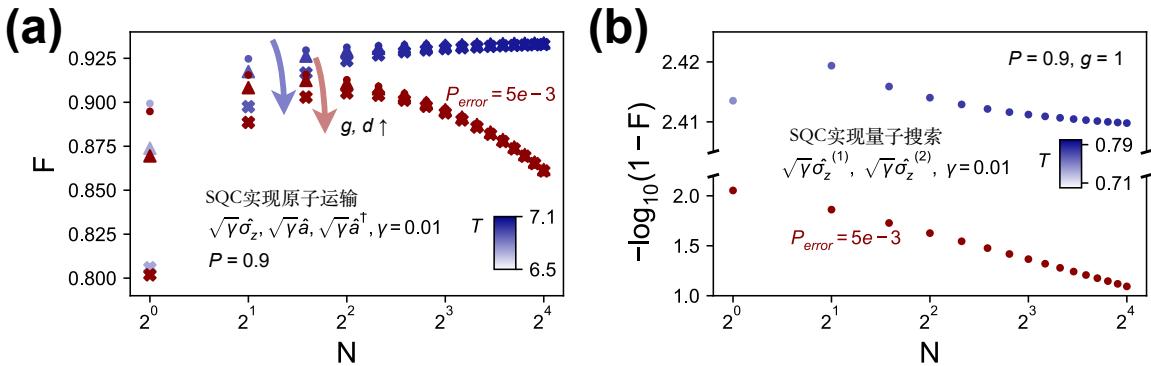


图 6.5 (a) 在基于 SQC 的量子传输中, 保真度随 N 的变化, 其中由 $\gamma = 0.01$ 表示的退相干和阻尼率引入了量子噪声。在每次选择后, 模拟结果 (红色标记) 乘以 $1 - P_{\text{error}} = 0.995$, 以模拟由不完美的投影引起的原子损失。参数和标记与图 6.2(c) 中相同。(b) 在基于 SQC 的量子搜索中, 以 $C_{\text{TLS}} = \sqrt{\gamma}\hat{\sigma}_z$ 模拟控制器和目标比特上的局部退相干。结果显示了在完美 (蓝色) 和不完美 (红色) 投影的情况下设置, 其参数与图 6.2(a) 和图 6.4(b) 相同。

因素占主导地位, 是额外的保真度增益还是损失。

我们通过崩溃算符 $C_{\text{TLS}} = \sqrt{\gamma}\hat{\sigma}_z$ 、 $C_{\text{HO}} = \sqrt{\gamma}\hat{a}, \sqrt{\gamma}\hat{a}^\dagger$ 在离子传输问题中对量子噪声进行建模, 以表征失相内部态和阻尼运动模式。我们还假设每次选择的额外保真度损失为 $P_{\text{error}} = 5 \times 10^{-3}$ 。如图 6.5(a) 所示, 阻尼设备的期望位移小于理想设备的期望位移。尽管在这种参数设置中唯一的权衡是由于不完美的投影引起的, 但通过调整 SQC 的概率, 可以在较小的临界 N 处观察到第一类权衡。我们还对量子搜索算法的控制比特和目标比特施加相同的局部退相干, 导致由于纯度损失而保真度降低。作为校准, 使用相同参数评估算法的结果如图 6.5(b,c) 所示, 这证实了两种类型的权衡机制的存在。

6.5 与传统量子绝热捷径的区别

我们声称在这两种情况下, SQC 类似于 STA, 因为在弱测量区域内, 设备被传输或旋转而不激发。换句话说, SQC 的结果看起来像是通过加速绝热过程来实现 STA, 但它们的机制从根本上是不同的。原则上, AQC 和 STA 都需要一个绝热参考。时间相关的哈密顿量要么变化缓慢 (AQC), 要么变化迅速 (没有 STA), 后者会激发波函数, 因为不再满足绝热条件, 即如果激发没有被取消, 波函数就不在基态或本征态中。在 AQC 和 STA 中, 通常有两种常见的取消激发的方法。第一种方法被称为基于不变量的逆向工程。如果时间相关的哈密顿量具有 Lewis-Reisenfeld 动力学不变

量，那么可以推导出相应的动力学方程，设计哈密顿量中的可调参数，并通过施加适当的边界条件来取消最终的激发。第二种方法涉及反绝热驱动，通过在哈密顿量中引入辅助项来实现。虽然严格的解决方案要求对哈密顿量进行精确对角化，但可以使用局部项或嵌套对易子进行近似。实质上，AQC 和 STA 都通过设计他们的哈密顿量来驱动目标，从而导致波函数的连续和幺正演化。

另一方面，SQC 提供了独特的优势，因为它通过后选择周期性地解耦控制器（系统）和目标（设备），消除了对较长操作时间的需求。这个特性使 SQC 与在 AQC 中使用自旋轨道耦合作为辅助项的方法有所区别，使其成为一种更高效、更灵活的方法。与传统的 STA 形成鲜明对比的是，SQC 通过利用弱测量诱导的超振荡中控制器（系统）的弱值积累来驱动目标（设备），并通过相互作用的哈密顿量和后选择来实现弱测量诱导的超振荡的整体版本。通过顺序选择只有一个控制器（系统），实现了弱测量诱导的超振荡的整体版本。弱测量的瞬时和不连续的特性导致了对设备的突然脉冲。此外，由于后选择的概率，演化并不是幺正的，即使弱值是实数。尽管存在非幺正演化，SQC 在选择后表现出较高的保真度，证明在考虑能量成本和超振荡的概率时，它相对于 AQC 具有明显的优势。另一个值得注意的好处是 SQC 不需要对特征系统和绝热参考的了解，这相对于 STA 提供了额外的优势。

在正文中介绍的两种情况之外，我们必须强调 SQC 在弱值和相互作用类型的设计上比 STA 具有更大的自由度。如果设备与系统没有通过动量或角动量耦合，那么超振荡函数不再像传统 STA 的重复移植或旋转算符那样演变，这无法用 STA 的传统图像来描述。

6.6 结论

本章节中，我们介绍了一个通用的 SQC 框架，并通过离子阱展示了其效率和鲁棒性。通过两个例子，即原子输运和量子搜索，我们展示了 SQC 可以加速传统绝热控制，模拟绝热快捷方式。数值模拟表明，SQC 在能量成本方面具有优势，即使考虑事件发生的概率。我们还将 SQC 方案扩展到开放量子系统，噪声影响了其性能，导致选择和保真度之间存在两种权衡。

虽然我们的重点是离子阱系统，但可以同样通过 scaling approach 映射到光晶格

与半导体量子点系统中。原则上，SQC 可以应用于控制具有相互作用的物理系统，包括不仅仅是自旋轨道耦合，还有自旋-自旋相互作用和其他相互作用。此外，我们的工作可以扩展到相干物质波分裂，因为我们已经提出了经过后选择后的设备的解析形式。此外，对于 Dicke 模型中超辐射相变的出现或抑制，SQC 对于集体行为的应用具有潜在的应用。在这些情况下，系统和设备不再耦合以构建平移或旋转算符，即不再对应于量子绝热捷径。我们相信 SQC 可以深入理解量子基础，并为各种量子技术提供潜在应用。

第七章 总结与展望

7.1 总结

本论文旨在发展机器学习在量子信息、量子控制领域的应用，研究如何在量子态操控、量子信息提取、量子信息处理等任务中，将物理学中传统处理方案，如量子绝热捷径技术、弱测量、群论与强化学习、主动学习、几何学习等机器学习算法及范式相结合。这种结合反映了当下“第二次量子革命”的时代精神，试图展开跨学科交叉研究，并在具体问题上取得如下相关联的成果：

一、提出了以深度强化学习为基本框架，纳入物理学领域知识，如量子绝热捷径技术，设计高保真度高鲁棒性的量子调控的方案。在具有解析解并可进行最优化鲁棒性设计的问题中，检验了深度强化学习探索最优化量子调控的可行性。在取得正面结果后，对系统混合误差、量子噪声等较之前更为复杂的非理想模型进行理论探索，并与实验团队合作在离子阱系统中完成实验验证。

二、在检验了深度强化学习算法的搜索能力后，这一算法下的控制模型被推广到闭环量子控制。系统波函数被连续弱测量提取出刻画瞬时波函数特征，这一弱值信号信噪比极低，同时系统在被弱测量后受到扰动。深度强化学习算法在这一问题下，由神经网络观测到的弱值，同样实现了在开放量子系统下的调控，并可在检测到因量子噪声特征改变而导致的保真度下降后，通过少量新特征环境下的训练，重新取得高性能表现，展现了迁移学习这一经典机器学习领域中隶属于少样本学习的方案的可行性。

三、作为实现少样本学习的一个潜在方案，主动学习被运用到了量子信息处理中，以极低的代价，对潜在含最多信息的未标签样本进行测量并标签。在这一框架下，标签成本被定义为弱测量后对系统扰动造成的保真度损失，使得测量强度与信息有效提取效率之间的权衡关系可以得到充分的研究。在二分类、三分类问题中，主动学习结合弱测量的方案在 5% 的样本标签下获得了堪比全标签的分类成功率。主动学习之后被推广到其他标签代价显著的物理学问题，如多体物理相界预测中，同样展示了优势。

四、在经典主动学习对量子问题的有效性得到验证后，量子主动学习的概念被提出，即使用主动学习训练量子神经网络，用于处理实验生成的量子数据或是加载到量子线路中的经典数据。为了进一步实现少样本学习，数据中的对称性被用于设计量子神经网络的结构，以降低通用性的代价获得了性能的提升。这一框架在训练算法、网络架构层面提升了量子机器学习的效率，实现了少样本学习的量子推广。通过 \mathcal{Z}_2 与 \mathcal{D}_4 对称性数据集中的实验展现了框架的有效性。

五、弱测量在上述量子控制、量子信息问题中，通过与机器学习结合，起到了重要的工具作用。同时，在认识到弱测量背后量子物理基础后，提出了通过弱测量诱导超振荡量子调控的新方案。通过在人工设计的系统前后选择在探针上积累弱值，实现探针周期驱动，相较绝热量子调控有显著提速，同时由于其独特机制，天然具有抵抗系统误差的鲁棒性，并在量子调控、量子搜索的两个案例的数值模拟中得到了验证。

7.2 展望

以下是一些基于本论文中已完成结果可预见的推广：

一、将深度强化学习运用到多体物理模型的动力学调控。这需要在计算机中构造深度学习环境，即尽可能高效地模拟多体物理系统动力学。从计算的角度来看，需要结合物理思想的高效的算法，如张量网络技术等方能实现。更具有雄心的在于，可考虑在当下的量子计算机中结合变分量子模拟技术完成动力学模拟近似，从而将物理上的量子模拟平台，如光晶格、超导量子电路直接结合到神经网络实现即时的学习与操控。

二、将主动学习、量子主动学习推广到多标签问题，实现对不同自由度上的特征进行更广泛的高效分类。同时，注意到主动学习对于一些特定分布的数据，使用标准采样方案会导致有偏的训练集，从而影响性能表现。可探索对于这类数据集，如何优化特定的采样方案纠正这一错误采样行为。

三、将超振荡量子控制在实验上得到验证。文中已在离子阱模型下讨论了如何实验实现。对于它的验证，在提高我们对量子测量、量子速度极限等量子基础的认识，以及实现高保真度高鲁棒性的量子控制都是有帮助的。同时，作为一种奇特的

非幺正量子调控技术，可以通过构造复弱值，对控制目标实现热化、纯化等更有趣的操控。

参考文献

- [1] BERGMANN K, THEUER H, SHORE B. Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1998, 70(3): 1003.
- [2] KRÁL P, THANOPULOS I, SHAPIRO M. Colloquium: Coherently controlled adiabatic passage[J]. *Reviews of modern physics*, 2007, 79(1): 53.
- [3] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S, et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem[J]. *Science*, 2001, 292(5516): 472-475.
- [4] CHEN X, RUSCHHAUPT A, SCHMIDT S, et al. Fast optimal frictionless atom cooling in harmonic traps: Shortcut to adiabaticity[J]. *Physical review letters*, 2010, 104 (6): 063002.
- [5] TORRONTEGUI E, IBÁÑEZ S, MARTÍNEZ-GARAOT S, et al. Shortcuts to adiabaticity[M]//*Advances in atomic, molecular, and optical physics*: Vol. 62. Elsevier, 2013: 117-169.
- [6] GUÉRY-ODELIN D, RUSCHHAUPT A, KIELY A, et al. Shortcuts to adiabaticity: Concepts, methods, and applications[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2019, 91(4): 045001.
- [7] BASON M G, VITEAU M, MALOSSI N, et al. High-fidelity quantum driving[J]. *Nature Physics*, 2012, 8(2): 147-152.
- [8] ZHANG J, SHIM J H, NIEMEYER I, et al. Experimental implementation of assisted quantum adiabatic passage in a single spin[J]. *Physical review letters*, 2013, 110(24): 240501.
- [9] ZHOU B B, BAKSIC A, RIBEIRO H, et al. Accelerated quantum control using superadiabatic dynamics in a solid-state lambda system[J]. *Nature Physics*, 2017, 13(4): 330-334.

- [10] VEPSÄLÄINEN A, DANILIN S, PARAOANU G S. Superadiabatic population transfer in a three-level superconducting circuit[J]. *Science advances*, 2019, 5(2): eaau5999.
- [11] YAN T, LIU B J, XU K, et al. Experimental realization of nonadiabatic shortcut to non-abelian geometric gates[J]. *Physical review letters*, 2019, 122(8): 080501.
- [12] WANG T, ZHANG Z, XIANG L, et al. The experimental realization of high-fidelity ‘shortcut-to-adiabaticity’ quantum gates in a superconducting xmon qubit[J]. *New Journal of Physics*, 2018, 20(6): 065003.
- [13] WANG T, ZHANG Z, XIANG L, et al. Experimental realization of a fast controlled-z gate via a shortcut to adiabaticity[J]. *Physical Review Applied*, 2019, 11(3): 034030.
- [14] DU Y X, LIANG Z T, LI Y C, et al. Experimental realization of stimulated raman shortcut-to-adiabatic passage with cold atoms[J]. *Nature communications*, 2016, 7(1): 12479.
- [15] ZHOU H, JI Y, NIE X, et al. Experimental realization of shortcuts to adiabaticity in a nonintegrable spin chain by local counterdiabatic driving[J]. *Physical Review Applied*, 2020, 13(4): 044059.
- [16] YAN Y, SHI C, KINOS A, et al. Experimental implementation of precisely tailored light-matter interaction via inverse engineering[J]. *npj Quantum Information*, 2021, 7(1): 138.
- [17] MUGA J, CHEN X, RUSCHHAUPT A, et al. Frictionless dynamics of bose–einstein condensates under fast trap variations[J]. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2009, 42(24): 241001.
- [18] DEMIRPLAK M, RICE S A. Adiabatic population transfer with control fields[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2003, 107(46): 9937-9945.
- [19] BERRY M V. Transitionless quantum driving[J]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2009, 42(36): 365303.
- [20] CHEN X, LIZUAIN I, RUSCHHAUPT A, et al. Shortcut to adiabatic passage in two- and three-level atoms[J]. *Physical review letters*, 2010, 105(12): 123003.

- [21] MASUDA S, NAKAMURA K. Fast-forward problem in quantum mechanics[J]. *Physical Review A*, 2008, 78(6): 062108.
- [22] DE LIMA BERNARDO B. Time-rescaled quantum dynamics as a shortcut to adiabaticity[J]. *Physical Review Research*, 2020, 2(1): 013133.
- [23] OKUYAMA M, TAKAHASHI K. From classical nonlinear integrable systems to quantum shortcuts to adiabaticity[J]. *Physical review letters*, 2016, 117(7): 070401.
- [24] WHITTY C, KIELY A, RUSCHHAUPT A. Quantum control via enhanced shortcuts to adiabaticity[J]. *Physical Review Research*, 2020, 2(2): 023360.
- [25] BACON D, FLAMMIA S T. Adiabatic gate teleportation[J]. *Physical review letters*, 2009, 103(12): 120504.
- [26] HEN I. Quantum gates with controlled adiabatic evolutions[J]. *Physical Review A*, 2015, 91(2): 022309.
- [27] SANTOS A C, SILVA R D, SARANDY M S. Shortcut to adiabatic gate teleportation [J]. *Physical Review A*, 2016, 93(1): 012311.
- [28] ALBASH T, LIDAR D A. Adiabatic quantum computation[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(1): 015002.
- [29] BERRY M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1984, 392 (1802): 45-57.
- [30] WILCZEK F, ZEE A. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems [J]. *Physical Review Letters*, 1984, 52(24): 2111.
- [31] HE J, CHEN J, HUA B. Quantum refrigeration cycles using spin-1/2 systems as the working substance[J]. *Physical Review E*, 2002, 65(3): 036145.
- [32] ABAH O, LUTZ E. Energy efficient quantum machines[J]. *Europhysics Letters*, 2017, 118(4): 40005.
- [33] GELL-MANN M, LOW F. Bound states in quantum field theory[J]. *Physical Review*, 1951, 84(2): 350.

- [34] AHARONOV Y, ALBERT D Z, VAIDMAN L. How the result of a measurement of a component of the spin of a spin-1/2 particle can turn out to be 100[J]. Physical review letters, 1988, 60(14): 1351.
- [35] MYRVOLD W C, CHRISTIAN J, BUSCH P. “no information without disturbance”: quantum limitations of measurement[J]. Quantum Reality, Relativistic Causality, and Closing the Epistemic Circle: Essays in Honour of Abner Shimony, 2009: 229-256.
- [36] AHARONOV Y, BERGMANN P G, LEBOWITZ J L. Time symmetry in the quantum process of measurement[J]. Physical Review, 1964, 134(6B): B1410.
- [37] AHARONOV Y, VAIDMAN L. The two-state vector formalism: an updated review [J]. Time in quantum mechanics, 2008: 399-447.
- [38] D’ALESSANDRO D. Introduction to quantum control and dynamics[M]. CRC press, 2021.
- [39] GLASER S J, BOSCAIN U, CALARCO T, et al. Training schrödinger’s cat: Quantum optimal control: Strategic report on current status, visions and goals for research in europe[J]. The European Physical Journal D, 2015, 69: 1-24.
- [40] NIELSEN M A, CHUANG I L. Quantum computation and quantum information[M]. Cambridge university press, 2010.
- [41] KELLY J, BAREND S, FOWLER A G, et al. State preservation by repetitive error detection in a superconducting quantum circuit[J]. Nature, 2015, 519(7541): 66-69.
- [42] TAKITA M, CROSS A W, CÓRCOLES A D, et al. Experimental demonstration of fault-tolerant state preparation with superconducting qubits[J]. Physical review letters, 2017, 119(18): 180501.
- [43] ROSENBLUM S, REINHOLD P, MIRRAHIMI M, et al. Fault-tolerant detection of a quantum error[J]. Science, 2018, 361(6399): 266-270.
- [44] ALLEN L, EBERLY J H. Optical resonance and two-level atoms: Vol. 28[M]. Courier Corporation, 1987.
- [45] LEVITT M H. Composite pulses[J]. Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, 1986, 18(2): 61-122.

- [46] BROWN K R, HARROW A W, CHUANG I L. Arbitrarily accurate composite pulse sequences[J]. *Physical Review A*, 2004, 70(5): 052318.
- [47] TOROSOV B T, GUÉRIN S, VITANOV N V. High-fidelity adiabatic passage by composite sequences of chirped pulses[J]. *Physical review letters*, 2011, 106(23): 233001.
- [48] RONG X, GENG J, SHI F, et al. Experimental fault-tolerant universal quantum gates with solid-state spins under ambient conditions[J]. *Nature communications*, 2015, 6 (1): 8748.
- [49] STEFFEN M, KOCH R H. Shaped pulses for quantum computing[J]. *Physical Review A*, 2007, 75(6): 062326.
- [50] BARNES E, SARMA S D. Analytically solvable driven time-dependent two-level quantum systems[J]. *Physical review letters*, 2012, 109(6): 060401.
- [51] DAEMS D, RUSCHHAUPT A, SUGNY D, et al. Robust quantum control by a single-shot shaped pulse[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(5): 050404.
- [52] CANEVA T, MURPHY M, CALARCO T, et al. Optimal control at the quantum speed limit[J]. *Physical review letters*, 2009, 103(24): 240501.
- [53] GUÉRIN S, HAKOBYAN V, JAUSLIN H. Optimal adiabatic passage by shaped pulses: Efficiency and robustness[J]. *Physical Review A*, 2011, 84(1): 013423.
- [54] HEGERFELDT G C. Driving at the quantum speed limit: optimal control of a two-level system[J]. *Physical review letters*, 2013, 111(26): 260501.
- [55] GARON A, GLASER S, SUGNY D. Time-optimal control of su (2) quantum operations[J]. *Physical Review A*, 2013, 88(4): 043422.
- [56] VAN DAMME L, ANSEL Q, GLASER S, et al. Robust optimal control of two-level quantum systems[J]. *Physical Review A*, 2017, 95(6): 063403.
- [57] ARENZ C, RUSSELL B, BURGARTH D, et al. The roles of drift and control field constraints upon quantum control speed limits[J]. *New Journal of Physics*, 2017, 19 (10): 103015.

- [58] LEWIS JR H R, RIESENFIELD W. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field [J]. *Journal of mathematical physics*, 1969, 10(8): 1458-1473.
- [59] RUSCHHAUPT A, CHEN X, ALONSO D, et al. Optimally robust shortcuts to population inversion in two-level quantum systems[J]. *New Journal of Physics*, 2012, 14 (9): 093040.
- [60] LU X J, CHEN X, RUSCHHAUPT A, et al. Fast and robust population transfer in two-level quantum systems with dephasing noise and/or systematic frequency errors [J]. *Physical Review A*, 2013, 88(3): 033406.
- [61] MUNUERA-JAVALOY C, BAN Y, CHEN X, et al. Robust detection of high-frequency signals at the nanoscale[J]. *Physical Review Applied*, 2020, 14(5): 054054.
- [62] ZAHEDINEJAD E, GHOSH J, SANDERS B C. Designing high-fidelity single-shot three-qubit gates: a machine-learning approach[J]. *Physical Review Applied*, 2016, 6 (5): 054005.
- [63] LIU B J, SONG X K, XUE Z Y, et al. Plug-and-play approach to nonadiabatic geometric quantum gates[J]. *Physical Review Letters*, 2019, 123(10): 100501.
- [64] MNIH V, KAVUKCUOGLU K, SILVER D, et al. Human-level control through deep reinforcement learning[J]. *nature*, 2015, 518(7540): 529-533.
- [65] MNIH V, KAVUKCUOGLU K, SILVER D, et al. Playing atari with deep reinforcement learning[A]. 2013.
- [66] SILVER D, HUANG A, MADDISON C J, et al. Mastering the game of go with deep neural networks and tree search[J]. *nature*, 2016, 529(7587): 484-489.
- [67] SILVER D, HUBERT T, SCHRITTWIESER J, et al. Mastering chess and shogi by self-play with a general reinforcement learning algorithm[A]. 2017.
- [68] CARLEO G, TROYER M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks[J]. *Science*, 2017, 355(6325): 602-606.
- [69] FÖSEL T, TIGHINEANU P, WEISS T, et al. Reinforcement learning with neural networks for quantum feedback[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(3): 031084.

- [70] YOSHIOKA N, HAMAZAKI R. Constructing neural stationary states for open quantum many-body systems[J]. *Physical Review B*, 2019, 99(21): 214306.
- [71] NAGY A, SAVONA V. Variational quantum monte carlo method with a neural-network ansatz for open quantum systems[J]. *Physical review letters*, 2019, 122(25): 250501.
- [72] HARTMANN M J, CARLEO G. Neural-network approach to dissipative quantum many-body dynamics[J]. *Physical review letters*, 2019, 122(25): 250502.
- [73] VICENTINI F, BIELLA A, REGNAULT N, et al. Variational neural-network ansatz for steady states in open quantum systems[J]. *Physical review letters*, 2019, 122(25): 250503.
- [74] ITEN R, METGER T, WILMING H, et al. Discovering physical concepts with neural networks[J]. *Physical review letters*, 2020, 124(1): 010508.
- [75] HENSON B M, SHIN D K, THOMAS K F, et al. Approaching the adiabatic timescale with machine learning[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2018, 115(52): 13216-13221.
- [76] ZHANG X M, WEI Z, ASAD R, et al. When does reinforcement learning stand out in quantum control? a comparative study on state preparation[J]. *npj Quantum Information*, 2019, 5(1): 85.
- [77] HAUG T, MOK W K, YOU J B, et al. Classifying global state preparation via deep reinforcement learning[J]. *Machine Learning: Science and Technology*, 2020, 2(1): 01LT02.
- [78] AN Z, ZHOU D. Deep reinforcement learning for quantum gate control[J]. *Euro-physics Letters*, 2019, 126(6): 60002.
- [79] SØRDAL V B, BERGLI J. Deep reinforcement learning for quantum szilard engine optimization[J]. *Physical Review A*, 2019, 100(4): 042314.
- [80] BUKOV M, DAY A G, SELS D, et al. Reinforcement learning in different phases of quantum control[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(3): 031086.

- [81] POROTTI R, TAMASCELLI D, RESTELLI M, et al. Coherent transport of quantum states by deep reinforcement learning[J]. Communications Physics, 2019, 2(1): 61.
- [82] PAPARELLE I, MORO L, PRATI E. Digitally stimulated raman passage by deep reinforcement learning[J]. Physics Letters A, 2020, 384(14): 126266.
- [83] NIU M Y, BOIXO S, SMELYANSKIY V N, et al. Universal quantum control through deep reinforcement learning[J]. npj Quantum Information, 2019, 5(1): 33.
- [84] DALGAARD M, MOTZOI F, SØRENSEN J J, et al. Global optimization of quantum dynamics with alphazero deep exploration[J]. npj Quantum Information, 2020, 6(1): 6.
- [85] ZHANG X M, CUI Z W, WANG X, et al. Automatic spin-chain learning to explore the quantum speed limit[J]. Physical Review A, 2018, 97(5): 052333.
- [86] WU R B, DING H, DONG D, et al. Learning robust and high-precision quantum controls[J]. Physical Review A, 2019, 99(4): 042327.
- [87] OSTASZEWSKI M, MISZCZAK J, BANCHI L, et al. Approximation of quantum control correction scheme using deep neural networks[J]. Quantum Information Processing, 2019, 18(5): 126.
- [88] MARTINIS J M, GELLER M R. Fast adiabatic qubit gates using only σ_z control[J]. Physical Review A, 2014, 90(2): 022307.
- [89] WANG X, BISHOP L S, BARNES E, et al. Robust quantum gates for singlet-triplet spin qubits using composite pulses[J]. Physical Review A, 2014, 89(2): 022310.
- [90] DU S, LEE J, LI H, et al. Gradient descent finds global minima of deep neural networks[C]//International conference on machine learning. PMLR, 2019: 1675-1685.
- [91] ALLEN-ZHU Z, LI Y, SONG Z. A convergence theory for deep learning via over-parameterization[C]//International conference on machine learning. PMLR, 2019: 242-252.
- [92] YU H, EDUNOV S, TIAN Y, et al. Playing the lottery with rewards and multiple languages: lottery tickets in rl and nlp[A]. 2019.

- [93] CUI J M, AI M Z, HE R, et al. Experimental demonstration of suppressing residual geometric dephasing[J]. *Science Bulletin*, 2019, 64(23): 1757-1763.
- [94] FAROLFI A, TRYPOGEORGOS D, COLZI G, et al. Design and characterization of a compact magnetic shield for ultracold atomic gas experiments[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(11).
- [95] RYAN C A, HODGES J S, CORY D G. Robust decoupling techniques to extend quantum coherence in diamond[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 105(20): 200402.
- [96] WIMPERIS S. Broadband, narrowband, and passband composite pulses for use in advanced nmr experiments[J]. *Journal of Magnetic Resonance, Series A*, 1994, 109 (2): 221-231.
- [97] CUMMINS H K, LLEWELLYN G, JONES J A. Tackling systematic errors in quantum logic gates with composite rotations[J]. *Phys. Rev. A*, 2003, 67(4): 042308.
- [98] SOUZA A M, ALVAREZ G A, SUTER D. Robust dynamical decoupling for quantum computing and quantum memory[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, 106(24): 240501.
- [99] KABYTAYEV C, GREEN T J, KHODJASTEH K, et al. Robustness of composite pulses to time-dependent control noise[J]. *Phys. Rev. A*, 2014, 90(1): 012316.
- [100] AIM Z, CUI J M, HER R, et al. Experimental verification of anti-kibble-zurek behavior in a quantum system under a noisy control field[J]. *Physical Review A*, 2021, 103(1): 012608.
- [101] YANG Y C, COPPERSMITH S, FRIESEN M. Achieving high-fidelity single-qubit gates in a strongly driven charge qubit with 1/f charge noise[J]. *NPJ Quantum Inf.*, 2019, 5(1): 1-6.
- [102] GROSS J A, CAVES C M, MILBURN G J, et al. Qubit models of weak continuous measurements: Markovian conditional and open-system dynamics[J]. *Quantum Science and Technology*, 2018, 3(2): 024005.
- [103] JACOBS K, STECK D A. A straightforward introduction to continuous quantum measurement[J]. *Contemporary Physics*, 2006, 47(5): 279-303.

- [104] KRENN M, MALIK M, FICKLER R, et al. Automated search for new quantum experiments[J]. *Physical review letters*, 2016, 116(9): 090405.
- [105] SAITO H. Solving the bose–hubbard model with machine learning[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2017, 86(9): 093001.
- [106] MELNIKOV A A, POULSEN NAUTRUP H, KRENN M, et al. Active learning machine learns to create new quantum experiments[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2018, 115(6): 1221-1226.
- [107] CINCIO L, SUBAŞI Y, SORNBORGER A T, et al. Learning the quantum algorithm for state overlap[J]. *New Journal of Physics*, 2018, 20(11): 113022.
- [108] KRENN M, ERHARD M, ZEILINGER A. Computer-inspired quantum experiments [J]. *Nature Reviews Physics*, 2020, 2(11): 649-661.
- [109] NAVARATHNA R, JONES T, MOGHADDAM T, et al. Neural networks for on-the-fly single-shot state classification[J]. *Applied Physics Letters*, 2021, 119(11).
- [110] TIERSCH M, GANAHL E J, BRIEGEL H J. Adaptive quantum computation in changing environments using projective simulation[J]. *Scientific reports*, 2015, 5(1): 12874.
- [111] PALITTAPONGARNPIM P, WITTEK P, SANDERS B C. Controlling adaptive quantum phase estimation with scalable reinforcement learning[C]//24th European Symposium on Artificial Neural Networks, Bruges, April 27–29, 2016. 2016: 327-332.
- [112] DONG D, CHEN C, LI H, et al. Quantum reinforcement learning[J]. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B (Cybernetics)*, 2008, 38(5): 1207-1220.
- [113] ALBARRÁN-ARRIAGADA F, RETAMAL J C, SOLANO E, et al. Measurement-based adaptation protocol with quantum reinforcement learning[J]. *Physical Review A*, 2018, 98(4): 042315.
- [114] CÁRDENAS-LÓPEZ F A, LAMATA L, RETAMAL J C, et al. Multiqubit and multi-level quantum reinforcement learning with quantum technologies[J]. *PloS one*, 2018, 13(7): e0200455.

- [115] BALDRIDGE J, OSBORNE M. Active learning and the total cost of annotation[C]// Proceedings of the 2004 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. 2004: 9-16.
- [116] SETTLES B. Active learning literature survey[M]. University of Wisconsin-Madison Department of Computer Sciences, 2009.
- [117] WU Y, MENG Z, WEN K, et al. Active learning approach to optimization of experimental control[J]. Chinese Physics Letters, 2020, 37(10): 103201.
- [118] WIGLEY P B, EVERITT P J, VAN DEN HENGEL A, et al. Fast machine-learning online optimization of ultra-cold-atom experiments[J]. Scientific reports, 2016, 6(1): 25890.
- [119] SMITH J S, NEBGEN B, LUBBERS N, et al. Less is more: Sampling chemical space with active learning[J]. The Journal of chemical physics, 2018, 148(24).
- [120] GUBAEV K, PODRYABINKIN E V, HART G L, et al. Accelerating high-throughput searches for new alloys with active learning of interatomic potentials[J]. Computational Materials Science, 2019, 156: 148-156.
- [121] ZHANG L, LIN D Y, WANG H, et al. Active learning of uniformly accurate interatomic potentials for materials simulation[J]. Physical Review Materials, 2019, 3(2): 023804.
- [122] YAO J, WU Y, KOO J, et al. Active learning algorithm for computational physics[J]. Physical review research, 2020, 2(1): 013287.
- [123] ZHU R, PIKE-BURKE C, MINTERT F. Active learning for quantum mechanical measurements[A]. 2022.
- [124] DING C, XU X Y, NIU Y F, et al. Active learning on a programmable photonic quantum processor[J]. Quantum Science and Technology, 2022.
- [125] LANGE H, KEBRIČ M, BUSER M, et al. Adaptive quantum state tomography with active learning[J]. Quantum, 2023, 7: 1129.
- [126] SETTLES B, CRAVEN M, FRIEDLAND L. Active learning with real annotation costs[C]//Proceedings of the NIPS workshop on cost-sensitive learning: Vol. 1. Vancouver, CA:, 2008.

- [127] LEWIS D D. A sequential algorithm for training text classifiers: Corrigendum and additional data[C]//Acm Sigir Forum: Vol. 29. ACM New York, NY, USA, 1995: 13-19.
- [128] SEUNG H S, OPPER M, SOMPOLINSKY H. Query by committee[C]//Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory. 1992: 287-294.
- [129] SCHEFFER T, DECOMAIN C, WROBEL S. Active hidden markov models for information extraction[C]//International symposium on intelligent data analysis. Springer, 2001: 309-318.
- [130] SHANNON C E. A mathematical theory of communication[J]. The Bell system technical journal, 1948, 27(3): 379-423.
- [131] LENNON D T, MOON H, CAMENZIND L C, et al. Efficiently measuring a quantum device using machine learning[J]. npj Quantum Information, 2019, 5(1): 79.
- [132] PFEIFFER P, EGUSQUIZA I, DI VENTRA M, et al. Quantum memristors[J]. Scientific reports, 2016, 6(1): 29507.
- [133] CALDERARO L, FOLETTI G, DEQUAL D, et al. Direct reconstruction of the quantum density matrix by strong measurements[J]. Physical review letters, 2018, 121(23): 230501.
- [134] MIKAMI H, KOBAYASHI T. Remote preparation of qutrit states with biphotons[J]. Physical Review A, 2007, 75(2): 022325.
- [135] JIANG Y, EMIG T. String picture for a model of frustrated quantum magnets and dimers[J]. Physical review letters, 2005, 94(11): 110604.
- [136] ISAKOV S, MOESSNER R. Interplay of quantum and thermal fluctuations in a frustrated magnet[J]. Physical Review B, 2003, 68(10): 104409.
- [137] SUZUKI M. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+ 1)-dimensional ising systems: Equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations[J]. Progress of theoretical physics, 1976, 56(5): 1454-1469.

- [138] RIEGER H, KAWASHIMA N. Application of a continuous time cluster algorithm to the two-dimensional random quantum Ising ferromagnet[J]. The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, 1999, 9: 233-236.
- [139] SWENDSEN R H, WANG J S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations[J]. Physical review letters, 1987, 58(2): 86.
- [140] BLANKSCHTEIN D, MA M, BERKER A N, et al. Orderings of a stacked frustrated triangular system in three dimensions[J]. Physical Review B, 1984, 29(9): 5250.
- [141] CHALLA M S, LANDAU D. Critical behavior of the six-state clock model in two dimensions[J]. Physical Review B, 1986, 33(1): 437.
- [142] KOSTERLITZ J M, THOULESS D J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems[M]//Basic Notions Of Condensed Matter Physics. CRC Press, 2018: 493-515.
- [143] BERTA M, RENES J M, WILDE M M. Identifying the information gain of a quantum measurement[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 2014, 60(12): 7987-8006.
- [144] VELLIDO A, MARTÍN-GUERRERO J D, LISBOA P J. Making machine learning models interpretable.[C]//ESANN: Vol. 12. Citeseer, 2012: 163-172.
- [145] BIAMONTE J, WITTEK P, PANCOTTI N, et al. Quantum machine learning[J]. Nature, 2017, 549(7671): 195-202.
- [146] CEREZO M, ARRASMITH A, BABBUSH R, et al. Variational quantum algorithms [J]. Nature Reviews Physics, 2021, 3(9): 625-644.
- [147] HUANG H Y, KUENG R, TORLAI G, et al. Provably efficient machine learning for quantum many-body problems[J]. Science, 2022, 377(6613): eabk3333.
- [148] DING C, XU X Y, NIU Y F, et al. Active learning on a programmable photonic quantum processor[J]. Quantum Science and Technology, 2023, 8(3): 035030.
- [149] BRONSTEIN M M, BRUNA J, COHEN T, et al. Geometric deep learning: Grids, groups, graphs, geodesics, and gauges[A]. 2021.

- [150] LAROCCA M, SAUVAGE F, SBAHI F M, et al. Group-invariant quantum machine learning[J]. PRX Quantum, 2022, 3(3): 030341.
- [151] MEYER J J, MULARSKI M, GIL-FUSTER E, et al. Exploiting symmetry in variational quantum machine learning[J]. PRX Quantum, 2023, 4(1): 010328.
- [152] SCHATZKI L, LAROCCA M, NGUYEN Q T, et al. Theoretical guarantees for permutation-equivariant quantum neural networks[J]. npj Quantum Information, 2024, 10(1): 12.
- [153] ZHENG H, LI Z, LIU J, et al. Speeding up learning quantum states through group equivariant convolutional quantum ansätze[J]. PRX Quantum, 2023, 4(2): 020327.
- [154] NGUYEN Q T, SCHATZKI L, BRACCIA P, et al. Theory for equivariant quantum neural networks[A]. 2022.
- [155] RAGONE M, BRACCIA P, NGUYEN Q T, et al. Representation theory for geometric quantum machine learning[A]. 2022.
- [156] TÜYSÜZ C, CHANG S Y, DEMIDIK M, et al. Symmetry breaking in geometric quantum machine learning in the presence of noise[A]. 2024.
- [157] MCCLEAN J R, BOIXO S, SMELYANSKIY V N, et al. Barren plateaus in quantum neural network training landscapes[J]. Nature communications, 2018, 9(1): 4812.
- [158] MARRERO C O, KIEFEROVÁ M, WIEBE N. Entanglement-induced barren plateaus[J]. PRX Quantum, 2021, 2(4): 040316.
- [159] HOLMES Z, SHARMA K, CEREZO M, et al. Connecting ansatz expressibility to gradient magnitudes and barren plateaus[J]. PRX Quantum, 2022, 3(1): 010313.
- [160] SACK S H, MEDINA R A, MICHAILIDIS A A, et al. Avoiding barren plateaus using classical shadows[J]. PRX Quantum, 2022, 3(2): 020365.
- [161] PÉREZ-SALINAS A, CERVERA-LIERTA A, GIL-FUSTER E, et al. Data re-uploading for a universal quantum classifier[J]. Quantum, 2020, 4: 226.
- [162] SCHULD M, SWEKE R, MEYER J J. Effect of data encoding on the expressive power of variational quantum-machine-learning models[J]. Physical Review A, 2021, 103 (3): 032430.

- [163] REBENTROST P, MOHSENI M, LLOYD S. Quantum support vector machine for big data classification[J]. *Physical review letters*, 2014, 113(13): 130503.
- [164] CONG I, CHOI S, LUKIN M D. Quantum convolutional neural networks[J]. *Nature Physics*, 2019, 15(12): 1273-1278.
- [165] BAUSCH J. Recurrent quantum neural networks[J]. *Advances in neural information processing systems*, 2020, 33: 1368-1379.
- [166] VILALTA R, DRISSI Y. A perspective view and survey of meta-learning[J]. *Artificial intelligence review*, 2002, 18: 77-95.
- [167] CHANDARANA P, VIEITES P S, HEGADE N N, et al. Meta-learning digitized-counterdiabatic quantum optimization[J]. *Quantum Science and Technology*, 2023, 8(4): 045007.
- [168] BERRY M. Faster than fourier[J]. *Quantum Coherence and Reality*, 1994: 55-65.
- [169] BERRY M, ZHELUDOV N, AHARONOV Y, et al. Roadmap on superoscillations[J]. *Journal of Optics*, 2019, 21(5): 053002.
- [170] ZHELUDOV N I, YUAN G. Optical superoscillation technologies beyond the diffraction limit[J]. *Nature Reviews Physics*, 2022, 4(1): 16-32.
- [171] SINGH B K, NAGAR H, ROICHMAN Y, et al. Particle manipulation beyond the diffraction limit using structured super-oscillating light beams[J]. *Light: Science & Applications*, 2017, 6(9): e17050-e17050.
- [172] REMEZ R, TSUR Y, LU P H, et al. Superoscillating electron wave functions with subdiffraction spots[J]. *Physical Review A*, 2017, 95(3): 031802.
- [173] RIVY H M, ALJUNID S A, LASSALLE E, et al. Single atom in a superoscillatory optical trap[J]. *Communications Physics*, 2023, 6(1): 155.
- [174] ELIEZER Y, HARELI L, LOBACHINSKY L, et al. Breaking the temporal resolution limit by superoscillating optical beats[J]. *Physical review letters*, 2017, 119(4): 043903.
- [175] DRESSEL J, MALIK M, MIATTO F M, et al. Colloquium: Understanding quantum weak values: Basics and applications[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2014, 86(1): 307.

- [176] ROY S, CHALKER J, GORNYI I, et al. Measurement-induced steering of quantum systems[J]. *Physical Review Research*, 2020, 2(3): 033347.
- [177] WU S. State tomography via weak measurements[J]. *Scientific reports*, 2013, 3(1): 1193.
- [178] QIN L, XU L, FENG W, et al. Qubit state tomography in a superconducting circuit via weak measurements[J]. *New Journal of Physics*, 2017, 19(3): 033036.
- [179] SJÖQVIST E. Geometric phase in weak measurements[J]. *Physics Letters A*, 2006, 359(3): 187-189.
- [180] CORMANN M, REMY M, KOLARIC B, et al. Revealing geometric phases in modular and weak values with a quantum eraser[J]. *Physical Review A*, 2016, 93(4): 042124.
- [181] LI L, WANG Q W, SHEN S Q, et al. Geometric measure of quantum discord with weak measurements[J]. *Quantum Information Processing*, 2016, 15: 291-300.
- [182] PAN Y, ZHANG J, COHEN E, et al. Weak-to-strong transition of quantum measurement in a trapped-ion system[J]. *Nature Physics*, 2020, 16(12): 1206-1210.
- [183] GEBHART V, SNIZHKO K, WELLENS T, et al. Topological transition in measurement-induced geometric phases[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2020, 117(11): 5706-5713.
- [184] BERRY M, SHUKLA P. Pointer supershifts and superoscillations in weak measurements[J]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2011, 45(1): 015301.
- [185] ABAH O, PUEBLA R, KIELY A, et al. Energetic cost of quantum control protocols [J]. *New Journal of Physics*, 2019, 21(10): 103048.
- [186] GROVER L K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack[J]. *Physical review letters*, 1997, 79(2): 325.
- [187] ZHANG J, LI F G, XIE Y, et al. Realizing an adiabatic quantum search algorithm with shortcuts to adiabaticity in an ion-trap system[J]. *Physical Review A*, 2018, 98 (5): 052323.

- [188] ROLAND J, CERF N J. Quantum search by local adiabatic evolution[J]. Physical Review A, 2002, 65(4): 042308.
- [189] AHARONOV Y, VAIDMAN L. Properties of a quantum system during the time interval between two measurements[J/OL]. Phys. Rev. A, 1990, 41: 11-20.
- [190] JOZSA R. Complex weak values in quantum measurement[J/OL]. Phys. Rev. A, 2007, 76: 044103.

攻读博士学位期间取得的研究成果

一、论文

1. **Yongcheng Ding**, Minjia Hao, and Xi Chen, 量子云计算理论与应用简述, [自然杂志](#) **41**, 335 (2019)
2. **Yongcheng Ding**, José D. Martín-Guerrero, Mikel Sanz, Rafael Magdalena-Benedicto, Xi Chen, and Enrique Solano, Retrieving Quantum Information with Active Learning, [Physical Review Letters](#) **124**, 140504 (2020).
3. **Yongcheng Ding**, Tang-You Huang, Koushik Paul, Minjia Hao, and Xi Chen, Smooth bang-bang shortcuts to adiabaticity for atomic transport in a moving harmonic trap, [Physical Review A](#) **101**, 063410 (2020).
4. Yapeng Wang, **Yongcheng Ding**, Jianan Wang, and Xi Chen, Digital Quantum Simulation of Nonadiabatic Geometric Gates via Shortcuts to Adiabaticity, [Entropy](#) **22**, 1175 (2020).
4. Narendra N. Hegade, Koushik Paul, **Yongcheng Ding**, Mikel Sanz, Francisco Albarrán-Arriagada, Enrique Solano, and Xi Chen, Shortcuts to adiabaticity in digitized adiabatic quantum computing, [Physical Review Applied](#) **15**, 024038 (2021).
5. **Yongcheng Ding**, Xi Chen, Lucas Lamata, Enrique Solano, and Mikel Sanz, Implementation of a Hybrid Classical-Quantum Annealing Algorithm for Logistic Network Design, [Springer Nature Computer Science](#) **2**, 68 (2021).

6. **Yongcheng Ding**, Yue Ban, José D. Martín-Guerrero, Enrique Solano, Jorge Casanova, and Xi Chen, Breaking adiabatic quantum control with deep learning, [Physical Review A](#) **103**, L040401 (2021).
7. Yue Ban, Javier Echanonbe, **Yongcheng Ding**, Ricardo Puebla, and Jorge Casanova, Neural-network-based parameter estimation for quantum detection, [Quantum Science and Technology](#) **6**, 045012 (2021).
8. **Yongcheng Ding**, José D. Martín-Guerrero, Yujing Song, Rafael Magdalena-Benedicto, and Xi Chen, Active Learning for the Optimal Design of Multinomial Classification in Physics, [Physical Review Research](#) **4**, 013213 (2022).
9. Ming-Zhong Ai*, **Yongcheng Ding***, Yue Ban, José D. Martín-Guerrero, Jorge Casanova, Jin-Ming Cui, Yun-Feng Huang, Xi Chen, Chuan-Feng Li, and Guang-Can Guo, Experimentally Realizing Efficient Quantum Control with Reinforcement Learning, [Science China Physics, Mechanics & Astronomy](#) **65**, 250312 (2022).
10. Jianan Wang, **Yongcheng Ding**, Minjia Hao, and Xi Chen, 基于数字反向透热补偿的量子算法, [上海大学学报\(自然科学版\)](#) **28**, 883 (2022).
11. **Yongcheng Ding**, Yue Ban, and Xi Chen, Towards Quantum Control with Advanced Quantum Computing: A Perspective, [Entropy](#) **24**, 1743 (2022).
12. **Yongcheng Ding**, Javier Gonzalez-Conde, Lucas Lamata, José D. Martín-Guerrero, Enrique Lizaso, Samuel Mugel, Xi Chen, Roman Orús, and Enrique Solano, Towards prediction of financial crashes with a d-wave quantum computer, [Entropy](#) **25**, 323 (2022).

13. **Yongcheng Ding**, Xi Chen, Rafael Magdalena-Benedicto, and José D. Martín-Guerrero, Closed-loop control of a noisy qubit with reinforcement learning, [Machine Learning: Science and Technology](#) **4**, 025020 (2023).
14. Tangyou Huang, **Yongcheng Ding**, Léonce Dupays, Yue Ban, Man-Hong Yung, Adolfo del Campo, and Xi Chen, Time-optimal control of driven oscillators by variational circuit learning, [Physical Review Research](#) **5**, 023173 (2023).
15. **Yongcheng Ding**, José D Martín-Guerrero, Yolanda Vives-Gilabert, and Xi Chen, Active Learning in Physics: From 101, to Progress, and Perspective, [Advanced Quantum Technologies](#) 2300208 (2023).
16. Yuan Feng, Xi Chen, and **Yongcheng Ding**, Weak-Valued Correlation Functions: Insights and Precise Readout Strategies, [Physical Review A](#) **109**, 052210 (2024).

二、预印本

1. **Yongcheng Ding**, Yiming Pan, and Xi Chen, Superoscillating Quantum Control Induced By Sequential Selections, arXiv:2305.04303 (Phys. Rev. Lett. under review)
2. Tian-Niu Xu, **Yongcheng Ding**, José D Martín-Guerrero, and Xi Chen, Dropout is all you need: robust two-qubit gate with reinforcement learning, arXiv:2312.06335 (Phys. Rev. A. under review)
3. Yiming Pan, Ruoyu Yin, **Yongcheng Ding**, Daniel Podolsky, and Bin Zhang, "half-electron ($e/2$)"-free electron fractional charge induced by twisted light, arXiv:2401.00723 (Nat. Phys. under review)

4. Jialiang Tang, Ruqian Xu, **Yongcheng Ding**, Xusheng Xu, Yue Ban, Man-hong Yung, Axel Pérez-Obiol, Gloria Platero, and Xi Chen, "Exploring Ground States of Fermi-Hubbard Model on Honeycomb Lattices with Counterdiabaticity", arXiv:2405.09225

三、项目

1. 中国物理学会-华为 MindSpore Quantum 学术奖励基金, 主持, 2023-2024.

致 谢

博士毕业一事在我看来是遥遥无期的，对这一天我从未有任何期待与焦虑。事实上，如果以学术水平而不是培养计划来衡量，我早该好几年前就毕业了。但这不代表我心怀忿懥，恰恰相反，我对此毫不在意，因为这是我人生中最自由最快乐的时光。回首往事，恍如昨日，我还是那个激扬文字的少年，在 2016 年盛夏的讨论班上和陈老师畅谈量子绝热定理。而如同山中打柴观仙人下棋的王质一样，不知不觉斧柯尽烂，日历上告知我，现在已经是 2024 年了。

在这次的致谢中，我决定先感谢我的导师陈玺教授。这段美妙的旅途于他的人物传记中被定义为“亦师亦友”。是的，我想陈老师一定是一位伟大的孔子式的教育家，以至于可以有教无类，使我这种疑难杂症般的学生，也可以顺利在团队内度过本硕博八年的时光。考虑到我多元的爱好、奇异的性格与复杂的背景，原本我的科研生涯应该是不存在的。但劈树开山后，如今这一道路又隐隐可见了，正是陈老师这些年来无条件无保留的支持，引导我不断前行而从未觉困苦。我深知指导一名个性鲜明、崇尚自由的学生绝非易事，并感激于陈老师这些年来对我思想的尊重与错误的指正。这使我决意接过火炬，日后如有幸继续从教的话，努力将威权这一毒瘤从我们的文化中剔除出去。

然后我要感谢我自己，我选择做科研是兴趣使然，而拿个博士学位总是没有那么容易的，导师再伟大，博士期间实际工作的完成还是要归功于自己的。虽然在我其他爱好的影响下，我远远没有做到能做到的最好，但还是在量子信息、量子控制、量子测量理论方向做出了一些自认为有趣的工作，在学术界取得了一些奖项与支持。其中高妙的制衡已使我心满意足。我意识到，不出意外的话，我应该是永远无法成为一名优秀的物理学家了，但这并没有什么遗憾的，更重要的是享受沿途的风景。

接着我要感谢和我一起工作的海内外的合作者们。感谢你们在我生涯起步阶段对我的信任、欣赏与帮助，以及最重要的，对我工作方式与习惯的理解与尊重。一个人的力量终究是有限的，而科学根植于讨论与合作之中。

感谢以黎菁师姐、徐天牛师兄、王亚鹏师弟、吴羽师弟为首的所有同门，以及

海外访问期间所在课题组的所有同学，因为历史悠久人数过多，恕我无法一一细数。感谢前量子人工智能科学技术研究中心工作的郝敏佳老师、董昭老师、施解龙老师。你们或是从我刚来课题组时候引领我新手上路，或是在我准备毕业时协助我处理各类事项。对于各位与我相处期间每一天里带给我的温暖，我无以为报。

感谢这些年来爱人们，你们是我生命中的精灵。

感谢家人。尽管我自幼就告诉你们我会成为物理学家，而你们其实一直有所质疑，但在纠正了你们的认识后，你们仍然给予我力所能及的最大支持。在这段旅途的终点，我不仅与你们和解，也实现了与自我的和解。

丁泳程

于 巴斯克国

2024 年 1 月 30 日