



清华大学 交叉信息研究院

Institute for Interdisciplinary Information Sciences, Tsinghua University

Academic Newsletter

学术科研简报

2020.07-12



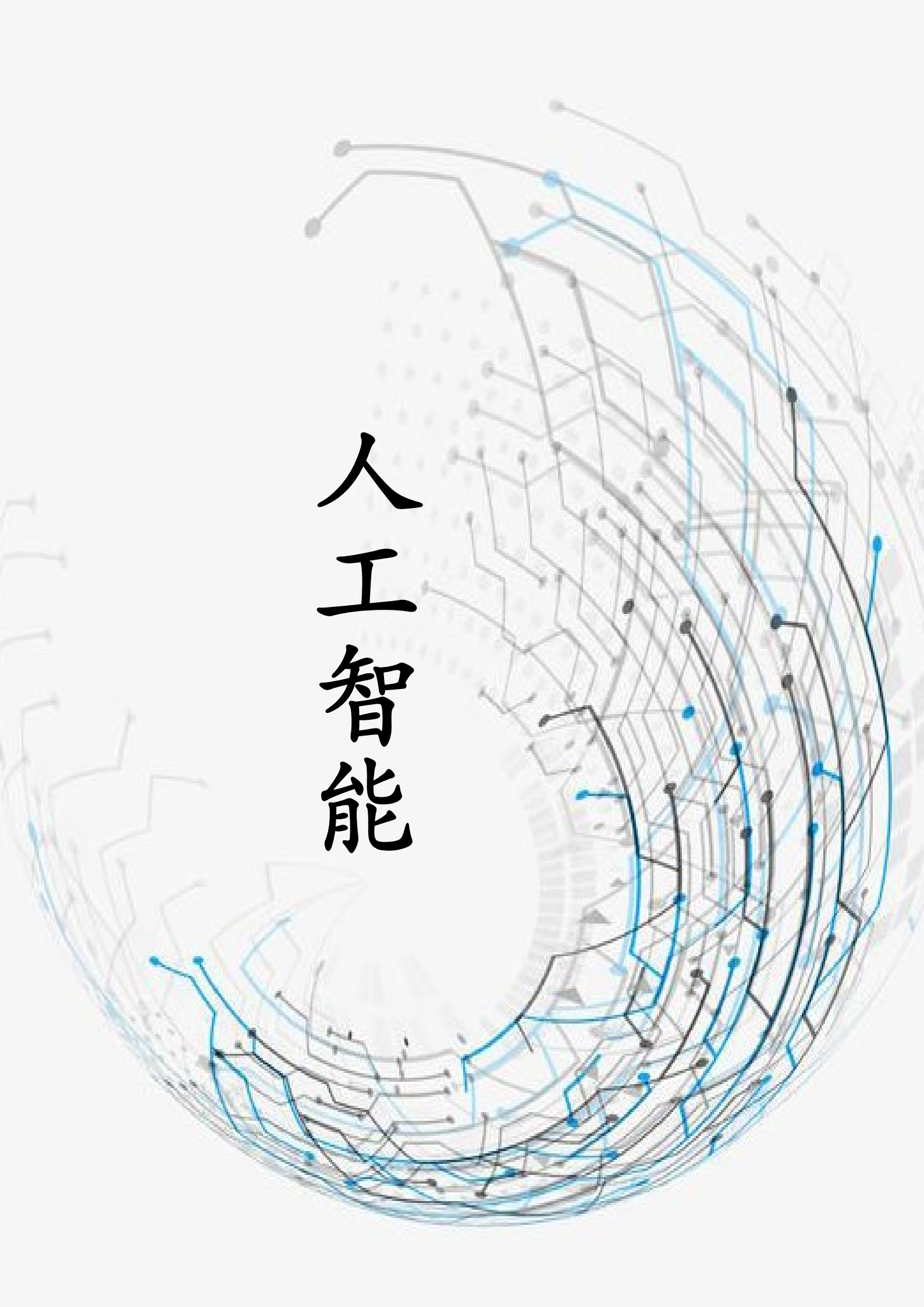
人工智能

- 04 计算生物与医学
- 07 机器学习
- 11 前沿架构与智能芯片
- 13 强化学习
- 15 网络科学
- 16 机器人
- 17 自动驾驶
- 18 自然语言处理
- 20 区块链系统

量子信息

- 24 拓扑凝聚态物理
- 27 超导量子计算
- 30 离子阱量子计算
- 31 量子密码学和纠缠探测
- 34 量子人工智能
- 36 量子纠缠

人工智能



一、计算生物与医学

主要完成人：曾坚阳研究组（曾坚阳、赵诞、田庭忠、万方平、李舒雅、李晗等）、徐葳研究组（徐葳）

药物重定位综合性方法发现新冠肺炎潜在药物

2020 年新型冠状病毒肺炎（COVID-19）疫情在全球范围内快速传播。疫情初期，由于特效药和疫苗的缺乏，寻找有效的抗病毒药物遏制疫情的进一步传播成为当前的迫切需求。曾坚阳研究组与合作团队通过老药新用、药物重定位方法，从已经获得批准的老药中挖掘其新的用途，成功发现有望治疗 COVID-19 的潜在药物。

曾坚阳研究组开发了一套药物重定位框架，通过整合机器学习和统计分析等方法，系统地集成并挖掘大规模知识图谱、文献和转录组数据，从老药中寻找新冠病毒的候选药物。使用以 SARS 和 MERS 冠状病毒数据进行的回顾性研究表明，基于机器学习的药物重定位方法可以成功预测针对特定冠状病毒的有效候选药物，该计算框架发现聚 ADP-核糖聚合酶 1（PARP1）抑制剂 CVL218 可能是一个治疗 COVID-19 的有效药物。随后，曾坚阳研究组与合作团队开展一系列体外细胞实验，发现 CVL218 能够有效抑制 SARS-CoV-2 病毒的复制，并且没有明显的细胞毒性。同时，和另一个抗病毒药物法匹拉韦（favipiravir）的联合用药能够进一步提高 CVL218 对病毒的抑制功效。此外，表面等离子体共振（SPR）实验表明，和同时测定的其它 PARP1 抑制剂或抗病毒药物相比，CVL218 能够以更高的亲和力与 SARS-CoV-2 病毒的核衣壳蛋白（N 蛋白）相互作用。另外，实验发现 CVL218 能够在人外周血单核细胞（PBMC）样本中抑制由脂多糖（LPS）诱导的炎症细胞因子含量升高，表明该药物还可能在减轻 SARS-CoV-2 诱导的过度炎症反应和组织损伤中发挥抗炎作用。基于本研究的实验结果和先前文献中报道的证据，研究组还提出了几种可能的机制来解释 CVL218 用于治疗 COVID-19 的潜在作用机理。综合而言，曾坚阳研究组自主开发的药物重定位框架发现的 PARP1 抑制剂 CVL218 可能成为治疗 COVID-19 的潜在有效治疗药物。

该成果研究论文：Yiyue Ge, Tingzhong Tian, Suling Huan, Fangping Wan, Jingxin Li, Shuya Li, Hui Yang, Lixiang Hong, Nian Wu, Enming Yuan, Yunan Luo, Lili Cheng, Chengliang Hu, Yipin Lei, Hantao Shu, Xiaolong Feng, Ziyuan Jiang, Yunfu Wu, Ying Chi, Xiling Guo, Lunbiao Cui, Liang Xiao, Zeng Li, Chunhao Yang, Zehong Miao, Haidong Tang, Ligong Chen, Haitao Li, Hainian Zeng, Dan Zhao, Fengcai Zhu, Xiaokun Shen, Jianyang Zeng. "An integrative drug repositioning framework discovered a potential therapeutic agent targeting COVID-19", Signal Transduction and Targeted Therapy (IF 13.493) , Accepted 2020.

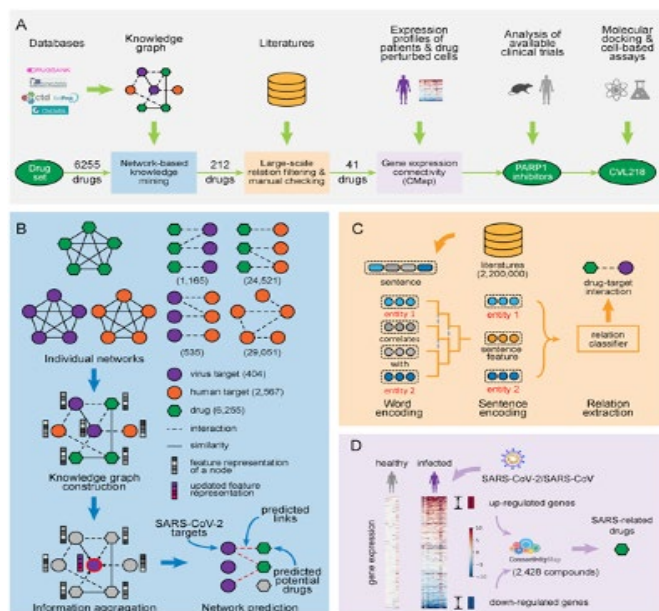


图1 针对新冠肺炎的综合性药物重定位方法流程图

基于任务间相似度的小分子性质预测方法

准确理解和预测小分子的性质，例如物理化学性质以及生物活性，在药物发现过程中至关重要。由于大多数的小分子数据集存在数据量匮乏的问题，妨碍了以数据驱动为核心的模型开发，特别是深度学习模型在小分子性质预测任务中的应用。为了提高深度学习模型在小数据集上的预测效果，如何最大化地利用已有数据是一个重要问题。

为了解决这个问题，曾坚阳研究组开发了一个基于任务间相似度的小分子性质预测方法，利用估计的相似度提高了深度学习模型在小数据集上的预测性能。该方法从预训练的深度学习模型中提取并向量化小分子性质预测任务相关的知识，从而将任务映射到一个隐层空间，最后在这个隐层空间中衡量任务间的相似度。利用该方法估计的任务间的相似度可以指导迁移学习中源任务的选择，从而更高效地利用已有的数据集。实验证明，给定一个目标任务，通过选择相似度较高的任务作为源任务可以有效地提升通过迁移学习训练的深度学习模型对目标任务的预测效果。此外，该方法中的归因方法可以用来可视化小分子中重要的官能团，为任务间的相似度提供一定的可解释性。曾坚阳研究组开发的这个方法能够帮助研究者们更加深入地理解小分子间的关系以及内在性质，从而为药物研发做出贡献。

该成果研究论文：Han Li, Xinyi Zhao, Shuya Li, Fangping Wan, Shao Li, Dan Zhao and Jianyang Zeng. "MoTSE: an interpretable task similarity estimator for small molecular property prediction tasks", RECOMB 2021.

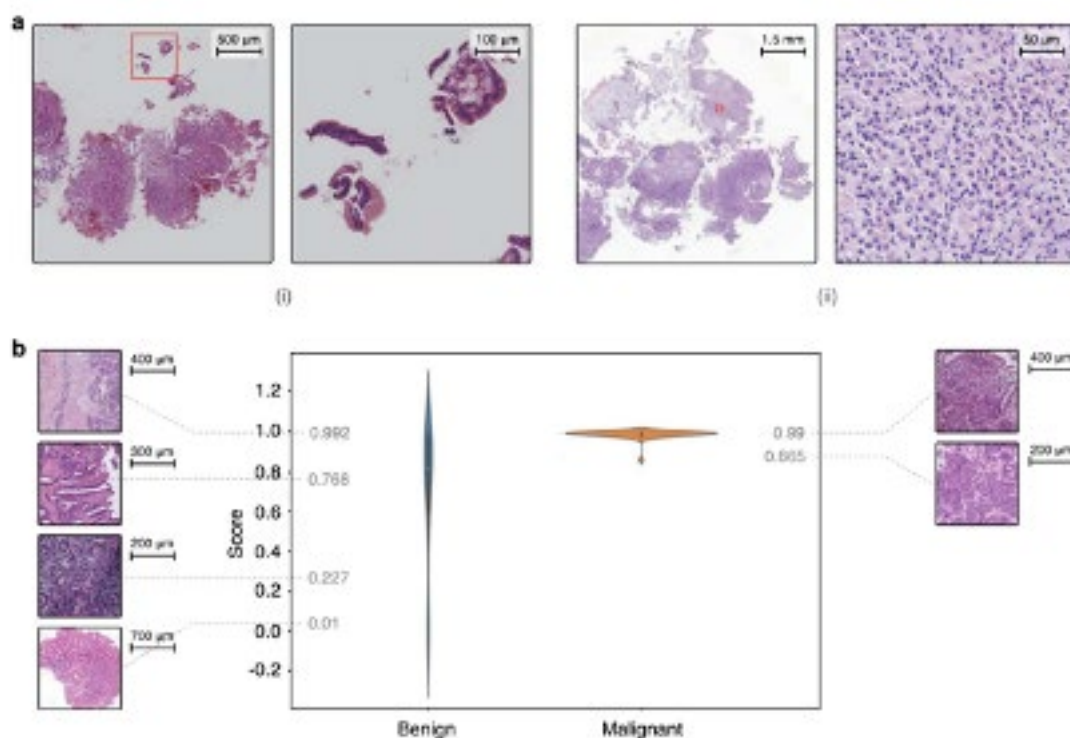


图 1. 基于任务间相似度的小分子性质预测方法

胃癌病理辅助诊断系统

徐葳研究组与中国人民解放军总医院、中国医学科学院肿瘤医院、北京协和医院等单位合作研发的胃癌病理辅助诊断系统，已经在解放军总医院等数十家医院获得临床应用。该系统在解放军总医院超过 3000 张真实世界测试切片上达到了接近 100% 的灵敏度和 80.6% 的特异性，并通过人机协同实验与预测结果的细致分析，证实该系统能够帮助病理学家提高诊断准确率、防止误诊。与此同时，通过北京协和医院与医科院肿瘤医院样本的多中心测试，研究人员证明了该系统的稳定性。本研究所提出的方法论，适用于所有器官病理人工智能系统的建立，能够帮助研究人员加速智慧病理的研发进程，进而造福更多的患者。

该成果研究论文：Zhigang Song, Shuangmei Zou, Weixun Zhou, Yong Huang, Liwei Shao, Jing Yuan, Xiangnan Gou, Wei Jin, Zhanbo Wang, Xin Chen, Xiaohui Ding, Jinhong Liu, Chunkai Yu, Calvin Ku, Cancheng Liu, Zhuo Sun, Gang Xu, Yuefeng Wang, Xiaoqing Zhang, Dandan Wang, Shuhao Wang, Wei Xu, Richard C. Davis and Huaiyin Shi. "Clinically applicable histopathological diagnosis system for gastric cancer detection using deep learning", Nature Communications 2020.



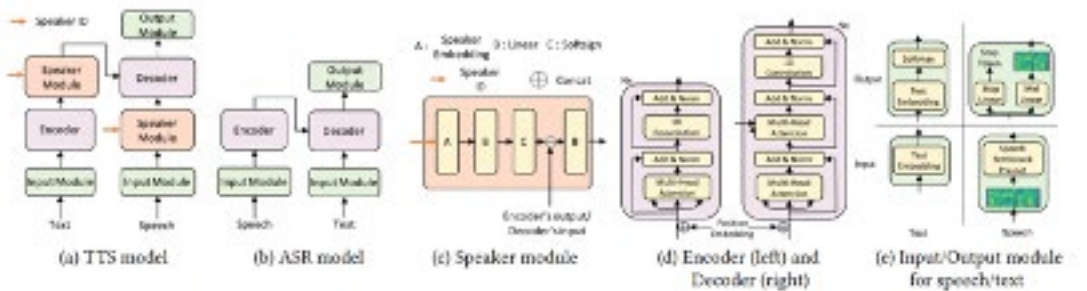
二、机器学习

主要完成人：李建研究组（李建、徐进、王远皓、张楚珩，李元齐等）、黄隆波研究组（黄隆波、杜伊涵、汪思为等）

低资源语音合成

语音合成（文本到语音，TTS）和识别（自动语音识别，ASR）是重要的语音任务。这些任务通常需要大量的文本和语音对以进行模型训练。但是，世界上有超过 6,000 种语言，并且大多数语言都缺乏语音训练数据。因此，在这些训练资源极少的语言下构建 TTS 和 ASR 系统存在巨大的挑战。李建研究组在资源极低的情况下开发了 LRSpeech 系统，它可以以较低的数据成本支持稀有语言。LRSpeech 包含三种关键技术：1) 对丰富资源语言进行预培训，并对低资源语言进行微调；2) TTS 和 ASR 之间的双重转换，以迭代方式提高彼此的准确性；3) 知识提炼，以在高质量的目标扬声器语音上定制 TTS 模型，并改进多种语音上的 ASR 模型。在实验中，该研究组使用实验语言（英语）和真正的资源匮乏的语言（立陶宛语）进行实验。实验结果表明，LRSpeech 1) 在合成语音的清晰度（可识别率超过 98%）和自然度（平均意见得分（MOS）高于 3.5）方面均达到了很高质量，满足了工业部署的要求，同时它使用了极少的资源训练数据，极大的节省了成本。此项工作是和微软亚洲研究院合作完成。微软将该技术部署到稀有语言的云语音服务中以服务更多用户。

该成果研究论文: Jin Xu, Xu Tan, Yi Ren, Tao Qin, Jian Li, Sheng Zhao, Tie-Yan Liu. "LRSpeech: Extremely Low-Resource Speech Synthesis and Recognition", KDD 2020.



Setting	TTS		ASR	
	IR (%)	MOS	WER (%)	CER (%)
Baseline #1	/	/	148.29	100.16
Baseline #2	/	/	122.09	97.91
+PF	93.09	2.84	103.70	69.53
+PF+DT	96.70	3.28	38.94	19.99
+PF+DT+KD (LRSpeech)	98.08	3.57	28.82	14.65
GT (Parallel WaveGAN)	-	3.88	-	-
GT	-	4.05	-	-

极小极大优化问题的最优算法

李建研究组研究了一个基础的极小极大优化问题 $\min_x \max_y f(x, y)$ 。这类问题在博弈问题中经常出现，是一类基础的优化问题。该研究组考虑 $f(x, y)$ 相对于 x 是 m_x -强凸，相对于 y 是 m_y -强凹， (L_x, L_{xy}, L_y) -光滑的情况。李建研究组提出了一种具有更好的梯度复杂度上限的新算法，该算法对 Lin 等人最近的突破性算法进行了改进。该研究组的新算法实现了线性收敛速度，并且对条件数的依赖性更优，尤其是在 $L_{xy} \ll L$ （即 x 和 y 之间的交互性较弱）时。通过规约，该研究组的收敛上界也暗示了强凸凹和凸凹极小极大值优化问题的改进上界。当 f 为二次方时，该研究组可以进一步改进这个上界，得到了理论上近似最优的算法。

该成果研究论文：Yuanhao Wang, Jian Li. "Improved Algorithms for Convex-Concave Minimax Optimization", NeurIPS 2020.

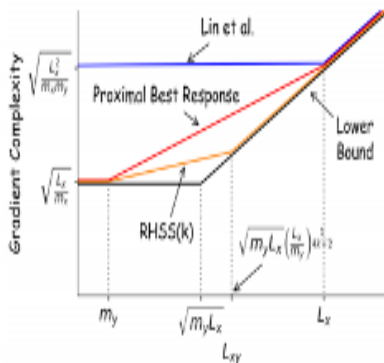


Figure 1: Comparison of previous upper bound [25], lower bound [45] and the results in this paper when $L_x = L_y, m_x < m_y$, ignoring logarithmic factors. The upper bounds and lower bounds are shown as a function of L_{xy} while other parameters are fixed.

金融时序预测的新算法

现代机器学习模型（例如深度神经网络和增强决策树模型）由于其提取复杂非线性模式的卓越能力而在金融市场预测中变得越来越流行。但是，由于金融数据集的信噪比非常低，因此复杂的模型通常非常容易过拟合，并且训练过程常会出现不稳定。此外，随着各种机器学习和数据挖掘工具在定量交易中越来越广泛地使用，许多基金公司已经生产了越来越多的因子（或特征）。因此，如何自动选择有效特征成为迫在眉睫的问题。为了解决这些问题，李建研究组提出了 DoubleEnsemble。这是一个新的集成学习的框架，其利用基于学习轨迹的样本加权方法和基于 shuffle 的特征选择方法。具体来说，李建研究组根据每个样本的训练过程来确定关键样本，并通过 shuffle 每个特征计算的特征影响后得出关键特征。该研究组的模型可应用于多个基础模型，能够提取复杂的模式，同时减轻了金融市场预测的过度拟合和不稳定问题。此项研究使用 DNN 和梯度提升决策树作为基础模型在中国证券市场进行了大量实验，并得到了比基准方法更有效的算法。

该成果研究论文：Chuhang Zhang, Yuanqi Li, Xi Chen, Yifei Jin, Pingzhong Tang, Jian Li. "DoubleEnsemble: A New Ensemble Method Based on Sample Reweighting and Feature Selection for Financial Data Analysis", ICDM 2020.

TABLE II: Performance of the stock trading strategies. The transaction fee is 0.3%.

		DAILY				WEEKLY				
		Ann.Ret.	Sharpe	MD	IC/IR	Ann.Ret.	Sharpe	MD	IC/IR	
MLP	DoubleEnsemble	SR+FS	51.37%	4.941	5.98%	0.115/0.035	25.67%	4.448	2.41%	0.078/0.773
		SR+Manual	50.68%	4.343	7.94%	0.106/0.994	19.16%	3.300	2.48%	0.078/0.784
		SR+ALL	37.25%	2.923	14.34%	0.103/0.966	15.36%	3.051	2.32%	0.070/0.691
	Baselines	SimpleEnsemble+All	26.74%	2.435	12.61%	0.091/0.967	12.56%	2.049	4.59%	0.068/0.670
		SimpleEnsemble+Manual	46.49%	3.813	11.75%	0.097/0.963	16.78%	2.817	2.45%	0.068/0.757
		TimeWeighted+Manual	22.10%	1.836	18.49%	0.081/0.791	15.16%	2.342	3.56%	0.061/0.700
GRM	DoubleEnsemble	SR+FS	46.60%	4.151	8.60%	0.103/0.861	16.77%	3.160	3.25%	0.068/0.668
		SR+Manual	41.24%	3.854	9.87%	0.096/0.807	19.84%	3.862	3.93%	0.071/0.676
		SR+ALL	29.75%	3.594	7.13%	0.097/0.816	15.76%	3.379	4.04%	0.070/0.670
	Baselines	SimpleEnsemble+All	18.19%	1.661	18.49%	0.101/0.858	11.55%	2.137	3.61%	0.065/0.635
		SimpleEnsemble+Manual	26.74%	2.435	12.61%	0.097/0.815	15.48%	2.902	3.52%	0.068/0.650
		TimeWeighted+Manual	23.39%	2.176	21.77%	0.093/0.768	12.47%	2.448	3.19%	0.065/0.636
		FCTimeWeighted+Manual	22.20%	1.669	13.68%	0.093/0.832	14.49%	2.355	4.22%	0.066/0.642

“对决多臂老虎机”的组合纯探索

“多臂老虎机 (Multi-Armed Bandit)”是一个经典的在线学习问题，并且在临床试验、在线广告等领域被广泛应用。组合纯探索问题是多臂老虎机领域的一个重要问题，它对组合结构在纯探索在线学习过程中的采样复杂性进行了建模。现有的组合纯探索相关论文主要研究能够观测到定量反馈的设定，但在许多现实应用中，如推荐系统、委员会选拔等，我们往往只能得到两两比较的定性反馈。针对这种涉及到主观性、比较性反馈的场景，“对决多臂老虎机”是一个非常适用的在线学习模型，将组合纯探索问题拓展到对决老虎机设定下能够对学习过程中的比较性反馈进行更准确的建模。

黄隆波研究组与微软亚洲研究院的陈卫老师合作，首次将对决多臂老虎机的组合纯探索问题进行建模，刻画了在比较性反馈设定下二分图匹配的在线学习问题，并针对两种对决多臂老虎机常用的最优准则“Borda winner”和“Condorcet winner”提出了不同的算法。在最优准则“Borda winner”下，该研究组提出了多项式时间的近似算法和精确算法，分析了算法的采样复杂性，并且提出了该问题的下界，证明所提出的算法在一类子问题上达到近似最优（算法上界与问题下界的差距在对数量级内）。在最优准则“Condorcet winner”下，研究组针对离线问题首次提出了多项式时间算法，又基于这个离线算法设计了多项式时间的在线算法，并且证明了当问题退化到对决多臂老虎机的传统纯探索问题时，所提算法的采样复杂性与现有的最好结果匹配。这项工作为组合纯探索问题从传统定量反馈拓展到定性比较反馈的问题建模和算法分析做出了贡献。

该成果研究论文：W. Chen, Y. Du, L. Huang, H. Zhao. "Combinatorial Pure Exploration for Dueling Bandit", ICML 2020.

为带延时匿名观测的 MAB 模型设计自适应算法

MAB 模型已经在现实中的广告系统内得到了广泛的应用。然而，现实中的实例远比理想模型复杂。在理想模型中，系统在执行一次操作后会立刻得到一个准确的反馈，但在现实系统中，一次广告的投放所带来的影响可能会有着一定的延时，并且其影响可能和投放的其他广告混合在一起，难以分辨。因此，在这个问题中，系统既不能保证立刻获得反馈，也不能保证获取的反馈是准确的。目前解决这一问题的算法均需要关于延时的一些信息，比如说延时的平均值，延时的方差，延时的最大值等等。由于在现实问题中对于延时信息的准确估计较为困难，设计无需准确延时信息的算法就变得更加重要。

作为这一领域的一项突破性进展，黄隆波研究组提出了一类新的自适应学习算法，称之为 ARS 类算法。该类算法会在一段时间内一直选择同一个操作，而且这个时间段会不断的增长。分析表明，在随机模型下，快速增长的时间段长度可以保证 ARS-UCB 算法总损失的次线性。而在对抗模型下，慢速增长的时间段长度可以保证 ARS-EXP3 和 ARS-CLW 算法总损失的次线性。无论是在哪种情况下，ARS 类自适应算法都不需要任何有关延时的信息就能保证算法本身的有效性。仿真实验则表明，该类算法的损失要比已有的算法更小，尤其是在对于延时的信息估计并不准确的时候。

该成果研究论文：Siwei Wang, Haoyun Wang, Longbo Huang. "Adaptive Algorithms for Multi-armed Bandit with Composite and Anonymous Feedback", AAAI 2021.

为 Restless Bandit 模型设计有效的低复杂度在线算法

Restless Bandit 是一种在线学习模型。它被广泛应用于通信系统，路由系统等互联网系统中。相比起传统的 MAB 模型，Restless Bandit 模型对于每个 action 做出了进一步的假设 ---- 即假设每个 action 内部服从一个马尔科夫链的结构。这样的假设使得 Restless Bandit 模型更为贴合现实中的网络系统，然而，这也同样使设计解决 Restless Bandit 模型的算法变得较为困难。目前已有的算法要么承受着指数级的时间复杂度，要么不能保证算法的有效性。因此，为 Restless Bandit 模型设计有效的低复杂度算法就变得十分重要。

作为这一领域的一项突破性进展，黄隆波研究组提出了一种新的在线学习算法，命名为 Restless-UCB。该算法使用了“探索—应用”结构，即先利用一些探索来对整个问题的参数做出较为准确的估计，然后利用现有的离线工具在估计出的参数上设计学习算法。研究表明，在使用多项式级复杂度的离线工具时，该算法的复杂度同样是多项式级的。于此同时，分析表明该算法可以保证整个问题的损失是次线性的，也就是说这是一个有效的算法。仿真实验结果则表明，比起现有算法，Restless-UCB 有着更低的时间消耗，同时损失也更小。

该成果研究论文：Siwei Wang, Longbo Huang, John, C.S. Lui. "Restless-UCB, an Efficient and Low-complexity Algorithm for Online Restless Bandits", NeurIPS 2020.

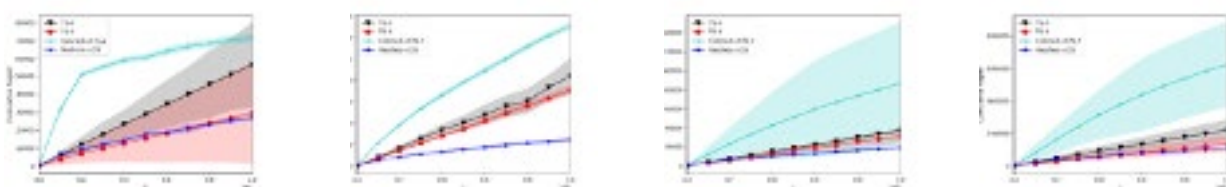


图 1：仿真实验中不同算法的损失比较

	2 Arms	3 Arms	4 Arms	5 Arms
Restless-UCB	4s	5s	5s	5s
TS-9	4s	6s	8s	10s
TS-4	3s	4s	6s	9s
Colored-UCRL2	5s	326s	8892s	129387s

图 2：仿真实验中不同算法的平均运行时间比较

三、前沿架构与智能芯片

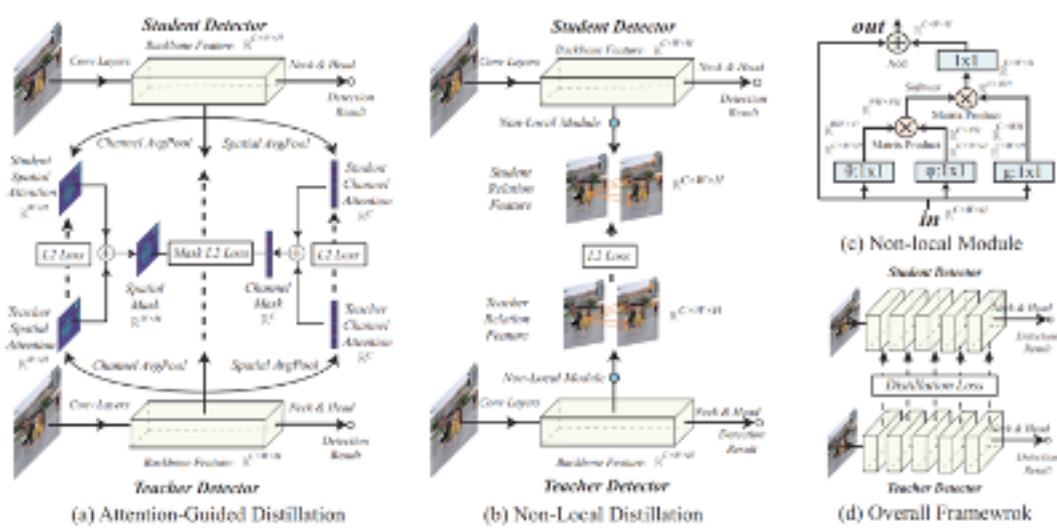
主要完成人：马恺声研究组（马恺声、张林峰等）

通过知识蒸馏提高目标检测的性能

近年来，知识蒸馏算法被提出并迅速应用到了计算机视觉、自然语言处理等各个领域，在模型压缩、模型性能提升上取得了显著效果。然而，在计算视觉中，大部分的分类算法都仅在图像分类这一简单的任务上被验证，这些算法在目标检测、实体分割等任务上往往并不理想。马恺声研究组认为这一问题的产生有以下两个原因：首先，与图像分类不同，目标检测中图像中大部分的像素点均为背景图，这些背景图的像素的蒸馏是没有意义的，甚至还会抑制前景像素的学习。其次，在目标检测中，不同物体之间，不同物体与环境之间的信息至关重要，而基于图像分类问题的知识蒸馏算法往往都忽略了这一点。

为解决以上问题，马恺声研究组提出了一种新型的特征蒸馏算法：注意力驱动的知识蒸馏和非局部关系知识蒸馏。注意力驱动的知识蒸馏通过注意力机制，从神经网络的特征图中识别出前景物体所在的位置，并对加大对于这些位置蒸馏的权重，同时抑制对背景图像的学习。非局部关系知识蒸馏通过非局部模块（Non-Local Module）获取不同像素点之间的关系，并将此关系从教师网络迁移到学生网络，使学生网络可以更好的刻画像素点的关系信息。实验结果显示，该算法可以在 Two-Stage, One-Stage, Anchor-Based, Anchor-Free 等多种类型的目标检测器上取得显著性能提升，在 Mask-RCNN 等模型上可以同时提高检测性能和实体分割性能。

该成果论文：Linfeng Zhang, Kaisheng Ma. "Improve Object Detection with Feature-Based Knowledge Distillation: Towards Accurate and Efficient Detectors", ICLR2021.

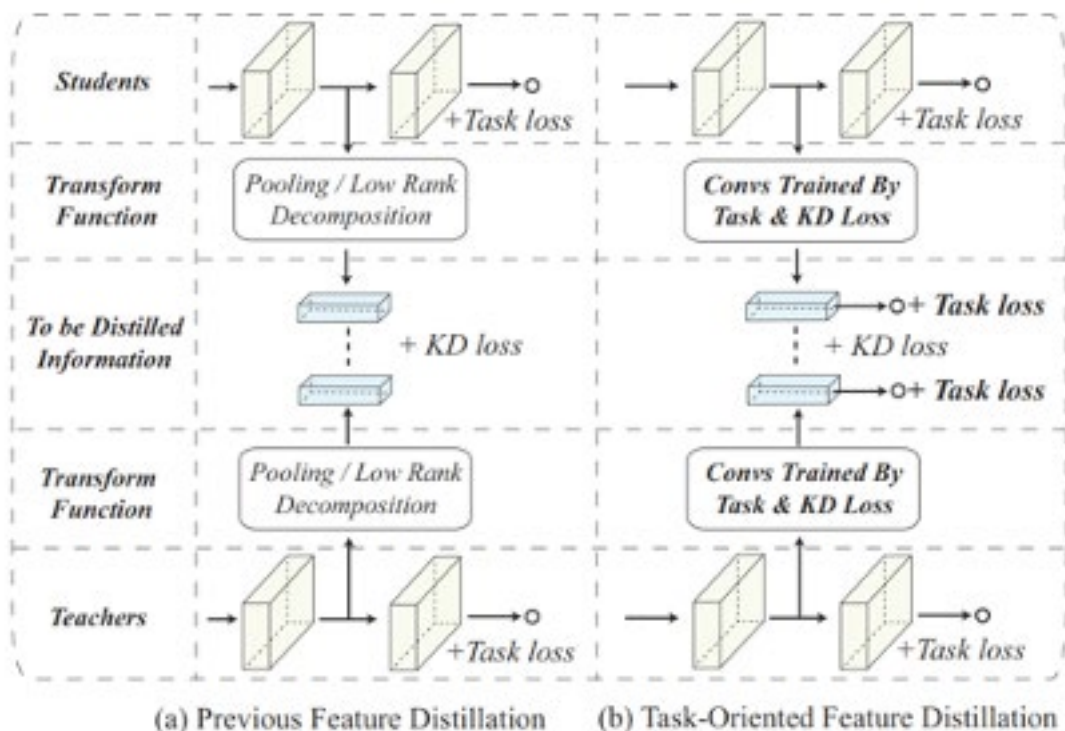


任务导向的特征蒸馏

近年来，神经网络模型在计算机视觉、自然语言处理等各类任务中取得了优秀的表现。然而，神经网络通常有着海量的参数量和计算量，这严重地限制了它在边缘设备上的部署应用。特征蒸馏算法是解决上述问题，实现神经网络压缩的有效手段，它将一个过参数化的教师模型的特征迁移到一个轻量级的学生网络中，以此实现压缩。目前的特征蒸馏算法往往不加选择对于教师网络中所有的特征进行迁移。然而，神经网络特征中存在着大量冗余的信息，这些冗余信息的蒸馏不仅对于学生网络性能的提升没有帮助，甚至还会造成负面影响。

为了解决该问题，马恺声研究组提出了一种新型的知识蒸馏算法，名为任务导向的特征蒸馏。该算法假设神经网络中任务相关的信息是其最有价值的信息，通过增加分类器执行任务，提取出网络中间层中与任务最相关的信息，并对其进行特征蒸馏。实验结果显示，在点云分类、图像分类等任务上，该算法均有显著的性能提升，并远超同类算法。

该成果研究论文：Linfeng Zhang, Yukang Shi, Zuoqiang Shi, Kaisheng Ma, Chenglong Bao. "Task-Oriented Feature Distillation", NeurIPS2020.



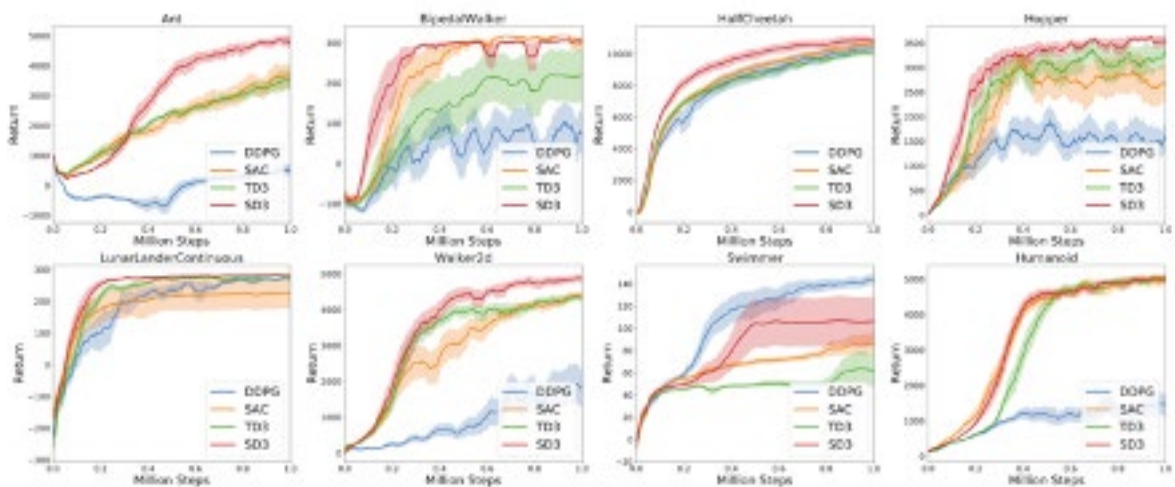
四、强化学习

主要完成人：黄隆波研究组（黄隆波、潘玲等）、张崇洁研究组（张崇洁、朱广翔、张明昊等）

Softmax 深度双确定性策略梯度

Deep Deterministic Policy Gradients 算法是一种在连续控制领域广泛使用的 actor-critic 强化学习方法。然而，其过高的值估计问题可能会对性能产生影响。Twin Delayed Deep Deterministic Policy Gradients (TD3) 算法可以有效缓解过高的值估计问题，然而，它可能在值估计问题上造成较大的低谷误差。黄隆波研究组提出在连续控制问题中使用 softmax 算子进行值函数估计。该研究组首先从理论上分析 softmax 算子的性质，然后，揭示了 softmax 算子在 actor-critic 算法中一个重要的性质——有助于平滑优化过程，对算子的作用提供了新的理解。此项研究基于 softmax 算子设计了两个新算法，Softmax Deep Deterministic Policy Gradients (SD2) 和 Softmax Deep Double Deterministic Policy Gradients (SD3)，分别将其建立在单个和两个值估计器上，可以有效改善过高和过低的值估计误差。实验结果表明 SD3 在具有挑战性的连续控制任务上取得了 state-of-the-art 的效果。

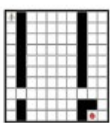
该研究成果论文：Ling Pan, Qingpeng Cai, Longbo Huang. "Softmax Deep Double Deterministic Policy Gradients", NeurIPS 2020.



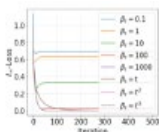
基于动态 Boltzmann Softmax 更新的强化学习

值函数估计，即预测，是强化学习中的重要任务。Boltzmann softmax 算子可以作为一种天然的值估计器，并且可以提供许多好处。但是，它不满足一个重要的理论性质——non-expansion。违背该性质可能使得即使在值迭代中也无法保证收敛性。黄隆波研究组提出动态 Boltzmann softmax (DBS) 算子来更新值函数，在规划和学习设定中具有良好的收敛性保证。在 GridWorld 上的实验结果表明 DBS 算子可以更好地估计值函数，从而解决了 softmax 算子的收敛性问题。他们基于 DBS 算子提出了 DBS-DQN 算法，该算法在 40 个 Atari 游戏（总共 49 个）中性能优于 DQN。

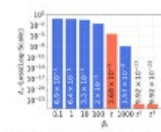
该研究成果论文：Ling Pan, Qingpeng Cai, Qi Meng, Wei Chen, Longbo Huang. "Reinforcement Learning with Dynamic Boltzmann Softmax Updates", IJCAI 2020.



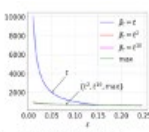
(a) GridWorld.



(b) Value loss.



(c) Value loss of the last iteration in log scale.



(d) Convergence rate.

兼顾想象与现实的基于模型强化学习算法

样本利用效率问题一直是深度强化学习的主要挑战之一。为了提高样本利用效率，近年来越来越多的研究者们开始关注基于模型的强化学习。这一类基于模型的方法，旨在通过对外界环境建立世界模型（World Model），然后在世界模型中对策略进行探索，对状态的值函数进行估计，并进行策略优化来获得世界模型中的最优策略。基于模型的策略优化，类似于人类行为中的“想象”和“规划”，可以不依赖真实世界的样本进行策略优化。

然而，现有的方法中，世界模型的学习可能会过拟合训练轨迹，因此基于世界模型的价值估计和策略搜索很容易陷入局部最优。张崇洁研究组提出了一种全新的基于模型的强化学习算法，称为 Bridging Reality and Dream (BIRD)。它最大化了世界模型中生成的虚拟轨迹和真实世界的采样轨迹之间的互信息，使得在世界模型中的策略优化过程也会考虑到与真实世界的差异性及各种可能路径的置信度，因此从虚拟轨迹中学习到的策略提升可以很容易地推广到真实轨迹上。实验证明，该研究组的方法显著提高了基于模型规划算法的样本利用效率。在以视觉图像为输入的机器人控制任务公开数据集上，该研究组的方法超越了谷歌的最新方法 Dreamer，取得了该领域中的最高的性能。

该成果研究论文：Guangxiang Zhu, Minghao Zhang, Honglak Lee and Chongjie Zhang. "Bridging Imagination and Reality for Model-Based Deep Reinforcement Learning", NeurIPS 2020.

五、网络科学

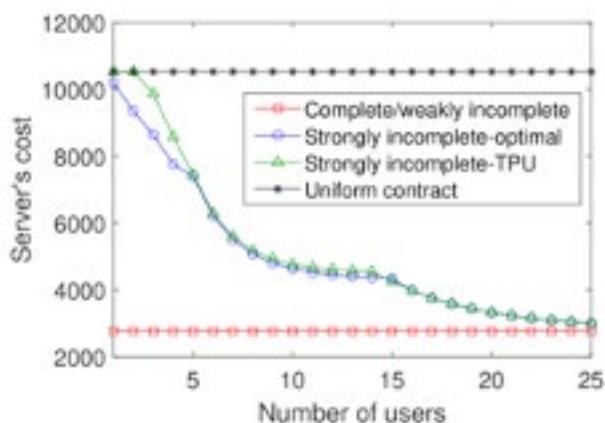
主要完成人：房智轩研究组

联邦学习中的最优激励合约设计

在联邦学习的实施过程中，由于用户需要在训练过程中共享数据、算力与带宽，如何激励用户贡献数据并参与训练是一个核心问题。同时，服务器还可以通过选择性地激励合适的用户参与，从而提高训练效率、降低训练成本。但是，如果服务器不知道用户的多维度隐私信息（如通信延迟和训练成本），便较难对用户进行精准的任务下发和奖励。

在本工作中，房智轩研究组建模刻画了用户的二维隐私信息（数据使用成本和通信时间），并针对服务器对隐私信息的了解程度，考虑了三种信息不对称场景：完全信息、弱不完全信息、强不完全信息。该研究组也依次考虑了用户数据独立同分布与非独立同分布的情况。研究人员设计了一系列可供用户自由选择的训练与奖励合约，并证明这些合约能保证激励相容性而且实现最优的平台收益（包括模型精度损失和用户报酬）。实验表明，对比其他联邦学习激励机制，此项研究提出的激励机制能大幅降低服务器成本，使联邦学习技术能在现实生活应用中更有效地发挥优势。

该成果研究论文 Ningning Ding, Zhixuan Fang and Jianwei Huang, "Optimal Contract Design for Efficient Federated Learning With Multi-Dimensional Private Information", JSAC 2021.



六、机器人

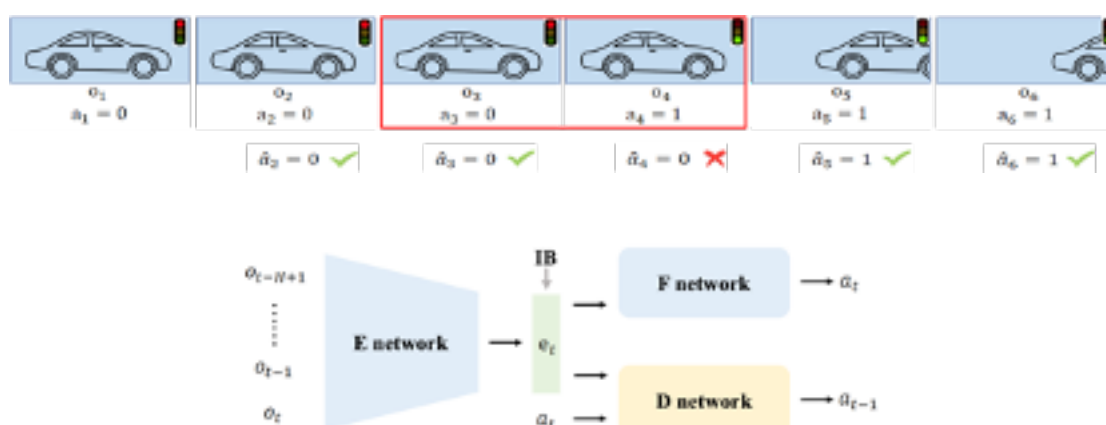
主要完成人：高阳研究组（高阳、汶川等）

发现并解决模仿学习中的 copycat 现象

模仿学习是策略学习领域中的一项重要的技术,它通过学习从观察值到专家动作的映射来进行决策。在这种情况下,分布偏差经常会加剧将专家动作错误地归因于观测变量中的混杂因素的影响。近年来,随着自动驾驶、机器人控制等领域的发展,模仿学习由于分布偏差问题而导致的性能瓶颈越来越受到研究者的关注。

高阳研究组首次发现并定义了模仿学习中存在的 copycat 现象,指出这个现象是导致部分可观察马尔科夫决策过程分布偏差问题的重要原因之一:当专家的动作随着时间的推移具有很强的相关性时,模仿者往往会通过复制专家的前一个动作来进行作弊而不是学习预测下一个动作。更进一步,为了解决这个问题,该研究组提出了一种基于对抗生成网络的方法来学习一种表征,这种表征可以去除前一个专家动作所带来的混杂因素,同时保留预测下一个动作所需的信息。该研究组通过在机器人控制领域的实验中验证该方法在部分可观察的模仿学习任务中显著提高了性能。

该成果研究论文: Chuan Wen, Jierui Lin, Trevor Darrell, Dinesh Jayaraman, Yang Gao. "Fighting Copycat Agents in Behavioral Cloning from Observation Histories", NeurIPS 2020.



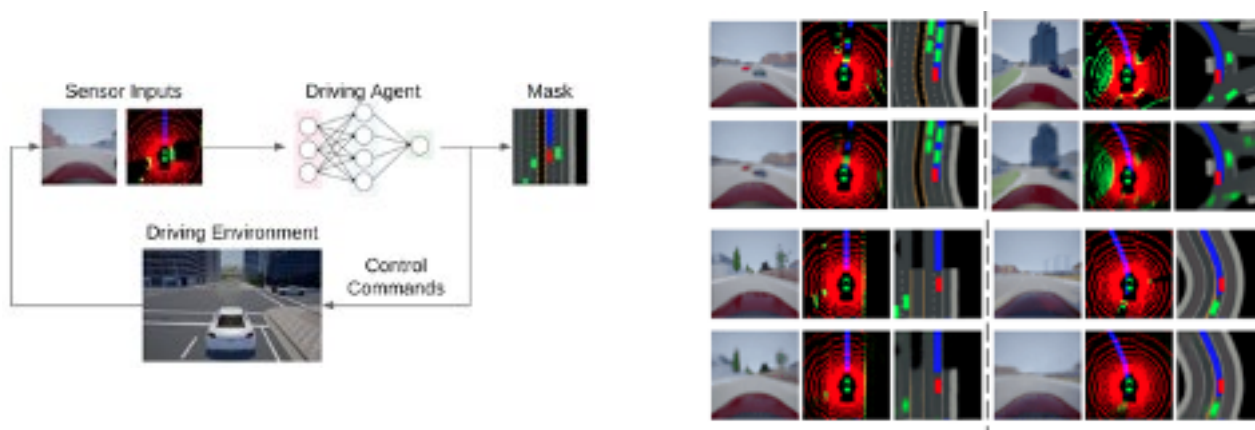
七、自动驾驶

主要完成人：陈建宇研究组

基于隐变量深度强化学习的可解释端到端自动驾驶

不同于传统的模块化方案，端到端的自动驾驶方案试图同时解决感知、决策和控制等问题，并使其更容易适应新的场景以及进行规模化拓展。其中强化学习方案由于其强大的自适应与自进化能力而备受关注。然而，目前基于深度强化学习的端到端自动驾驶方案由于神经网络的黑箱特性而普遍缺乏可解释性。针对这一难题，陈建宇研究组提出了一种基于隐变量深度强化学习的可解释端到端自动驾驶方案。该方法在强化学习过程中引入了一种序贯隐变量环境模型，并与驾驶策略进行联合学习。通过该模型，一些关键的语义信息能够被成功地提取出来。这些信息能够解释当前的驾驶环境以及驾驶行为，并与模块化方案所得到的中间量相吻合。该研究组在高精度自动驾驶仿真平台上对此方法的有效性进行了验证，实验结果表明，所提方案能够从学得深度神经网络模型中提取出可解释的驾驶环境与行为信息，同时学习效果优于已有方法，为研发可解释的自学习端到端自动驾驶系统提供了新思路。

该成果研究论文：Jianyu Chen, Shengbo Li, and Masayoshi Tomizuka. "Interpretable End-to-end Urban Autonomous Driving with Latent Deep Reinforcement Learning", IEEE Transactions on intelligent Transportation Systems, to appear.



八、自然语言处理

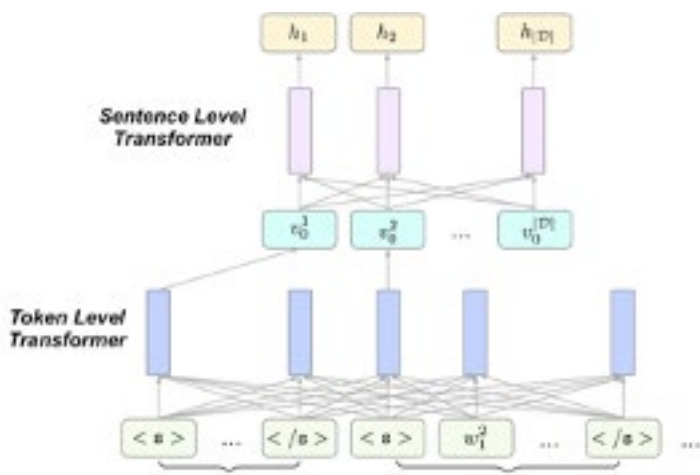
主要完成人：吴翼研究组（吴翼、徐树声、张星星等）

利用分层 Transformer 模型的注意力 (attention) 机制进行非监督性抽取式摘要

自然语言处理中的一个重要的任务，该任务的主要目标就是提炼一篇长文档的主要内容，将其改写成一篇概括性的摘要，按照改写的方式，通常将摘要分为抽取式摘要和生成式摘要两种，本文主要关注的是抽取式摘要，即从原文中抽取几个最为重要的句子概括整个文章的主要内容。以往的文本摘要通常需要监督性的训练方式，即为了让模型学会如何写摘要，首先需要大量的人工写的摘要作为训练样本，在信息爆炸的今天，这样的方式是费时费力的，而本文中研究的主要就是非监督性训练方式，非监督性的方式不需要人工写的摘要作为训练样本，大大降低了训练数据上的成本，缓解了不同数据集之间模型难以迁移的问题。

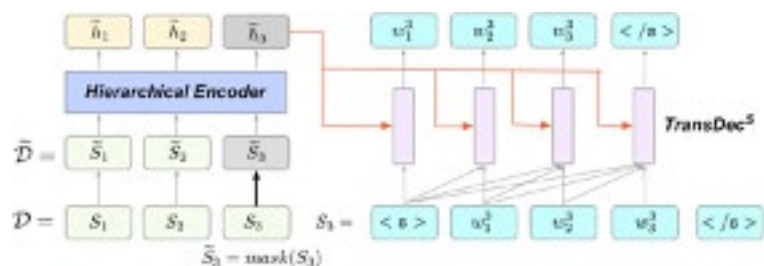
在没有监督信息的情况下，抽取式摘要问题通常被表示成对一个文章中的句子的排序问题，在以前的工作中，通常是利用模型学习文章中句子的向量表征，利用这些句子表征和一些人为拟定的规则构造一个以句子为结点的图，这些规则有时候也会导致选取结果在一定程度上很依赖句子在文章中的位置。

本文利用 Transformer 中注意力机制对句子进行排序。相比出传统的 Transformer 结构，为了学习句子层面的 attention 系数，他们采用了分层的结构。



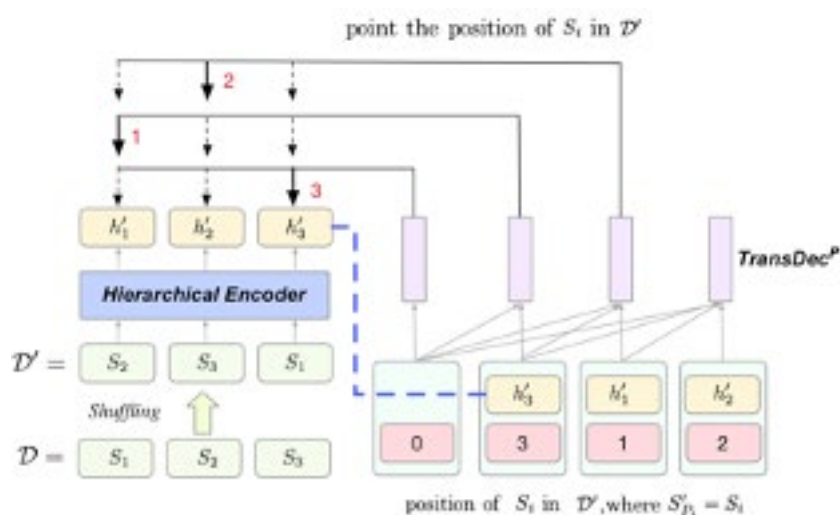
Encoder 的分层结构

为了训练模型，该研究组采用了两种预训练方法，Masked Sentences Prediction (MSP) 将文章中的某些句子掩盖住，然后利用上下文恢复出被掩盖的句子。



MSP 示意图

另一方面，为了减弱模型对于句子位置的依赖，吴翼研究组提出了另一种预训练方式 Sentence Shuffling (SS)。SS 将文章中的句子打乱，然后依次找出原文中的句子打乱后所在的位置。



SS 示意图，经过打乱后原文中的第 1 句话到了第 3 个位置，模型的第 1 个预测结果应该是 3，同理，第 2 个预测结果应该是 1。

经过以上两种预训练，在对句子排序时，该研究组将文章中的句子逐个掩盖，然后利用其他句子恢复被掩盖的句子（过程类似于 MSP）。利用恢复情况对当前被掩盖的句子评分，同时用注意力系数评价其他句子在恢复当前句子的贡献。利用这两个原则对句子进行排序，得分最高的三个句子被选作摘要。

经过实验验证，这种方法在 CNN/DM 数据集设 NYT 数据集上都取得了非常不错的效果。并且和之前的一些方法相比，这种方法在抽取句子时作为摘要时能够更少地依赖于句子在原文中的位置。

该成果研究论文：Shusheng Xu, Xingxing Zhang, Yi Wu, Furu Wei, Ming Zhou. "Unsupervised Extractive Summarization by Pre-training Hierarchical Transformers", Proceedings of the 2020 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing: Findings. 2020.

九、区块链系统

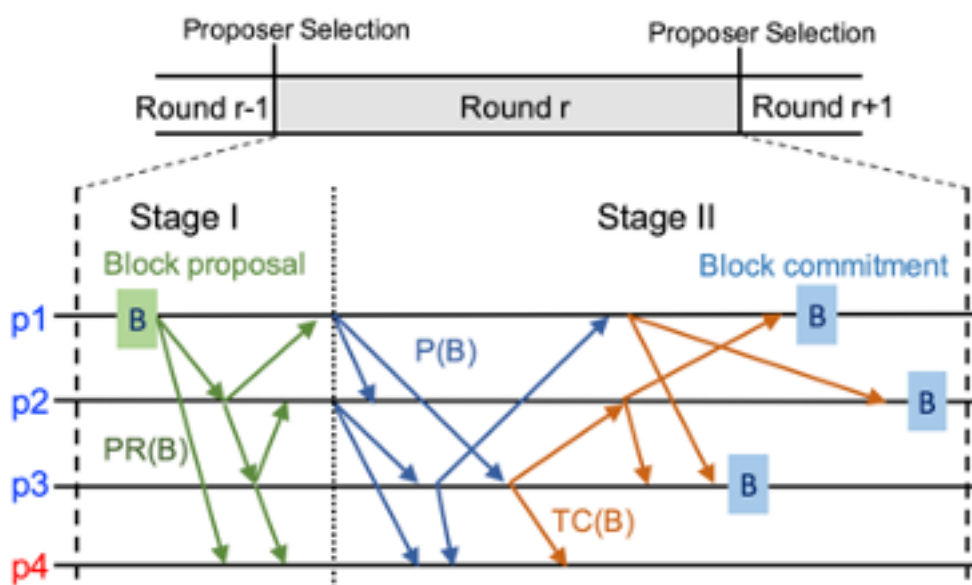
主要完成人：徐葳研究组（徐葳、李沛伦等）、周冬研究组（周冬、姜晨耀、周铭洵等）

高性能联盟链协议 GoSig

性能问题是阻碍区块链大规模应用的最大障碍。徐葳研究组针对联盟链和公链两种场景，极大提升了区块链的性能。

拜占庭容错 (BFT) 共识协议是联盟链的基础。然而传统的拜占庭容错协议在安全性、可扩展性、吞吐量以及确认延迟等多方面面临着很大的挑战。徐葳研究组提出了一个全新的用于联盟链的拜占庭容错算法 Gosig。Gosig 通过非公开地选取区块提出者和使用多轮投票，能够在被攻击者完全控制的异步网络中保证安全性。该研究组通过对共识算法与底层的流言传播 (gossip) 网络的联合设计来优化了性能。具体来说，此项研究将数据传输流水线化来充分利用网络带宽，同时使用可聚合签名的谣言传播来减少传输的数据量。这些优化方法大幅提升了联盟链的性能。基于公有云搭建的横跨多个数据中心的测试平台上，团队使用了处在 5 大洲上 14 个城市里的共 280 个节点进行了性能测试，Gosig 达到了每秒超过 15,000 笔交易的吞吐量，同时对应的确认延迟是 15.8 秒。当系统规模扩大到 5,000 个节点时，Gosig 仍然能够达到每秒 3,000 笔交易的吞吐量和 23.9 秒的确认延迟。

该成果研究论文：Peilun Li, Guosai Wang, Xiaoqi Chen, Fan Long and Wei Xu. "Gosig: A Scalable and High-Performance Byzantine Consensus System for Consortium Blockchains on Wide Area Network", SOCC 2020.



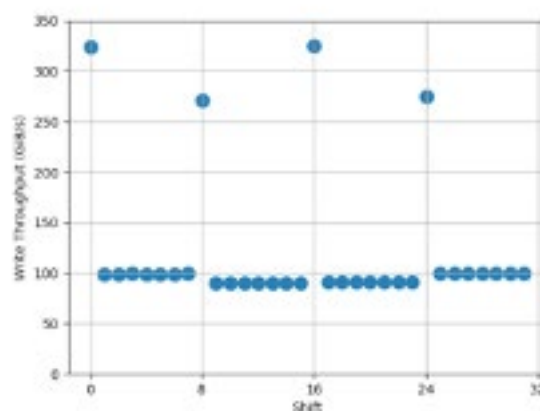
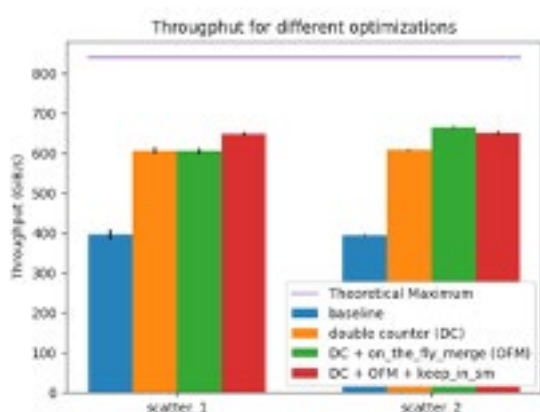
利用 GPU 加速数据库系统 Join 操作性能

Join 操作是关系型数据库中重要的一个概念。其可以将两个数据库表，根据一定的关系（例如用户名、ID）组合成一张表。Join 在分析型数据库（OLAP）中尤其重要。OLAP 系统主要用于数据处理分析，例如推荐系统。常见的分析型任务中几乎都涉及到 Join 操作，并且占用了大部分的运行时间。

图形处理器（GPU）近年来由于通用的编程平台 CUDA 普及，已经在各大数据中心广泛使用。GPU 内部有更多但更弱的核心，适用于大规模的并行任务。而最新的 GPU 如 V100 采用的 HBM2 内存，读取速度可高达 900 GB/s。GPU 的内存空间也不断增大，呈现出每一代比上一代 GPU 的内存大出两倍的趋势。许多现有工作研究了数据库构建在 GPU 上的可行性方案。

为了将数据库运行在 GPU 上，周冬研究组需要将数据库需要的操作符移植到 GPU 上。由于 Join 涉及到不规律的内存访问，前人工作一直未能充分利用全部的内存宽带。该研究组通过实验测得 GPU 内存的性能特性，设计出来了两个核心技巧：Double Counter 和 On-the-fly Merge。Double Counter 使得内存尽量对齐。On-the-fly Merge 利用一些预处理，使得在数据分布有倾向时（skew）不损失性能，也使得 Bits per pass 这一重要参数不需要人为调整就自动得到最优性能，可以期待将数据库完整运行在 GPU 之上。

该工作计划投稿至 VLDB 或 SIGMOD。



新一代高性能区块链传播网络优化

区块链技术是为了解决大规模去中心化共识问题，作为虚拟货币的底层技术而诞生的。近年来，区块链技术以其独特的去中心化、安全、不可篡改等特点，作为新一代的分布式系统技术逐渐走进了学术界和工业界的视野之中。从比特币、莱特币等虚拟货币，再到作为去中心化共识计算的以太坊系统，区块链以迭代式的姿态快速往前发展。然而由于算法技术的受限，上述的技术仅能取得每秒钟 6-20 笔交易的性能，并不能满足一个实用、高效、满足大规模可用性的公共区块链平台的需求。以 Conflux 为代表的新一代区块链系统在共识算法上做出了突破性的创新，将理论性能推至每秒 6400 笔交易。而在理论算法之外，高性能的区块链又带来了许多系统设计方面的新问题。其中网络层的传播速度、带宽使用问题作为重要的瓶颈问题，在部署实际系统中有重要的意义。

作为对高性能区块链系统网络结构的一次新的探索，周冬研究组在分析了其实际运行的特点数据后，提出了使用 Virtual Network Coordinate 方法，使得网络中的每个结点在去中心化的条件下，能够不依赖信标节点而对网络结构进行探测和学习。更进一步，该研究组提出了根据网络结构来对网络分层，优化选择邻居结点的启发式算法。在模拟条件下，该算法以极小的带宽代价，大幅度的优化了网络的传播速度。而在网络遭到一定程度攻击的情况下，该算法取得了比其它网络架构更加稳定的表现。该研究组目前正在致力于在真实环境部署该算法并取得真实的性能提升。

量子信息



一、拓扑凝聚态物理

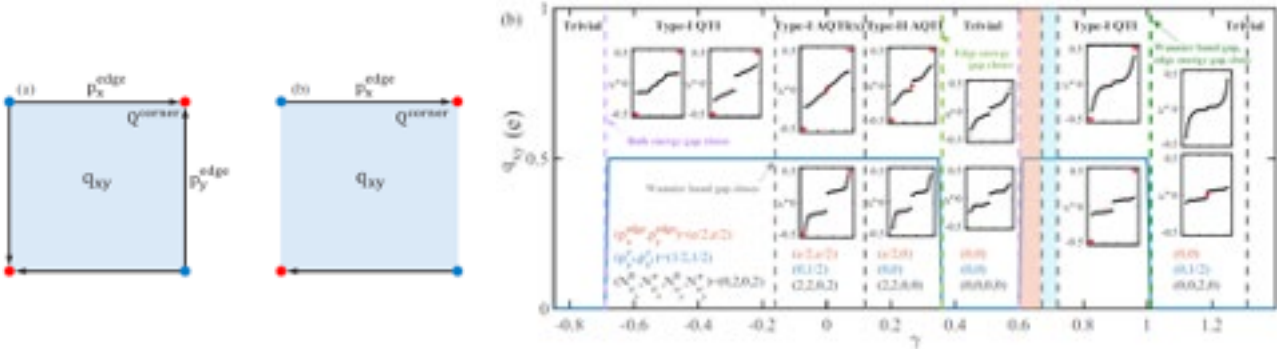
主要完成人：段路明、徐勇研究组（段路明、徐勇、曾琦波、杨炎彬、陶禹良、戴凝等）

首次发现第二类四极矩拓扑绝缘体

在拓扑能带理论中，固体中的极化可以用动量空间能带的 Berry 相位来描述。近年来，人们开始研究具有多极矩的拓扑绝缘体，比如具有四极矩或八极矩的拓扑绝缘体。对于一个二维的四极矩拓扑绝缘体，系统具有量子化的四极矩、局域在边界的极化、以及角上的分数电荷。之前研究发现，四极矩拓扑绝缘体中的四极矩、边界极化、角电荷满足一个经典电磁学的约束关系。对于量子系统而言，这一关系的成立是由于系统边界能谱和 Wannier 能谱同时闭合或打开能隙导致的。之前研究过的四极矩拓扑绝缘体模型均满足上述条件，因此满足四极矩、边界极化和角电荷之间的经典约束关系。

段路明、徐勇研究组通过构造一系列满足镜面反射对称性的四极矩拓扑绝缘体模型，说明了系统边界能谱与 Wannier 能谱有可能不在同时闭合能隙，导致四极矩拓扑绝缘体具有量子化的四极矩和角电荷，但只有一个方向的边界极化，从而违反了之前研究建立的约束关系。这种新一类的四极矩拓扑绝缘体被称为第二类四极矩拓扑绝缘体。他们还引入了一个新的拓扑不变量来准确刻画系统的边界极化。此外，研究组发现这种新一类四极矩拓扑绝缘相可以在传统的四极矩拓扑绝缘体模型的淬火动力学演化过程中产生。最后，提出了可以在电路系统中实验实现并探测这种新的拓扑相。这一发现为进一步研究具有多极矩的拓扑物态打开了一个新的方向。

该成果研究论文：Yan-Bin Yang, Kai Li, L.-M. Duan, and Yong Xu. "Type-II quadrupole topological insulators", Physical Review Research 2020.

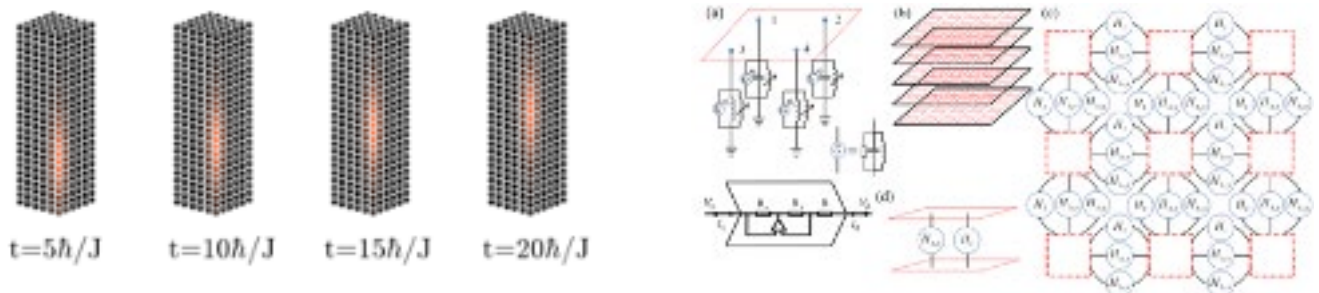


二阶三维拓扑绝缘体中的链式孤子

孤子是非线性体系中可以在传播过程中不改变形状的孤立波包，在信息传递中有着广泛应用。孤子波包形状的稳定来自于色散和非线性的平衡作用，这种平衡性在一维系统中容易实现，而非线性薛定谔方程中普遍存在的局域三次方非线性项会在二维和三维体系中引起波包崩塌，因此在高维系统中得到稳定孤子是一个具有挑战性的课题。一种可行方案是以非平庸拓扑绝缘体的低维局域边界态为载体来寻找孤子，其中有关二维非平庸拓扑绝缘体的一维边界态孤子已经有了广泛的研究。

徐勇研究组首次在理论上证实了在二阶三维拓扑绝缘体中引入非线性项后存在稳定的链式孤子，通过系统的数值运算，该研究组发现此孤子在坐标空间中有着非常强的局域特性，整个波包沿着边界棱单向匀速运动并且没有发生形变。此外，徐勇研究组展示了强二阶三维拓扑绝缘体中的孤子稳定性要优于弱体系中的孤子。在此基础上，提出了模拟二阶三维拓扑绝缘体的电路方案，其中非线性项由电压数控电感实现，通过对电路的动力学数值模拟，能够观察到孤子在电路中稳定存在。

该成果研究论文：Yu-Liang Tao, Ning Dai, Yan-Bin Yang, Qi-Bo Zeng, and Yong Xu. "Hinge solitons in three-dimensional second-order topological insulators", New Journal of Physics 2020.

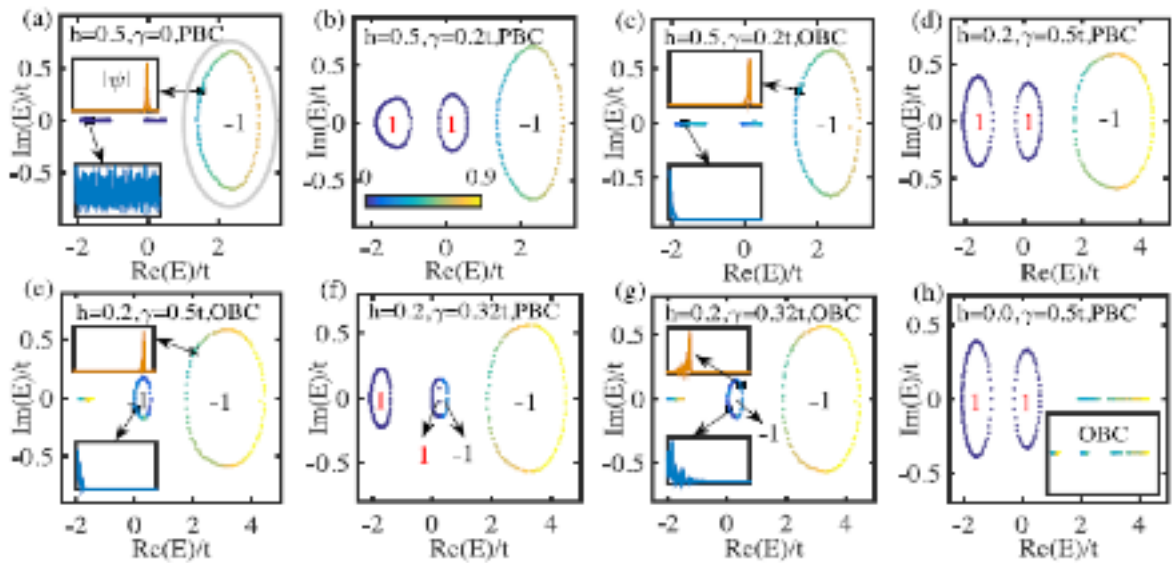


非厄米系统中的绕数和拓扑迁移率边

近年来，非厄米拓扑系统受到了研究人员的广泛关注。与厄米系统不同，非厄米系统通常用来描述与环境有能量或者物质交换的开放系统。通过在厄米系统中引入物理增益和损耗，人们可以研究系统性质在受到环境影响时会发生哪些变化。对拓扑系统的研究表明，非厄米因素的引入能够导致很多在厄米系统中不存在的新奇现象和拓扑态，比如 Weyl 奇异值环（Weyl exceptional ring）以及非厄米趋肤效应（non-Hermitian skin effect）等。

Aubry-André-Harper 模型在安德森局域中扮演着重要的角色，该模型的安德森相变点可由 self-duality 解析得到。徐勇研究组在扩展非厄米 Aubry-André-Harper 模型中首次发现 self-dual 对称性的存在，并由此解析得到安德森相变点。与厄米系统不同，该相变点具有拓扑性质，由两种绕数刻画。另外，该研究组发现拓扑迁移率边的存在：局域态具有非零绕数，而扩展态的绕数为零。最后，提出可以在电路系统中实验实现并探测拓扑迁移率边。

该成果研究论文：Qi-Bo Zeng and Yong Xu. "Winding numbers and generalized mobility edges in non-Hermitian systems", Physical Review Research 2020.



二、超导量子计算

主要完成人：段路明、孙麓岩、宋祎璞研究组（段路明、孙麓岩、宋祎璞、蔡天奇、韩玺月、马雨玮、潘啸轩、李薛刚等）

可调耦合超导电路中参量交换门的误差分析和误差抑制

在超导量子系统中，为了避免比特之间寄生的静态 ZZ 相互作用干扰，构建耦合强度可调的耦合器是实现完全可控的超导量子芯片的重要途径。基于这种可控耦合的超导量子芯片，该研究组在实验上实现了双比特参量交换门 (iSWAP gate)。参量交换门既可以避免调节计算量子比特的频率，进而减少不必要的退相干过程，也可以通过改变泵浦微波功率来调节门操作的速度。通过调节耦合器辅助量子比特的频率，该研究组可以方便地控制参量交换门的门操作速度和保真度。通过误差理论分析，研究组首次定量提取了参量交换门中的动态 ZZ 相互作用和高频振荡项，并且研究了动态 ZZ 项、高频振荡项以及退相干分别对门操作保真度的影响。如图 1 所示，误差分析结果和实验数据基本一致。

段路明、宋祎璞研究组，利用超导量子比特作为可调耦合器，实现了一种基于可控耦合的参量交换门 (iSWAP gate)。根据误差理论，对该门操作中间过程中的动态 ZZ 耦合项和高频振荡项误差首次进行了数值提取和分析，定量地研究了这些误差对于门操作保真度的影响。

该成果研究论文：XY Han, TQ Cai, XG Li, YK Wu, LM Duan. “Error analysis in suppression of unwanted qubit interactions for a parametric gate in a tunable superconducting circuit”, Physical Review 2020.

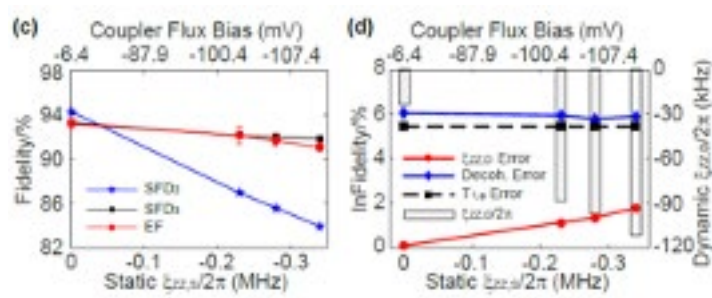


图 1：基于误差理论的误差分析

超导电路中复杂混合纠缠的操纵和多体贝尔不等式的测试

多体系统中可观测量的量子关联不仅吸引着基础研究的兴趣——例如对经典局域实在论的否定，而且是许多量子信息处理应用中的关键资源，例如级联量子纠错、量子模拟和量子极限高精度测量等。另一方面，贝尔不等式违背的实验测量不仅为基础物理研究提供例证，而且是能对量子系统进行精确调控与表征的重要体现。本实验首次展示了在同时包含连续和离散变量的多体混合纠缠系统中的贝尔不等式违背。

基于一系列可扩展的量子门操作，本实验确定性地制备了包含五个量子二能级系统的 GHZ 纠缠态。基于这个量子态测得的贝尔信号达到 8.381，以 10 个标准偏差超过了针对四体纠缠的上限 8，展示了该混合量子系统中真正的五体纠缠。

实验所用混合系统 [图 1 (a)] 由三个超导量子比特及其对应的独立高速读取腔和两个高寿命同轴腔构成。超导比特和同轴腔的耦合具有间隔的链式排布。如图 1 (c) 所示，五体纠缠态的制备需要以下两种纠缠门操作。由于超导比特和同轴腔间的强色散耦合，不同的光子数态对应了不同的超导比特频率，可以用和同轴腔中光子数相关的微波驱动频率实现选择性比特驱动。上述强色散耦合的效果也可以看作不同的超导比特激发状态对应不同的同轴腔

模式频率，因此可以用等待不同时间实现不同的超导比特控制的条件相位门。本实验通过改变选择性比特驱动的相位制备了具有不同相位的五体 GHZ 纠缠态，如图 1 (b) 所示，其中连续变量光场的二能级系统由猫态编码定义而离散变量二能级系统由超导比特的本征能级定义。光场态的二能级算符由偏移的宇称算符定义，因此量子关联表征过程涉及对超导比特的投影测量和对同轴腔中光场态的宇称测量。本实验通过先对超导比特进行投影测量，再用超导比特对光场宇称进行读取的方式实现了对五体纠缠系统每个元素的独立测量。

五体纠缠态的贝尔信号由 16 个五体关联 Pauli 算符定义。图 2 (a) 展示了贝尔信号测量值（红色点）和基于系统实际哈密顿量的有限元数值仿真结果（蓝色实线）随 GHZ 态相位的变化。在 GHZ 态相位 $\theta=\pi$ 处，实验测得的贝尔信号达到最大值 8.381。其中每个五体关联算符的测量值（蓝色条带）和相应的数值仿真结果（灰色条带）在图 2 (b) 中显示。实验中的测量误差和比特退相干是导致贝尔信号对比度低于仿真值的原因。

该成果研究论文：Y. Ma, X. Pan, W. Cai, X. Mu, Y. Xu, L. Hu, W. Wang, H. Wang, Y.P. Song, Zhen-Biao Yang, Shi-Biao Zheng, and L. Sun. "Manipulating Complex Hybrid Entanglement and Testing Multipartite Bell Inequalities in a Superconducting Circuit", Physical Review Letters 2020.

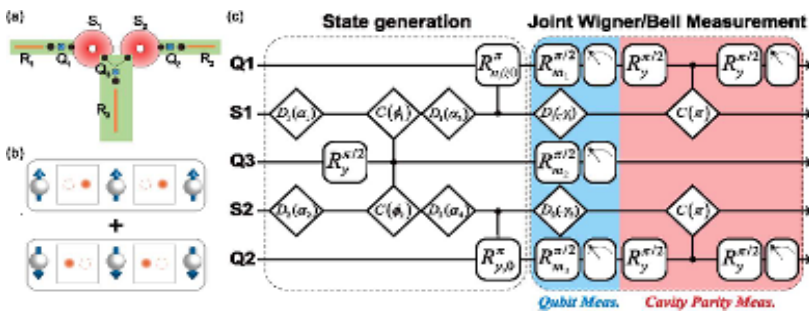


图 1：实验样品示意图以及制备和表征五体混合纠缠的量子线路操作序列。

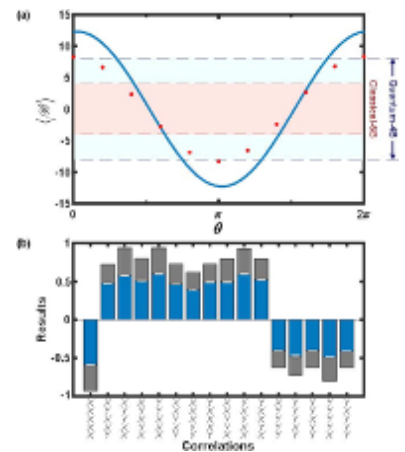


图 2：贝尔信号随 GHZ 态相位的变化以及贝尔信号最大值 ($\theta=\pi$) 处每个关联算符的测量值。

在超导电路中实现动态解耦受控相位门的可调耦合器

超导量子比特基于良好的相干性、操控性以及出色的可扩展性,是目前实现通用量子计算最有力的竞争者之一。然而在扩展到多量子比特过程中,比特之间耦合的可控性对实现高保真度的量子计算和量子模拟有很大的影响。如果不能可控地关闭多量子比特之间的耦合,就会诱发寄生耦合。这种寄生耦合会使得其中一个比特的频率依赖于另外一个比特的状态,从而降低单比特门的保真度。而且,这也产生不必要的纠缠相位,从而对基于门操作的量子计算和量子模拟带来非常大的干扰。

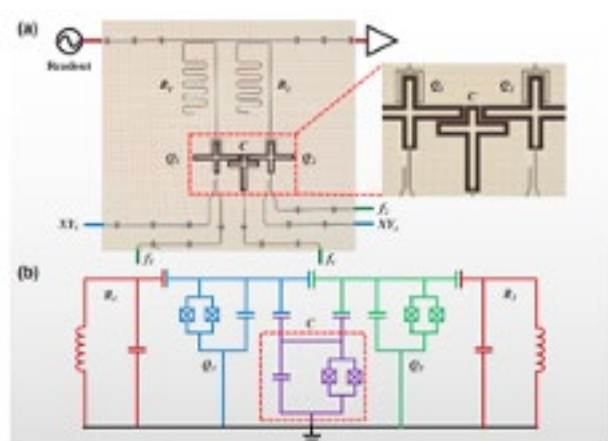


图 1: 样品图和对应的电路图

实验样品 [图 1 (a)] 有三个超导量子比特,中间的超导量子比特作为可调耦合器,相对应的电路图如 [图 1 (b)] 所示。该耦合器在两个超导量子比特间诱发间接相互作用,而这种间接相互作用依赖于耦合器的频率。当把耦合器的频率设计得比两个量子比特频率高,就可以得到一个负的耦合。这种负耦合与两个量子比特正的直接耦合相互竞争,可以将耦合从负值连续调到正值,进而可以实现一个完全为 0 的两比特耦合。

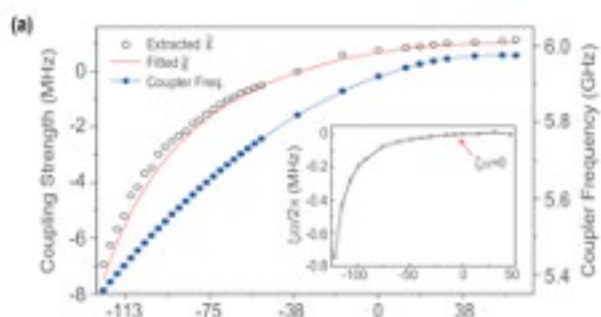


图 2: 耦合强度的可调性能

通过调节耦合器的频率可以看到,图 2 中两量子比特之间的耦合强度确实可以从 -7 MHz 连续调到 1 MHz。实验值和理论值符合得很好。其中寄生耦合也可以从 -0.75 MHz 连续调到 0.02 MHz。所以总可以找到一个耦合器频率点使得寄生耦合完全为 0,从而提高单比特门的保真度。

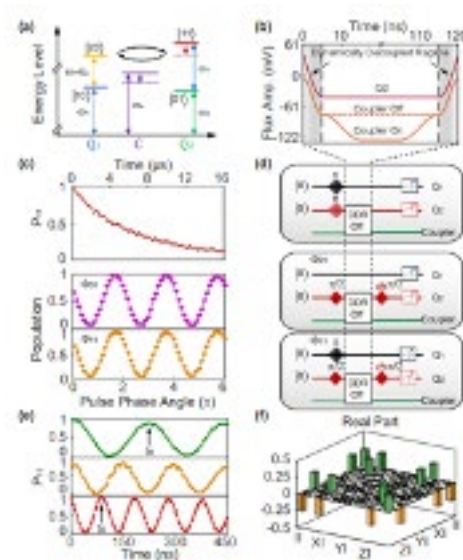


图 3: 用动态解耦的方式实现可控相位 (CZ) 门

基于此耦合器的额外自由度,本实验提出了新的受控相位 (CZ) 门。新 CZ 门的过程分为两步 (图 3): 首先在调节 $|11\rangle$ 和 $|20\rangle$ 能级共振的过程中一直保持两个比特的耦合关闭,然后保持 $|11\rangle$ 和 $|20\rangle$ 能级共振,同时打开耦合积累一个几何的 π 相位;最后以同样的方法回归原位。这种 CZ 门的优点在于既能抑制能量泄露,又可以得到一个纯几何的相位,具有潜在意义上更抗噪的性质。实验利用 quantum process tomography 的方法测得 CZ 门的平均保真度为 98.3%,主要受限于量子比特的退相干。

该成果研究论文: X. Li, T. Cai, H. Yan, Z. Wang, X. Pan, Y. Ma, W. Cai, J. Han, Z. Hua, X. Han, Y. Wu, H. Zhang, H. Wang, Yipu Song, Luming Duan, and Luyan Sun. "Tunable coupler for realizing a controlled-phase gate with dynamically decoupled regime in a superconducting circuit", Physical Review Applied 2020.

三、离子阱量子计算

主要完成人：金奇免研究组（金奇免、汪野等）

二维离子晶体上实现相干操纵

二维离子晶体额外的维度可以使离子阱中囚禁离子数量平方增长。事实上，二维离子晶体在彭宁离子阱中很容易实现。彭宁离子阱使用静磁场和直流电压约束离子，可以使上百个离子形成旋转的二维离子晶体。然而，由于彭宁离子阱中的高磁场和离子的快速旋转，离子的钟态不能代表有效的自旋，使用激光单独操控自旋也极具挑战。保罗离子阱不需要强磁场约束离子，可以作为实现二维离子晶体的平台。人们已经对保罗离子阱实现二维离子晶体提出了详细的提案并开展了实验探索。保罗离子阱囚禁二维离子晶体用于实现量子计算或量子模拟的主要困难是存在与振荡电场同步的微运动，导致冷却和相关操控过程对激光引入相位调制。微运动可以在单点或者直线上被补偿，但却在平面存在。为了解决微运动问题，人们提出设计出使微运动方向与激光净传播方向正交的离子阱。这种离子阱结果相对简单方便加工，并且可以囚禁几十到上百个离子。金奇免研究组在本报告中介绍使用保罗离子阱囚禁二维离子晶体，并排除微运动的影响。

为了在二维离子晶体上实现相干操纵，金奇免研究组开发了一种一体化芯片型离子阱，并在该阱上通过隐藏微振动，成功针对二维离子晶体实现了高质量相干操作。该一体化离子阱的电极三维立体结构，该研究组首先使用激光在厚度为 380 微米的氧化铝陶瓷薄片上切割出微米精度的三维结构，随后对陶瓷薄片进行镀金，来构建电极。图 1(a) 展示了该离子阱的结构，研究组通过沿着 y 方向挤压离子，使得二维离子晶体被束缚在 z-x 平面上，从而保证所有的微振动都在晶体平面内，不会影响垂直于晶体方向的拉曼操作。

该离子阱从功能上可以分为三层，其中前后两层上的电极（后称 DC 电极）均提供直流电压；中间凸起的电极（后称 RF 电极）构成中间层，提供交流电压。DC 电极共有二十个，前后每层各提供十个，每个电极之间间距为 50 微米；RF 电极共两个，每个均由两个斜面组成，两个斜面均与陶瓷薄片成 45 度角，同时两个电极长为 4 毫米，间距 260 微米。图 1.(b) 展示了在扫描电子显微镜下的离子阱图像，并展示了在囚禁离子时我们的电极设置，DC 表示对应电极与直流电压源相接，GND 表示对应电极接地，白色标号表示正面的电极，灰色标号表示背面的电极。图 1.(c) 展示了装配该离子阱的真空系统。

该成果论文：Ye Wang, Mu Qiao, Zhengyang Cai, Kuan Zhang, Naijun Jin, Pengfei Wang, Wentao Chen, Chunyang Luan, Haiyan Wang, Yipu Song, Dahyun Yum, Kihwan Kim. "Coherently Manipulated 2D Ion Crystal in a Monolithic Paul Trap", Advanced Quantum Technologies 2020.

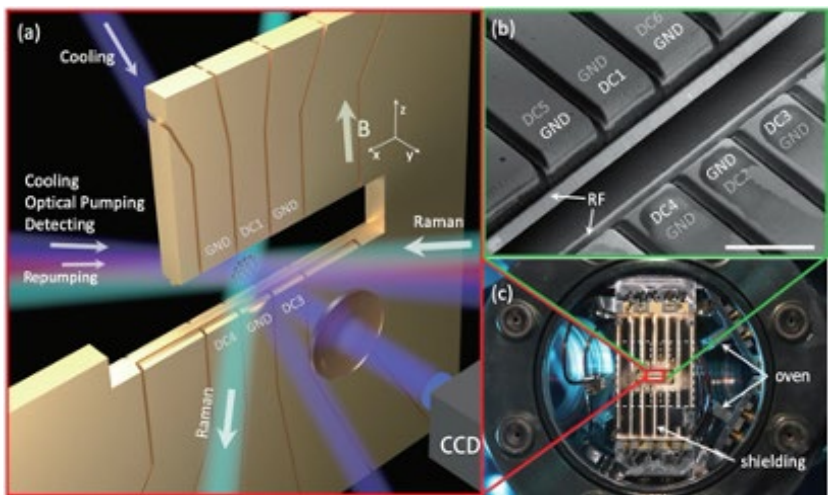


图 1 一体化芯片型离子阱结构图。(a) 为示意图，用于展示设计理念与结构，非真实比例；(b) 为扫描电子显微镜下的结构，以及各个电极的功能；(c) 为装配在真空系统中的离子阱，离子阱被固定在金属支架上，同时前后均采用金属屏蔽噪声。

四、量子密码学和纠缠探测

主要完成人：马雄峰研究组（马雄峰、周游、曾培、刘振寰、张行健、赵琦等）

基于单份量子态操作进行纠缠负性的测量

量子纠缠（Quantum Entanglement）是一种常见的量子关联，它赋予了量子力学有别于经典物理的特点，同时也是量子信息处理的潜在资源。利用量子纠缠，人们可以实现量子密钥分发，量子隐形传态，基于测量量子计算等通讯和计算任务。然而，纠缠的探测和量化一直以来是一个比较核心且富有挑战的方向。在没有任何关于量子态先验知识的情况下，人们只有通过复杂的量子层析完全重构量子态，然后对重建的态进行经典后处理从而得到纠缠度。这种间接方法需要很多实验测量和经典计算资源，并且得到的纠缠度很容易受到实验噪声和重构计算误差的影响。

为了克服这个困难，马雄峰研究组的博士生曾培，刘振寰和海华研究院的研究员周游博士合作，提出了一种探测量子纠缠负性（Entanglement Negativity）的直接方法。纠缠负性作为一种纠缠度量，有良好的操作含义，比如可以作为纠缠蒸馏效率的上界。它的定义基于对量子态的部分转置操作（Partial transpose）后矩阵的负定性。利用随机矩阵这一数学工具，该研究组提出了一种通过随机测量的得到部分转置后矩阵三阶矩的方法。该方案通过巧妙的数据后处理，不仅有效地实现了部分转置这个非物理操作，并且把原来的多份态上的全局测量转化为只需要对单份态的测量，从而更加有利于实验实现。详细的误差分析表明，此方法相比于传统的量子层析更加节省测量次数。此外，他们还将贝尔测量应用到方案中，使得框架中需要的随机幺正演化都是量子比特级别的，从而进一步降低了实验要求。

该研究成果论文：You Zhou, Pei Zeng, and Zhenhuan Liu. "Single-Copies Estimation of Entanglement Negativity", Physical Review Letter 2020.

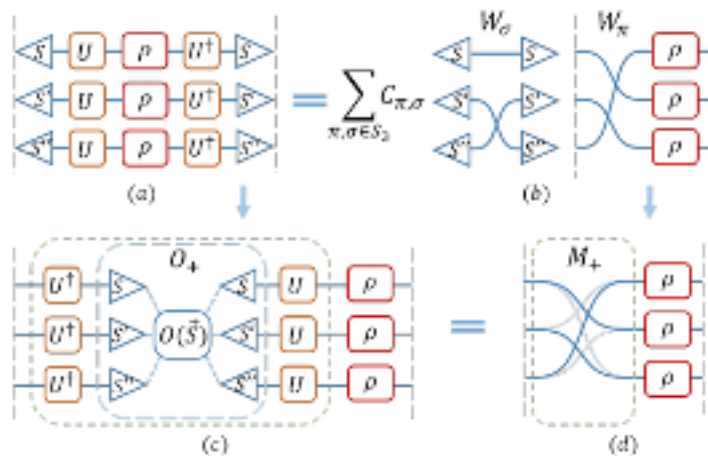


图 1 部分转置量子态三阶矩测量框架示意图。

相位匹配量子密钥协商协议

量子密钥协商可以实现多个通信者之间的密钥的共享，是两方通信的量子密钥分发协议的自然推广，是以后量子网络的重要应用之一。和量子密钥分发相似，量子密钥协商实用化目前面临的主要问题在于信道损耗。目前，量子中继器还没有实现，这使得量子信道的信号通过率随着通信长度变大而指数衰减。这极大限制了量子密钥协商协议在远距离的表现。

基于研究组在量子密钥分发的工作，马雄峰、博士生曾培与中国科技大学团队合作，提出了相位匹配量子密钥协商协议。在该协议中，每个通信者将原始密钥信息编码在相干光的相位中，并将其发送给中间的不受信任的测量装置。在理想情况下，测量装置将进行多次光学干涉，通过单光子探测获得信号之间的关联，并将其反馈给各个通信者。严格的安全性分析和数值模拟表明，该协议可以显著提升密钥协商协议的性能。对于 3 方的密钥协商协议，在通信距离大于 150 公里时，该协议的密钥产生率比原有协议高 1~2 数量级。

该成果研究论文：Shuai Zhao, Pei Zeng, Wen-Fei Cao, Xin-Yu Xu, Yi-Zheng Zhen, Xiongfeng Ma, Li Li, Nai-Le Liu, and Kai Chen. "Phase-Matching Quantum Cryptographic Conferencing", Physical Review Applied 2020.

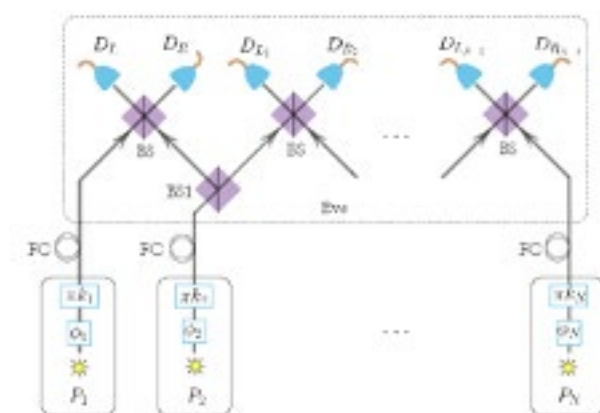


图 2 相位匹配量子密钥协商协议示意图。

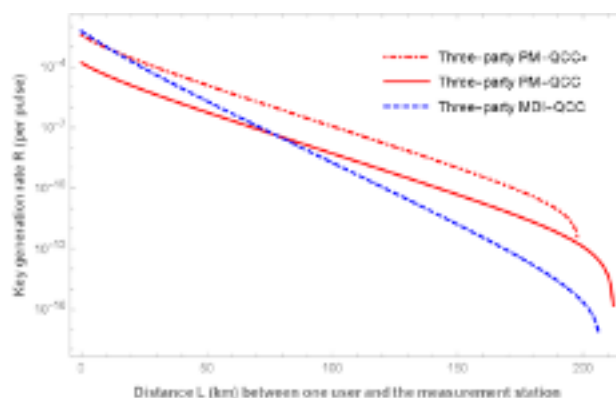


图 3 相位匹配量子密钥分发协议 (PM-QCC) 和测量设备无关量子密钥协商协议 (MDI-QCC) 性能对比。标明 * 的协议是改进版本的密钥率。

有限维半量子游戏中对纠缠态与测量的同时验证

量子系统和操作的认证是量子信息处理中的核心任务。当前许多方案需要使用被完全标定的设备进行量子层析，而这在实际实验中可能无法满足。完全设备无关量子测试可以避免对设备特征的依赖，但这在当前技术条件下有很大的难度。为了平衡量子态验证问题中的实用性和可信设备依赖性，一种思路是使用半设备无关协议，其中半量子游戏方案 (semiquantum game) 因其理论上的良好性质受到了广泛关注。

马雄峰研究组的博士生张行健和赵琦博士研究了利用使用可信量子态输入的半量子游戏同时验证纠缠态和测量。在该工作中，研究组成员提出了一类特定的有限维度半量子游戏，并证明了该方案可以对任何纯纠缠态和贝尔态测量算子同时进行验证。之后通过对量子态和测量过程进行对偶，将该半量子游戏的对偶形式解释为有限维度源无关纠缠交换协议，并说明了在该过程中，任何纠缠投影测量和共享贝尔态可以被同时验证。特别是，该结果不需要完备贝尔态测量，这对实验和实际使用具有帮助。

该成果研究论文：Xingjian Zhang and Qi Zhao. "imultaneous certification of entangled states and measurements in bounded dimensional semiquantum games", Physical Review Research 2020.

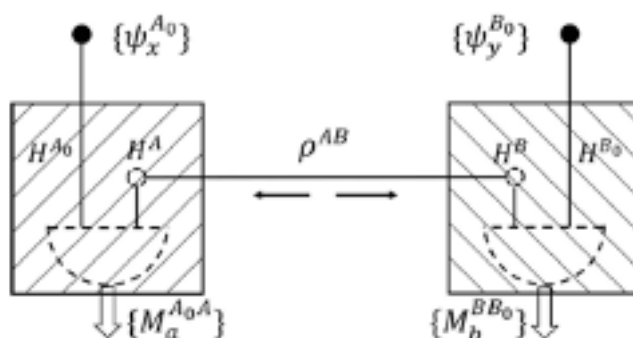


图 4 半量子游戏方案示意图。

五、量子人工智能

主要完成人：邓东灵研究组（邓东灵等）

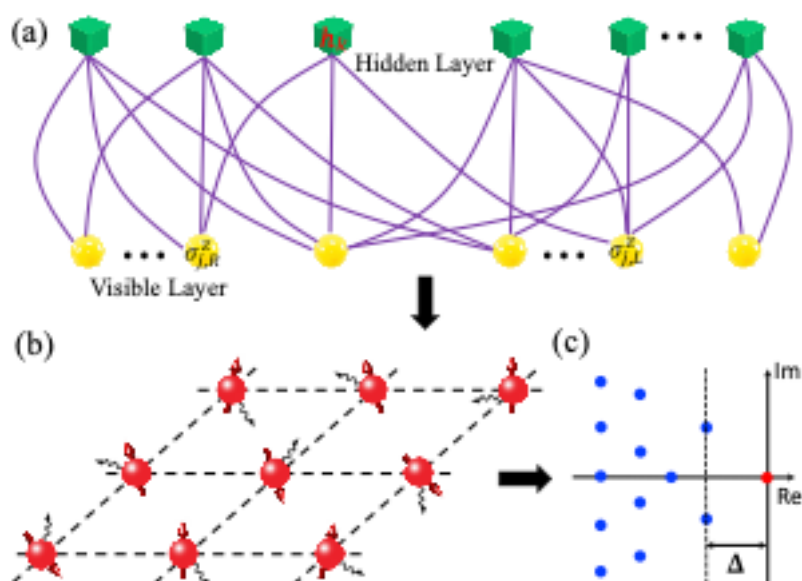
应用受限玻尔兹曼机求解刘维尔能隙

开放量子系统的研究具有重要的理论与实际意义。在马尔可夫近似下，开放量子系统的动力学行为一般由 Lindblad 主方程描述。其中一个非常重要的物理量是刘维尔能隙 (Liouvillian Gap)，它决定了系统从初始状态到非平衡稳态所需要的时间，也可以用来刻画耗散量子相变的特征。然而，应用传统方法，如 DMRG 算法，求解多体开放量子系统的刘维尔能隙非常困难，因为开放系统一般具有大纠缠熵。

最近，机器学习与量子物理的交叉研究受到了广泛关注，衍生出来一个新的研究领域，即量子机器学习。邓东灵研究组将机器学习的方法引入到求解多体开放量子系统的刘维尔能隙问题中。通过研究发现，应用受限玻尔兹曼机可以部分解决此问题，且不受系统维度，相互作用形式，以及纠缠熵大小的限制。此外，对于耗散的海森堡模型，该研究组还找到了刘维尔能隙的严格解。

该研究在机器学习与量子多体问题之间架设了新的桥梁，将对今后此方向的理论和实验研究都产生影响。

该成果研究论文：Dong Yuan, Heran Wang, Zhong Wang, and Dong-Ling Deng. "TSolving the Liouvillian Gap with Artificial Neural Networks", arXiv:2009.00019v1.



无监督学习与非厄米拓扑态的识别

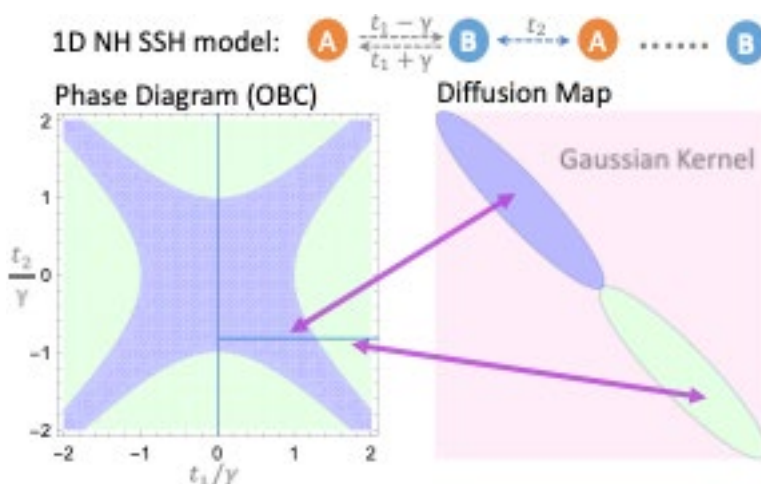
非厄米系统具有很多独特的性质，如趋肤效应 (Skin effect) 与传统“体边对应 (bulk-edge correspondence) 的破坏等。最近，对非厄米拓扑态的研究受到了广泛的关注。一部分非厄米拓扑态及其性质也得到了实验验证。然而，如何有效识别不同的非厄米拓扑态仍是一个亟待解决的重要问题。

邓东灵研究组把无监督学习的方法应用到非厄米拓扑态的识别中，通过具体的例子，演示了此方法的有效性。该研究组发现，由于非厄米系统的趋肤效应，直接推广厄米系统的无监督学习方法效果不理想。为增强此方法的有效性，该研究组需要对输入数据做一点预处理。此外，通过微扰论的方法，该研究组可以解析地分析此无监督学习方法在有趋肤效应情况下的有效性和可靠性。

该研究把无监督学习与非厄米拓扑态的研究结合起来，将对今后非厄米系统的理论和实验研究都产生影响。

该成果研究论文：Li-Wei Yu, and Dong-Ling Deng. "Unsupervised Learning of Non-Hermitian Topological Phases",

arXiv:2010.14516v1.



六、量子纠缠

主要完成人：魏朝晖研究组（魏朝晖、林小蝶、林漓尽致等）

经典关联的量子 - 经典混合采样方案

经典关联的采样是研究量子方案相对经典方案在信息处理中优势的一个理想模型。已有研究表明，此问题的量子成本由 PSD rank 精确刻画，而相应的经典成本则由 nonnegative rank 精确刻画。因此，比较这两个 rank 就可以完美展现此问题上的巨大量子优势。

但是，由于量子硬件的尚不完善，目前量子计算平台的规模比较有限，研究中等规模量子计算平台的表现就成为重要课题。为此，魏朝晖研究组考虑如下问题：如果现有量子平台的尺寸不足以对一个目标经典关联进行采样，该研究组可否设计量子 - 混合方案来最大程度地发掘现有量子资源的潜力？如果可以，最优方案所涉及到的经典资源是多少？

该研究组通过定义一个称为分块 PSD rank 的概念，精确描述了最优混合采样方案的特征，回答了上述两个问题。特别是通过严格证明，展示了下面的例子：存在一个经典关联，大小为 k 个量子比特的纯量子平台可以实现采样，但如果尺寸将为 $k-1$ ，则需要大量的经典资源来补偿。因此，该研究组的结果提供了一个展示此问题上量子优势的新角度。

该 成 果 研 究 论 文：Xiaodie Lin, Zhaohui Wei, and Penghui Yao. "Quantum and Classical Hybrid Generations for Classical Correlations", arXiv:2007.10673.

多体量子纠缠的可靠量化

多体量子纠缠的特性尚未被理解得很好。例如，它们的结构十分复杂，如何在实验中可靠地探测这些结构是很活跃的研究课题。更进一步，对未知的多体量子纠缠进行可靠的实验量化则是更为困难的任务。实际上，由于多体纠缠的复杂结构，它们的量化需要不同的视角，因此有必要研究多种不同的度量。

魏朝晖研究组基于之前提出的非简并贝尔不等式的概念，提出了能可靠量化多体量子系统几何纠缠度和相对熵纠缠度的理论方案。这些方案只基于贝尔实验的统计数据，除了量子维度不需要对系统的特征做任何预判，因此性质上是能提供可靠结果的半设备无关方案。

具体来说，该研究组首先根据测量数据，估计目标量子态和一个多体乘积纯态之间的最大内积，把它定义为 F 。其次，根据一个非简并贝尔不等式，估计目标态的纯度的下界。为了方便，该研究组将目标态正交分解中主成分的比重的下界定义为 α 。此项研究证明，如果 α 比 F 大，则该研究组可以得到一个几何纠缠度的非平凡下界。类似地可以证明，如果数据足够好，这两个量也可以导出一个相对熵纠缠度的非平凡下界。该研究组用数值模拟展示，上述两个理论方案有良好的性能，对当前的量子实验有价值。

该 成 果 研 究 论 文：Lijinzhi Lin and Zhaohui Wei. "Quantifying Multipartite Quantum Entanglement in a Semi-Device-Independent Manner", arXiv:2008.12064.



Edited by Kailin Li

Reviewed by Luming Duan, Jian Li, Xiamin Lv