



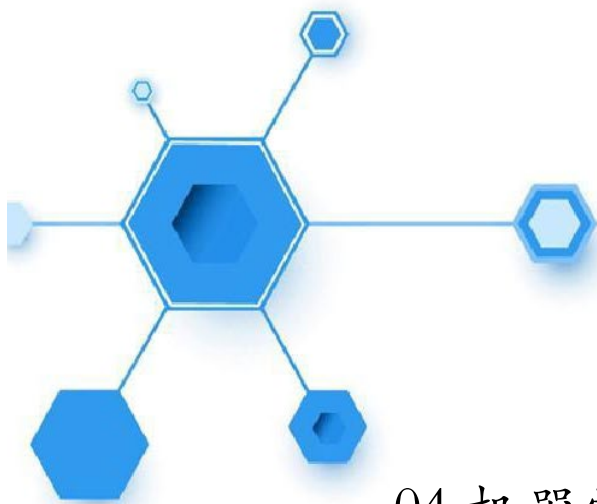
清华大学 交叉信息研究院

Institute for Interdisciplinary Information Sciences, Tsinghua University

学术科研简报

Academic Newsletter

January-June, 2021



人工智能

- 04 机器学习
- 06 前沿架构与智能芯片
- 10 深度强化学习
- 14 自然语言处理
- 15 计算生物学
- 20 计算机系统结构
- 22 区块链系统
- 24 理论计算机科学

量子信息

- 27 量子光学
- 29 量子通信
- 31 超导量子计算
- 36 实用化 (practical) 量子信息研究
- 40 量子人工智能
- 41 拓扑凝聚态物理



人工智能

一、机器学习

主要完成人：李建、黄隆波研究组（李建、黄隆波、徐进、张楚珩，蔡苑影）

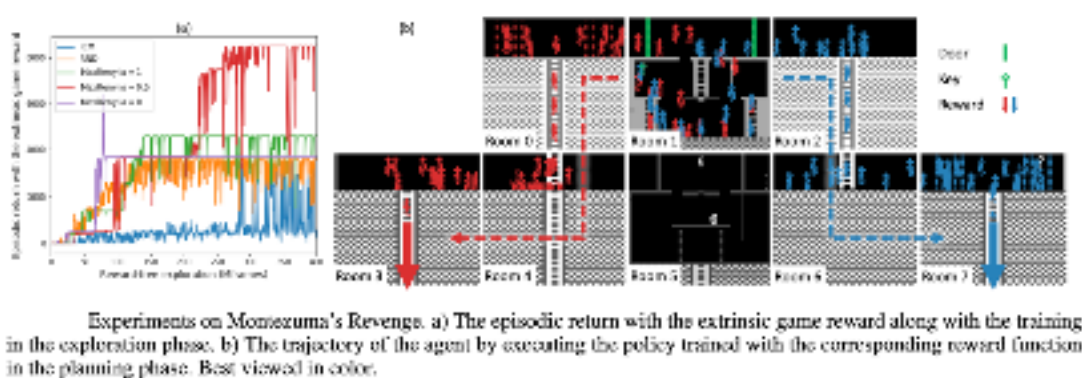
基于最大化 Rényi 熵的新的强化学习探索算法

探索一直以来都是强化学习中的一个重要问题，而有效的强化学习算法都需要依赖一个良好的探索机制。李建研究组在这篇文章中研究了一个在探索方面更具有挑战性的设定并且针对该设定设计了一个有效的算法。该研究组考虑的这个设定具有两个阶段：探索阶段和规划阶段。如下图所示，在探索阶段中，智能体需要在无奖励的环境中探索并且学习到一个好的探索性策略；接下来该研究组利用这个探索性策略收集一个数据集；在规划阶段中，针对任意给定的奖励函数，该研究组希望能够规划得到一个好的策略。不难看出，探索阶段中探索算法的有效性是解决该问题的关键；只有了有效的探索策略，才能够获得一个具有足够覆盖度的数据集来保证后续规划的有效性。

该研究组所设计的算法名称叫做 **MaxRenyi**。相比于传统的探索算法，该研究组的算法具有两个特点：一是他们的算法更加鼓励智能体在状态 - 动作空间上的探索，而不仅仅是在动作空间或者状态空间探索，这有利于提高数据集的覆盖度；二是他们的算法利用了一个更为广义的熵函数 —— Rényi 熵来作为目标函数，相比于传统的香农熵，Rényi 熵能够更加激励智能体对于难以访问的状态 - 动作对的遍历，从而获得更好的探索效果。此外，该研究组在理论上也证明了将 Rényi 熵作为目标函数对于该问题设定的有效性。

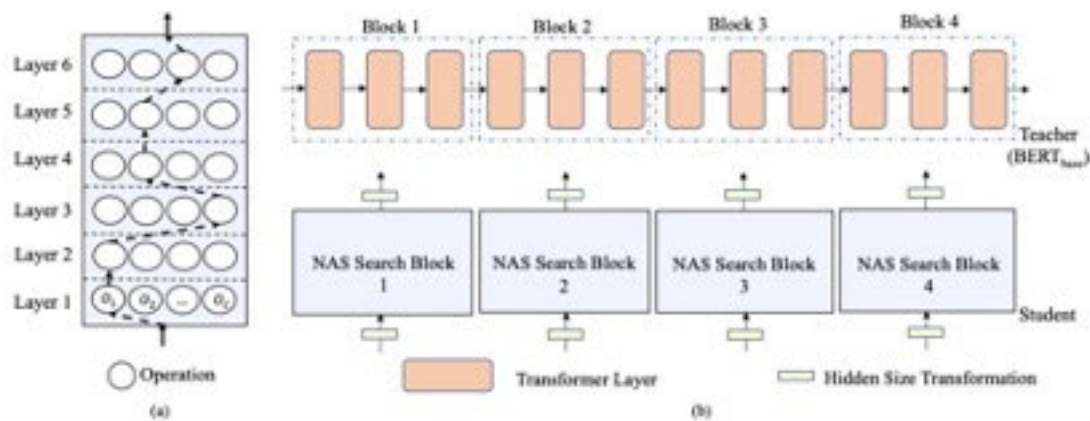
在实际算法设计上，该研究组利用推导得到的相应策略梯度形式，并结合被广泛使用的 **PPO** 算法来得到适用于实际高维复杂问题的算法。在实验上，该研究组的算法相比于之前的算法更加有效。比如，在蒙特祖玛的复仇游戏环境中，该研究组不仅在无奖励探索阶段能够取得更好的效果（左图），而且在规划阶段能够针对不同的奖励函数规划得到有效获取相应奖励的策略（右图）。

该成果研究论文：Chuheng Zhang, Yuanying Cai, Longbo Huang, Jian Li. "Exploration by Maximizing Renyi Entropy for Reward-Free RL Framework", AAAI 2021.



NAS-BERT: 用自动架构搜索实现任务无关且动态大小的 BERT 压缩

基于 Transformer 的大规模预训练语言模型如 BERT, XLNet, RoBERTa 以及 GPT3 等, 已经在众多自然语言处理任务上取得了令人惊艳的结果。然而巨大的模型尺寸和计算量使得他们难以在众多不同的下游任务中部署, 尤其是很多任务对资源有着严格的限制和要求, 如设备的容量。不同的设备往往对模型有着不同的要求, 比如模型占用的内存大小以及推理时延等。因此, 为了在这些设备中部署, 需要对这些大规模预训练模型进行压缩。由于存在大量复杂的场景以及不同的下游任务, 专门为每一种场景设计一种专门的压缩过的 BERT 模型需要大量的人力投入和计算资源。



为了解决这些问题, 李建研究组与微软亚洲研究院合作使用了自动架构搜索技术并提出了一种高效的 BERT 模型压缩方法叫做 NAS-BERT。NAS-BERT 训练这个超网络并产生动态尺寸和延迟的各种不同的模型。进一步的, 由于 NAS-BERT 直接在上游预训练任务中进行压缩训练, 压缩的模型就不依赖于下游的具体任务。因此, 模型可以直接被广泛应用在各种下游任务上, NAS-BERT 只通过一次搜索直接产生众多不同尺寸的模型以满足不同的设备要求, 因此资源受限的设备可以动态的选择合适的架构。NAS-BERT 能够产生各种尺寸的模型。并且在各种模型大小以及延迟条件下, 都一致超过手工设计的 BERT 模型。

该成果研究论文: Jin Xu, Xu Tan, Renqian Luo, Kaitao Song, Jian Li, Tao Qin, Tie-Yan Liu. "NAS-BERT: Task-Agnostic and Adaptive-Size BERT Compression with Neural Architecture Search", KDD 2021.

二、前沿架构与智能芯片

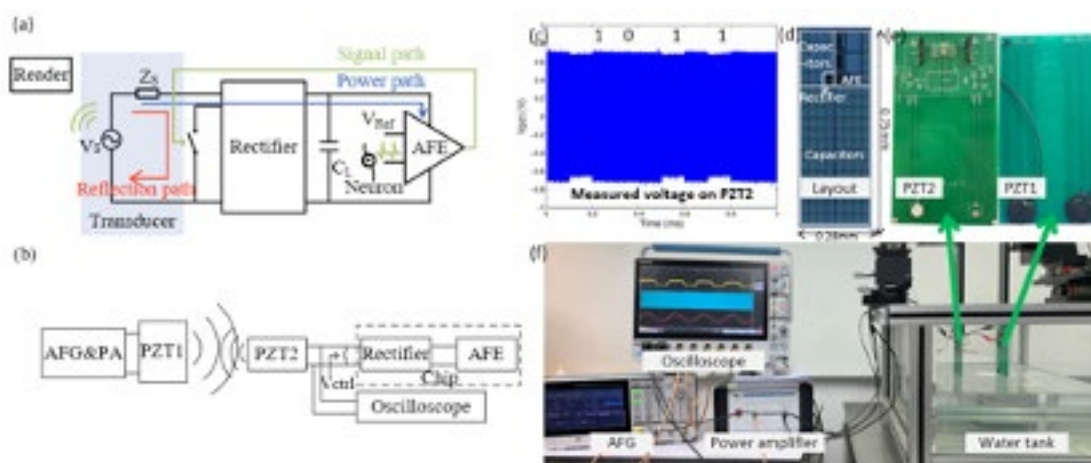
主要完成人：马恺声研究组（马恺声、马启超、谭展宏、张林峰）

全新的超低功耗神经信号记录与通信系统

在植入式神经传感器尺寸不断缩小的背景下，传感器能够接收到的能量急剧下降。因而，如何以极低的功耗实现神经信号的处理与通信成为新的挑战。在同一生物体内，同种类神经细胞产生的动作电位几乎相同，因而在进行神经信号的记录时，往往并不需要记录下完整的神经信号，而仅仅需要记录下每次神经活动事件产生的时刻。这样做可以极大的减少电路系统的功耗，同时，利用数字通信的特点，整个系统可以实现更高的抗干扰能力。

作为该领域的一项重要进展，马恺声研究组提出了一套全新的基于超声波的无线神经信号采集与通信系统。首先，该系统能够对采集到的神经信号进行放大和滤波；随后，被处理过的神经信号经过非线性放大，被量化为 1 比特的数字信号；最后，利用量化后的 1 比特数字信号来调制负载与天线间的阻抗匹配程度，通过后向散射原理，将神经信号通过超声波传出体外。整个系统的能量供应，通过压电陶瓷材料将接收到的机械能（超声波）转化为电能（交流）来提供。一个高能量转化效率、电压转换效率的整流器被用来实现交流电到直流电的转换。

该成果研究论文：Qichao Ma, Yinxiao Feng, Kaisheng Ma. “A Novel Low-Power Ultra-Compact Ultrasonic Communication System for Neural Spike Events Recording”, IUS 2021, to appear.

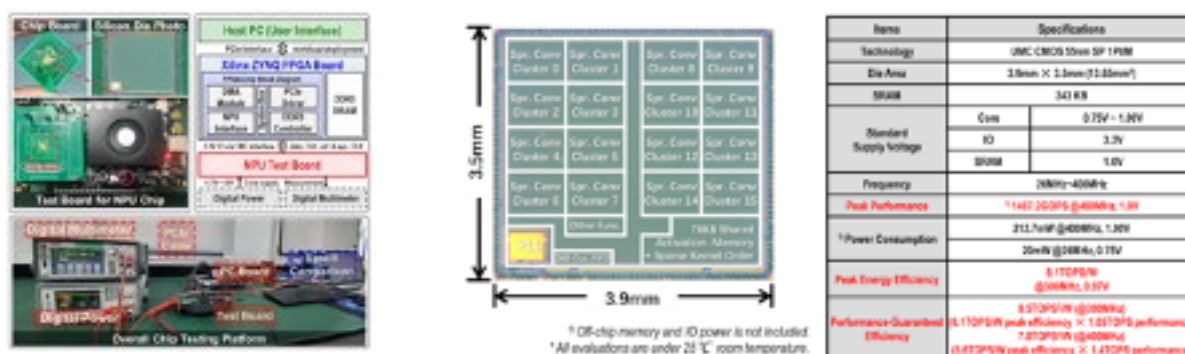


首次实现支持多模式剪枝与量化的神经网络加速器统一架构

在边缘设备部署 DNN 极大地依赖于剪枝和量化。对于剪枝，以前的工作只利用非结构化或粗粒度的剪枝。非结构化的细粒度剪枝虽然精度好，但是对硬件不友好；粗粒度的剪枝对硬件友好，但是其剪枝的精度敏感性高。因此，本工作采用了马恺声研究组在 2019 年发表在 DAC 的工作：图案剪枝，它可以很好地保持精度，同时也具备很好的硬件友好性。此外，不同的模型实际上会有不同的量化偏好，例如该研究组研究了均匀量化、2 的幂指数量化以及混合 2 的幂指数量化三种模式，发现最佳的量化模式选择会因为模型的不同而不同。

针对不同的剪枝样式：图案剪枝和卷积核剪枝，以及多种量化模式：均匀量化、2 的幂指数量化以及混合 2 的幂指数量化，本工作提出了一种统一的芯片架构予以支持。架构上该研究组采用了 64 通道的 PE 组，每组 PE 里面包含 4 个 MAC 单元，数据流采用输出固定的模式。为了实现卷积核剪枝，该研究组在激活缓存中加入了掩模码以及调度控制器，从而来指示每个输入通道数据应该传输到哪组 PE 中。为了实现图案剪枝，该研究组加入了高效的图案编解码模块以及跳零操作模块，可以避免冗余的乘零操作。此外，为了实现多模式的量化计算，MAC 的操作打散成基本的位操作与低位宽加法。该芯片采用 UMC 55nm SP-1P8M 的工艺，在 13.65mm² 的面积中实现了高达 1.4TOPS 的性能，以及 8.1TOPS/W 的能效比。并且，马恺声研究组提出了一个称为“性能保证的能效”指标。因为该研究组发现，许多 NPU 芯片的能效都是牺牲了性能，只能在较低电压和频率下实现较高的能效比，而该研究组的芯片能够支持最多 8.5TOPS²/W 的指标。

该成果研究论文：Zhanhong Tan, Sia-Huat Tan, Jan-Henrik Lambrechts, Yannian Zhang, Yifu Wu, Kaisheng Ma. In Proceedings of IEEE Custom Integrated Circuits Conference (CICC), 2021.

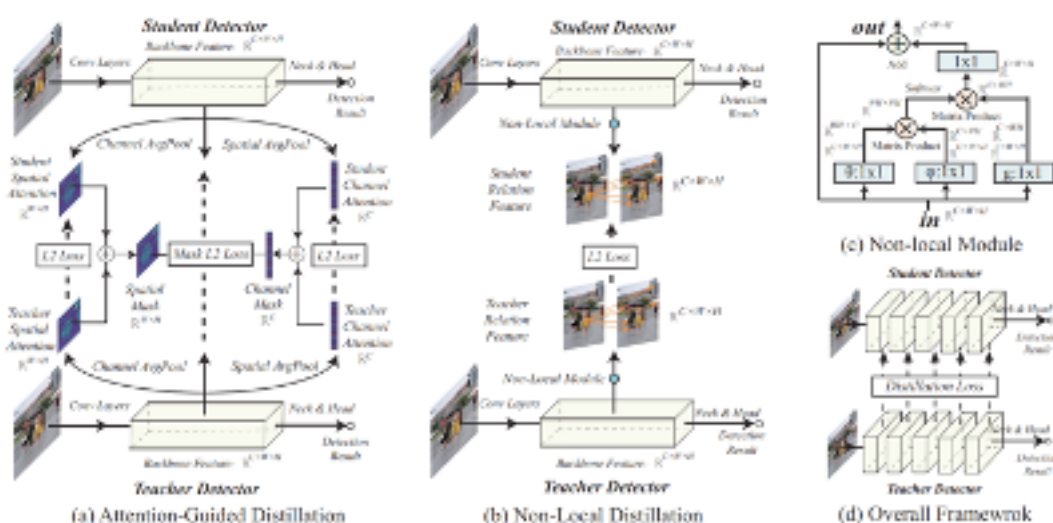


通过知识蒸馏提高目标检测的性能

在近年来，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。

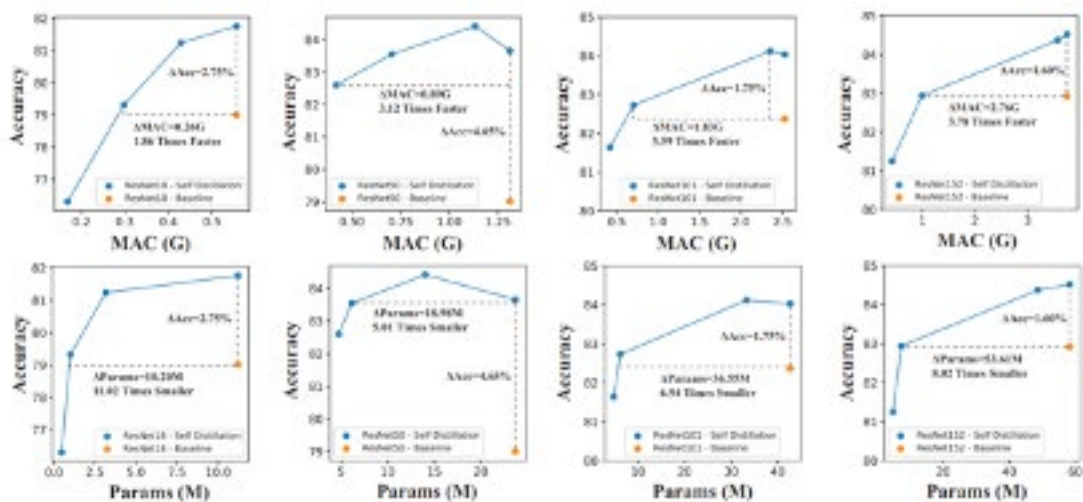
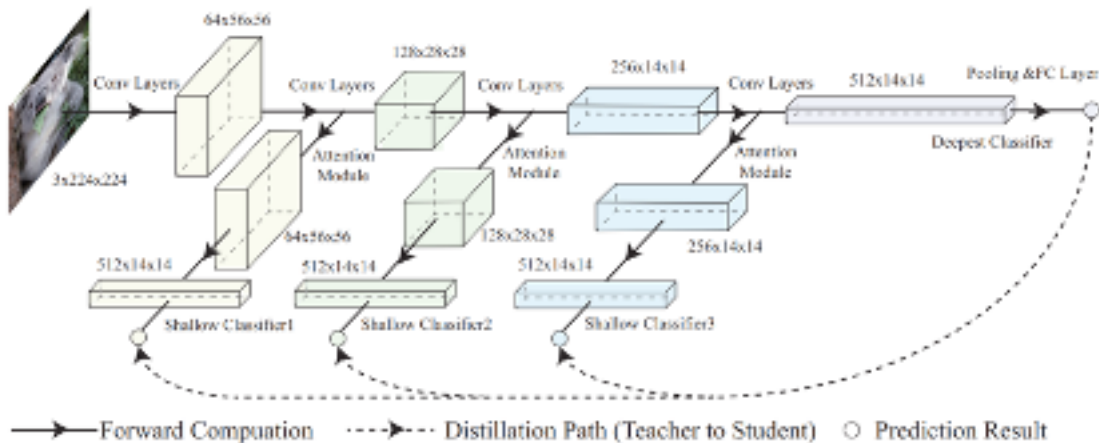
该成果研究论文：Linfeng Zhang, Kaisheng Ma. “Improve Object Detection with Feature-Based Knowledge Distillation: Towards Accurate and Efficient Detectors”, ICLR2021.



自蒸馏：通往高效紧凑的神经网络

近年来，基于神经网络的深度学习技术迅速发展，已经在诸多领域中取得了重大突破，并在人脸识别、无人驾驶等场景中进行了引用。然而，神经网络往往有着大量的参数量和计算量，这严重限制了它在手机、无人驾驶车等终端设备上的实际部署。为解决该问题，马恺声研究组提出了自蒸馏算法（Self-Distillation）。在神经网络训练阶段，该算法引入多个浅层分类器，并通过知识蒸馏将网络深层部分的知识迁移到网络的浅层，实现了显著的压缩、加速效果，以及网络识别正确率的提升。同时，利用网络不同位置的分类器，自蒸馏算法还可以根据场景需求动态地调整网络所需的计算代价，以适配不同环境下的使用需求。

该成果研究论文：Linfeng Zhang,Chenglong Bao,Kaisheng Ma. "Self-Distillation: Towards Efficient and Compact Neural Networks", T-PAMI 2021.



三、深度强化学习

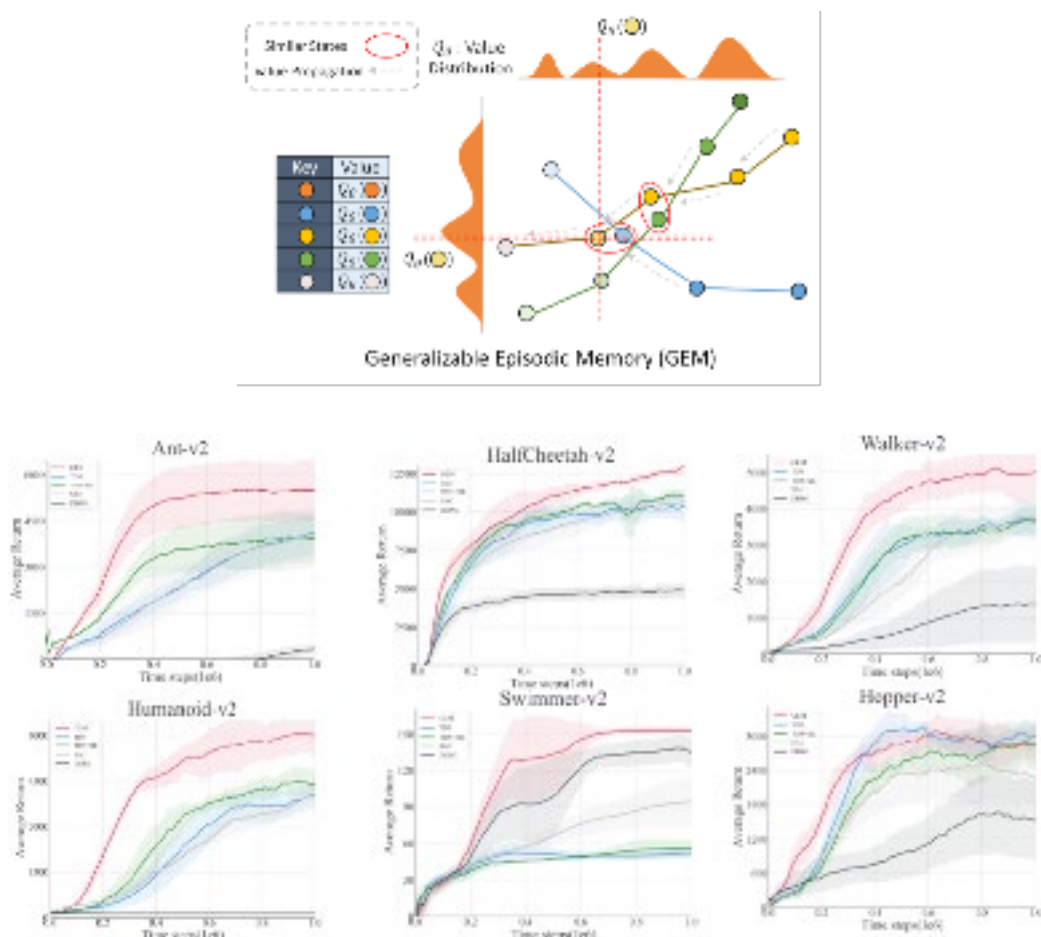
主要完成人：张崇洁研究组（胡昊、张进、王鉴浩、张崇洁）、高阳研究组（高阳、叶葳蕤）、吴翼研究组（吴翼、傅炜、张明昊、李云飞、徐树

深度强化学习中可泛化的情景记忆

人脑中的显式记忆包括语义记忆与情景记忆两种。深度强化学习中的值函数和策略可以看做语义记忆的一部分。通过对人脑中情景记忆机制的模仿，可以有效提高算法的采样效率。

张崇洁研究组首次提出了使用神经网络存储离散的情景记忆，从而使情景记忆获得泛化性。可泛化的记忆可以进一步支持在记忆中的规划，从而获得更好的值估计。此外，该方法使用了孪生反传过程来避免过估计问题。理论上，该方法具有防止过估计、在确定性环境中收敛至最优等优良性质。实验结果表明，在物理仿真机器人环境和雅塔利游戏中，该方法都明显优于其他基线算法。这一成果是情景记忆类方法的重要发展，向进一步提高深度强化学习采样效率迈出了坚实的一步。

该成果研究论文：Hao Hu, Jianing Ye, Guangxiang Zhu, Zhizhou Ren and Chongjie Zhang. “Generalizable Episodic Memory for Deep Reinforcement Learning”. In International Conference on Machine Learning, 2021.



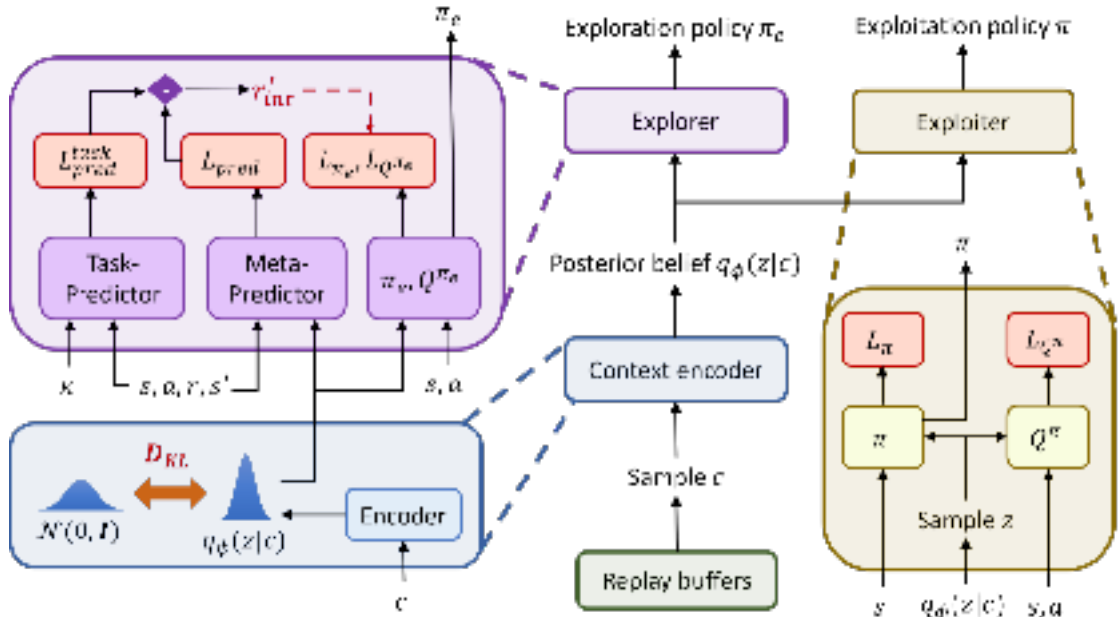
基于赋能探索的元强化学习

如何提升采样效率与学习效率一直是人工智能领域的一个重要问题。受到人类知识迁移能力的启发，元学习聚焦于从过去经历过的任务中提取先验知识，从而快速解决新的任务。

在强化学习中，由于智能体需要与环境进行交互来获取数据，如何在环境中进行探索成为了一个重要且基础的问题。元强化学习同样面临着探索的问题：如何结合先验知识以实现高效的探索？为了解决这一问题，张崇洁研究组提出了 MetaCURE，一种基于赋能探索的元强化学习算法。MetaCURE 设计了一个基于信息论的目标函数来衡量探索经验对当前任务的信息增益，并推导出了相应的内在奖励函数，该内在奖励能有效地引导探索策略收集任务信息。另外，元强化学习的自适应过程分为探索和利用两个阶段。为了避免利用策略对探索策略的学习产生干扰，MetaCURE 将探索策略和利用策略分离为两个独立的策略，并使用不同的目标函数对它们进行训练。实验结果表明，在物理仿真机器人环境中，MetaCURE 算法的表现明显优于其他元强化学习方法。这一成果填补了元强化学习领域在探索问题研究上的空缺。

该成果研究论文：Jin Zhang, Jianhao Wang, Hao Hu, Tong Chen, Yingfeng Chen, Changjie Fan and Chongjie Zhang.

“MetaCURE: Meta Reinforcement Learning with Empowerment-Driven Exploration”. In International Conference on Machine Learning, 2021.



首次在仅含 2 小时训练数据的 Atari 游戏上利用深度强化学习超过人类平均水平

Atari 游戏是一组种类各异的电子游戏集合。该游戏集合由于场景繁多，规则各异，一定程度上贴近现实复杂环境，因此长期被当作测试标准用于验证强化学习算法在复杂各异的环境下的性能。

作为这一领域的一项突破性进展，高阳研究组提出模型 EfficientZero，通过三个关键技术改进基于模型的强化学习算法：利用时序预测一致性 (temporal contrastive consistency)，减少预测回报的不确定性 (aleatory uncertainty) 以及纠正离线策略价值的偏移 (off-policy correction)。该模型从零开始训练，最终成功在仅仅两个小时的训练数据上超过了经过同样时间训练的人类平均水平。而目前几乎所有的深度强化学习算法都需要额外数十倍甚至数百倍的训练数据才能超过该水平，如此庞大的数据需求也阻碍了深度强化学习算法在实际复杂场景中的应用。因此，该成果证明了深度学习算法在少量数据训练下的潜力，也为深度强化学习算法在实际复杂场景中的应用提供了可能。

该成果研究论文：Weirui Ye, Shaohuai Liu, Thanard Kurutach, Pieter Abbeel, Yang Gao. “Mastering Atari Games with Limited Data”, NeurIPS 2021, in submission.

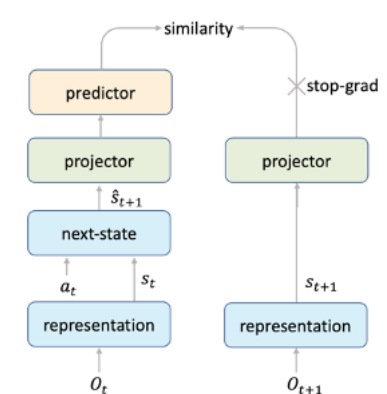


Figure 1: The self-supervised consistency loss.



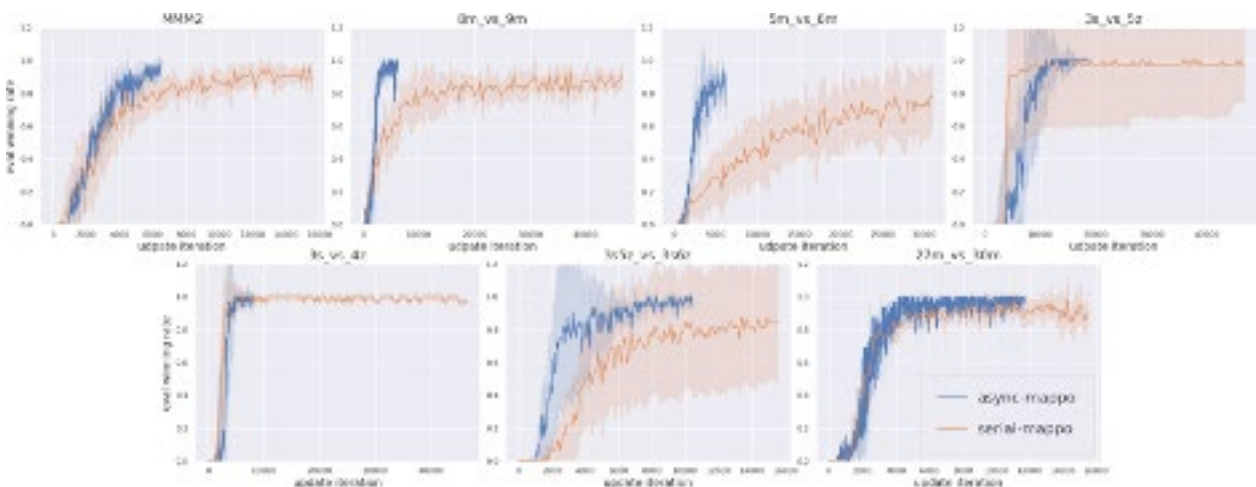
Figure 2: Pipeline of the EfficientZero implementation.

利用分布式训练在 MAPPO 算法上获得了吞吐量和算法表现的显著提升

尽管以往研究者们更青睐离轨（off-policy）多智能体强化学习算法，最近的一篇工作说明同轨（on-policy）强化学习算法，即多智能体近端策略优化（multi-agent proximal policy optimization, MAPPO）能够在多个环境中取得相匹配的样本效率和最终表现。然而 MAPPO 的原本实现是连载（serial）模式的——智能体顺序进行环境交互获取数据，以及利用这些数据更新网络参数；如果利用更大的批量进行训练，连载模式造成的时间消耗是难以忍受的。此外，同轨强化学习算法 MAPPO 的最终表现与训练批量大小息息相关。

吴翼研究组提出对于已有的分布式强化学习架构 SEED 进行改进，并集成到 MAPPO 算法上，这是多智能体强化学习领域首次尝试利用分布式训练和更大的批量大小提升算法性能。一方面，他们利用“双重缓冲采样”提升了 SEED 架构的 CPU 利用率，并通过实验证实了改进后的 SEED 架构能够在保持原有架构可扩展性的同时，达到更高的系统吞吐量；另一方面，在结合分布式训练并利用更大批量的情况下，MAPPO 能够在星际争霸多智能体挑战“困难”和“非常困难”的地图中获得现今最佳的表现，并缓解了原本 MAPPO 算法的超参数敏感性。

该成果研究论文：Wei Fu, Chao Yu, Yunfei Li and Yi Wu. “Unlocking the Potential of MAPPO with Asynchronous Optimization”, CICA 2021.

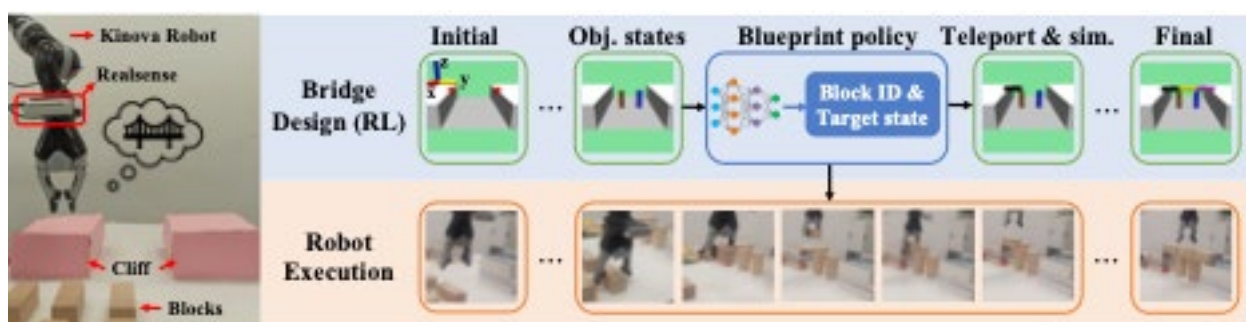


自主设计建造桥梁的智能机械臂

在机械臂自动控制中，实现具有自主性的智能系统一直是研究的重点问题。在装配、物品整理、堆积木等和物体交互的机械臂操作任务中，现有的工作大多假设已有事先设计好的目标状态，而关注于规划出能操作各个物体的机械臂控制路径达到该目标。然而手工设计目标状态需要较强的先验知识。如果机器能学会根据不同需求灵活地设计目标，就能进一步减少人工投入。本项目中，吴翼研究组聚焦于机器人利用给定物料搭桥的场景，在物料的数量、尺寸和河岸间距变化的情况下，机器人需要自主设计、建造出稳定且节省物料的结构连通河岸。

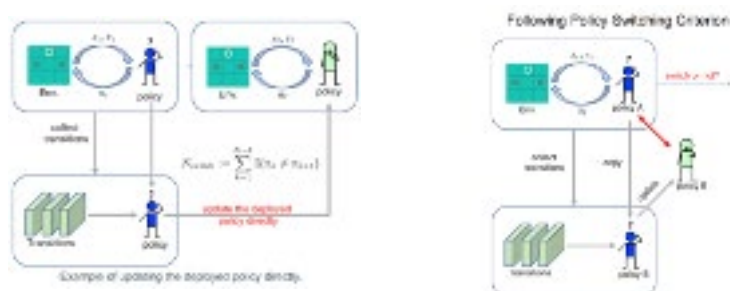
吴翼研究组提出双层策略来建模该问题，上层策略学习隐去了机械臂操作的细节，专注于在给定物料尺寸、河岸距离的条件下设计合适结构。上层策略由深度强化学习算法训练，它能预测出一个动作序列，使得每次移动一个物体位姿的情况下最终能形成桥梁。下层策略负责机械臂控制，真正实现上层策略规划出的物体的移动。该研究组在仿真环境和真实机器人平台上都进行了实验验证，该研究组的机器人能根据物料、河岸距离的不同设计出不同的桥梁，有了一定的自主性。

该成果研究论文：Yunfei Li, Tao Kong, Lei Li, Yifeng Li and Yi Wu. “Learning to Design and Construct Bridge without Blueprint”, IROS 2021, in submission.



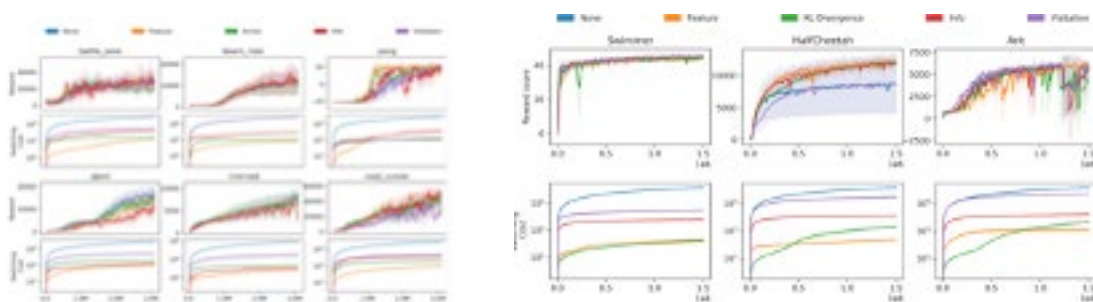
研究在复杂环境和算法中降低 policy 切换次数

随着强化学习的发展，越来越多的研究开始考虑将强化学习的算法应用到我们实际生活中，比如医疗诊断、机器人控制等等。但是在这个过程中还存在比较多的问题，一个比较突出的问题就是：强化学习算法训练过程中通常需要一个 **policy** 不断与环境进行并且交互并且收集数据，同时需要频繁地更新这个 **policy** 以保证收集到的数据更加有意义。但是，在实际应用中，频繁地更新与环境交互地 **policy** 的代价通常是比较大的，此工作主要研究如何降低更新 **policy** 的次数。



在之前的工作中，已经有不少理论的工作已经研究过这个问题。但是这些研究都存在很大的局限性，比如环境都比较简单，状态空间和动作空间比较小，或者假设了算法是线性的，这都是实际上不可能满足的条件或者假设。同时这些研究的给出的切换策略也比较单一，通常是计算一些 **information matrix**，然后根据 **information matrix** 设定相应的阈值进行 **policy** 的更新。

在此工作中，吴翼研究组研究如何在复杂的环境和算法中降低切换 **policy** 的次数，并且提出了全新的基于 **feature** 的切换 **policy** 的策略。该研究组在 Atari 游戏（用图像作为 **state**，状态空间大）以及 MuJoCo 控制环境（动作空间是连续的）中分别使用 DQN 和 SAC 算法进行了实验。实验表明基于 **feature** 的切换策略全面超过了基于 **information matrix** 的策略，在保持算法的表现同时能够大幅降低切换 **policy** 的次数。



该成果研究论文：Shusheng Xu, Yunfei Li, Yancheng Liang, Simon Shaolei Du, Yi Wu. “Beyond Information Gain in Low-Switching-Cost Reinforcement Learning”.

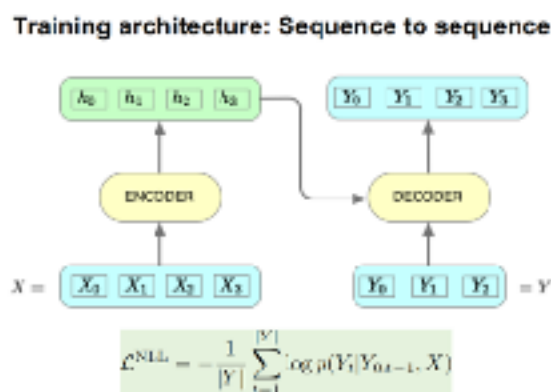
四、自然语言处理

主要完成人：吴翼研究组（吴翼、徐树声、张星星）

通过文章和摘要的对比学习改进文本摘要的训练过程

文本摘要的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章的主要内容，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。此工作主要专注于生成式摘要，生成式摘要需要模型对整个长文档有一个整体的理解，可以使用原文中没有的字、词、语法进行摘要的生成，通常来说比起抽取式摘要来说更加简洁、概括性更好，但是难度也相应的更高。

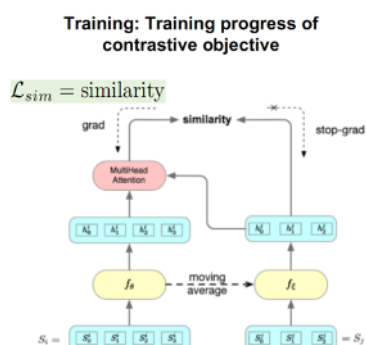
目前来说生成式摘要的主要都是在 sequence-to-sequence 框架下完成的。简单来说就是通过一个编码器（encoder）对长的文章进行编码，用一个解码器（decoder）对编码后的信息进行解码并生成我们想要的摘要。在训练过程中，通常使用的是 NLL（negative log likelihood）作为损失函数。



该过程属于监督训练，训练集中也包含每个长文章地对应人工手写的摘要。通过优化该损失函数可以使得生成的效果越来越好。

但是将 NLL 作为损失函数并没有很好地建模摘要任务一个重要的特点：文章和摘要本质上应该在描述同一件事，唯一的差别就是摘要需要用更短的文字将文章重点描述出来。为了更好地建模这个过程，吴翼研究组引入了对比学习（contrastive learning），将文章和摘要通过编码映射到同一个向量空间，在该空间内拉近文章和摘要的距离。经过实验验证，该方法在两个数据集上达到了目前生成式摘要的最好结果，并且显著高于没有使用对比学习的 baseline。

该成果研究论文：Shusheng Xu, Xingxing Zhang, Yi Wu, Furu Wei. “Sequence Level Contrastive Learning for Text Summarization”.



五、计算生物学

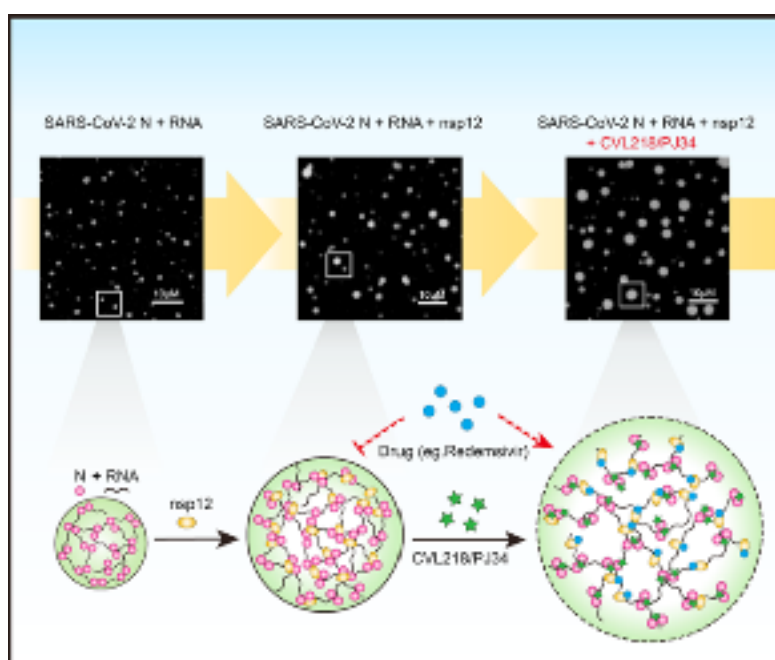
主要完成人：曾坚阳研究组（曾坚阳、赵诞、张晓凡、冯沛源、田庭忠、熊袁鹏、贺选）

基于相分离的新冠联合用药新策略

严重急性呼吸综合征冠状病毒 2 (severe acute respiratory syndrome coronavirus 2, SARS-CoV-2) 引发的新冠肺炎 (coronavirus disease 2019, COVID-19) 疫情仍在全球肆虐。相分离 (Phase separation) 是生命科学领域近几年发展起来的研究热点。在一定条件下，溶液中的生物大分子会因相互作用而高度聚集浓缩，从普通溶液相中分离出来，形成独立的、粘稠的液体相（相分离液滴）。针对新冠病毒的研究，多个课题组报道了 Nucleocapsid (N) 蛋白能够与病毒 RNA 发生相分离这一现象。由于 N 蛋白对病毒基因组的包装起着重要作用，作为一个关键的抗病毒靶点，N 蛋白的相分离与之前广泛开展的小分子药物干预之间是否存在关联呢？

为解决这一疑问，曾坚阳研究组与清华大学生命科学学院李丕龙课题组合作开展了相关研究，系统地鉴定了 SARS-CoV-2 N 蛋白的相分离特性，深入探究了病毒 RNA 及复制相关蛋白参与 N 蛋白分相的情况，首次发现两个靶向 N 蛋白的小分子药物 CVL218 和 PJ34 可以特异性干预 N-viral RNA-nsp12 复合物的相分离特性，进而提高其他抗病毒药物进入靶点的效率，最终提出基于相分离的抗病毒药物联合使用新策略。

该成果研究论文：Zhao D , Xu W , Zhang X , et al. "Understanding the phase separation characteristics of nucleocapsid protein provides a new therapeutic opportunity against SARS-CoV-2", Protein & Cell, 2021.

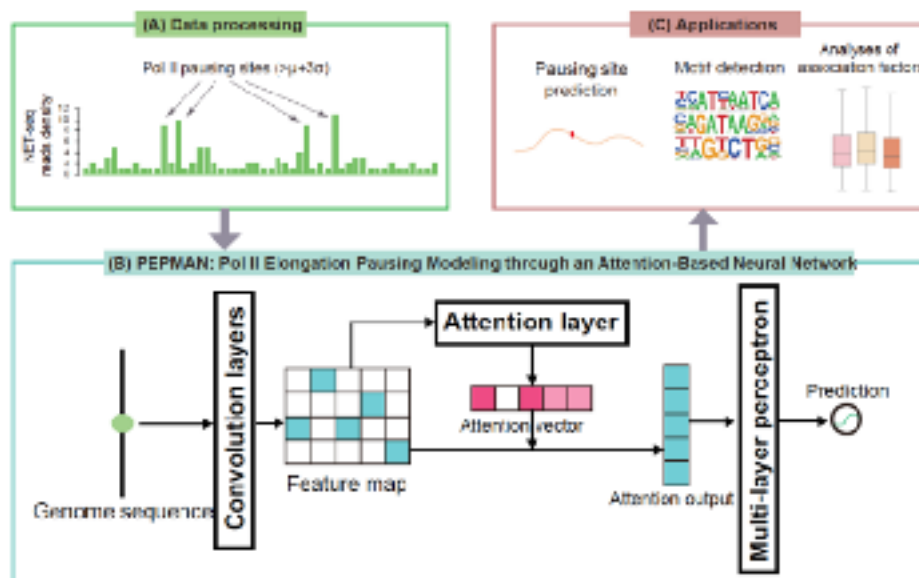


基于深度学习的 RNA 聚合酶停顿建模

RNA 聚合酶 II (RNA polymerase II, Pol II) 是转录过程中的一个广泛存在的现象。之前的研究表明, 这种 Pol II 的停顿参与到与许多转录机制的调控中。比如在启动子下游停顿会调控基因的表达, 在可变剪接位点附近停顿导致不同的可变剪切结果。但是, 全基因组上分析 Pol II 停顿的序列位点及其特征, 与其他转录因子的关系, 在基因转录过程中的调控机制的研究相对较少。

曾坚阳研究组首次使用深度学习预测全基因组上 Pol II 的停顿位点, 并在多个细胞系上都取得了很高的准确率。研究组通过深度学习模型的注意力机制发现在决定停顿发生的序列位点集中在停顿点附近, 并且使用模型预测基因组上具有生物学标记位置上的停顿倾向来发现 Pol II 停顿的导致的生物学机制, 揭示了 Pol II 在决定可变剪切类型上发挥的重要作用, 同时探究了 Pol II 停顿与转录因子结合位点, 组蛋白修饰, 以及 DNA 甲基化的关系。

该成果研究论文: Peiyuan Feng, An Xiao, Meng Fang, Fangping Wan, Shuya Li, Peng Lang, Dan Zhao and Jianyang Zeng. “A machine learning-based framework for modeling transcription elongation”, Proceedings of the National Academy of Sciences 2021.

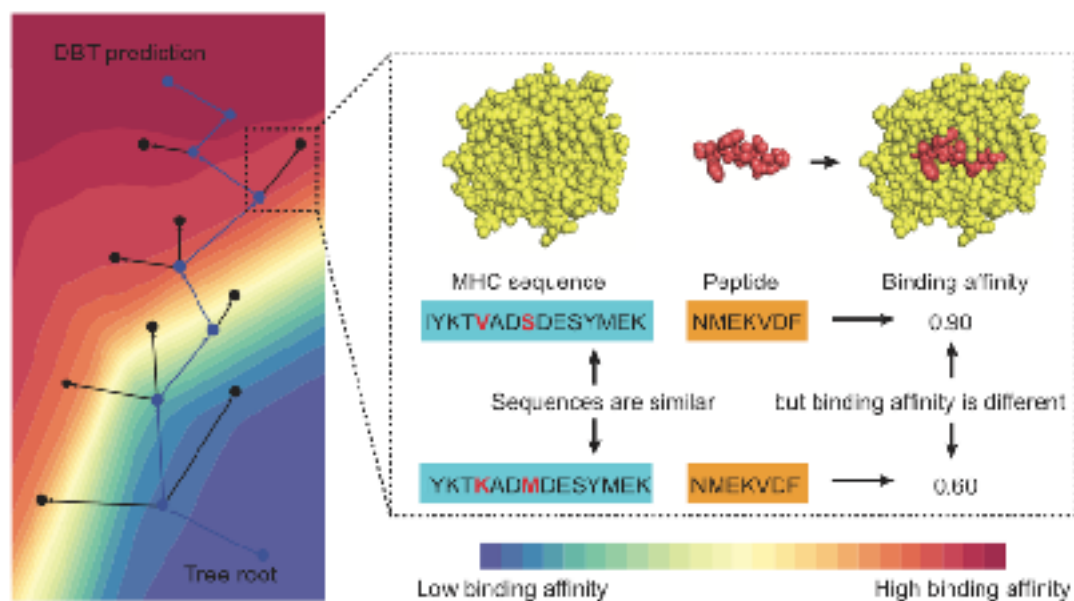


基于 Differential boundary Tree 的 MHC-peptide 结合预测

在免疫系统中，被分解后的蛋白质或者病毒碎片（线性肽）会与主要组织相容复合体（major histocompatibility complex, MHC）结合并且呈递在细胞表面被 T 淋巴细胞识别，启动下游免疫反应。因此，能够准确预测线性肽与 MHC 分子结合强度一直是人们长期关注和研究的课题。同时，现存的大量深度学习模型虽然能够获得较高的准确率，但无法提供模型预测的解释性，无法在后续对线性肽与 MHC 分子结合的优化分析提供帮助。

曾坚阳研究组首次将一种同时具有高准确率并且有强解释性的深度学习模型 Differential boundary Tree (DBT) 用于预测线性肽和 MHCI 的结合强度。该研究组针对 DBT 训练和推断速度慢，无法运用到大型生物数据上的特点设计了一种并行加速算法，将 DBT 成功运用到线性肽和 MHCI 结合数据集上，并且相对于已有的算法都取得了较高的准确率。另一方面，该研究组展示了模型可以对每个预测样本给出其决策路径，为该问题提供了一种全新的兼具高准确率和强解释性的深度学习模型。

该成果研究论文：Peiyuan Feng, Jianyang Zeng and Jianzhu Ma. “Predicting MHC-peptide binding affinity by differential boundary tree”, International Society for Computational Biology (ISMB/ECCB), bioinformatics, 2021.

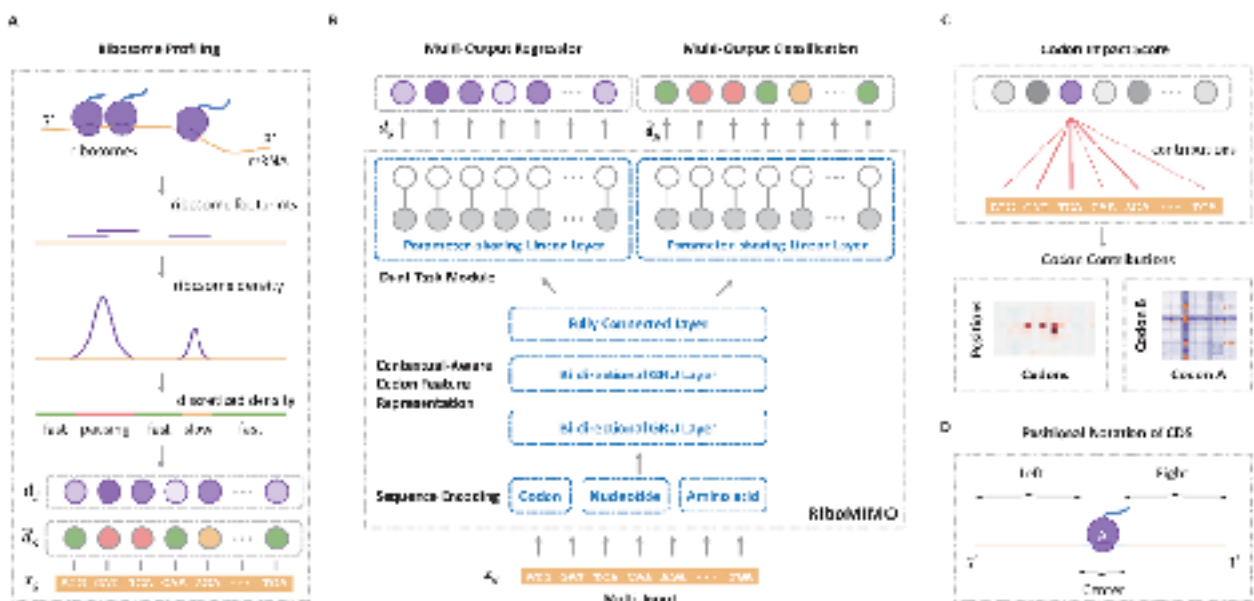


基于全长编码区的翻译延伸过程建模

蛋白质的翻译由起始、延伸和终止三个步骤完成。在翻译延伸过程中，核糖体将信使 RNA 上的密码子依次解码为氨基酸，形成多肽链，从而得到蛋白质的一级结构。研究表明，蛋白质的翻译延伸并不是一个匀速的过程，核糖体在不同密码子的延伸速率呈现出动态变化的情形。近年来，研究者们对蛋白质的翻译延伸过程建立了多个计算模型，成功捕捉了翻译延伸的动态过程。然而，绝大多数模型都只关注密码子局部领域中的序列特征，忽视了全长信使 RNA 存在的远距离依赖。对全长编码区进行建模能够更加全面而准确地刻画蛋白质翻译的动态延伸过程。

曾坚阳研究组首次用深度学习对全长编码区的翻译延伸过程进行建模，同时对模型提出可解释性要求。和已有的模型相比，基于全长建模的方法能够更加准确地预测核糖体密度。同时，可解释性的打分方法成功捕捉到了影响翻译延伸速率的上下文序列模式，并且发现翻译过程存在远距离依赖，这一长程依赖可能是由延伸中的堵塞导致的。全长编码区建模方法从全新的角度审视了翻译延伸过程，能够为翻译延伸的机制研究提供重要启发。

该成果研究论文：Tingzhong Tian, Shuya Li, Peng Lang, Dan Zhao, Jianyang Zeng. “Full-length ribosome density prediction by a multi-input and multi-output model”, PLOS Computational Biology. 2021.

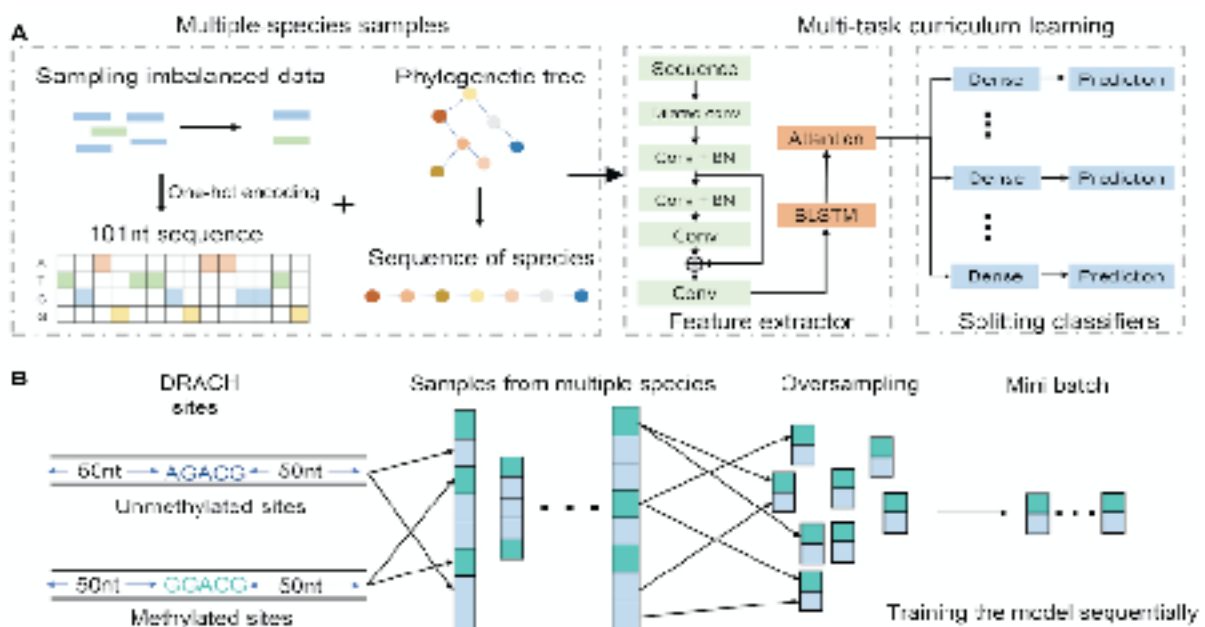


基于多物种的 RNA 甲基化修饰预测

m6A 是真核 mRNA 中最普遍的修饰。作为一种重要的转录后修饰，其参与调控许多生物学过程，例如基因表达，RNA 稳定性，RNA 结构和翻译。当前已有多项实验技术和计算方法来刻画 m6A 修饰的转录组特性，以了解其在 mRNA 调控中的潜在机制和功能。然而，实验技术通常是昂贵且费时的，而且现有的计算模型通常仅针对 m6A 在单一物种中进行物种预测，并且在准确性、可解释性等方面存在很大的局限性。

曾坚阳研究组首次提出了一种高度可解释的计算框架，该框架基于多任务课程学习策略，可同时捕获多个物种的 m6A 特征。该方法与最新的预测方法相比，性能得到有效提升。根据预测的结果，该研究组进一步描绘了 m6A 与基因调控的各种特性之间的关系，包括基因表达，RNA 稳定性，翻译，RNA 结构和组蛋白修饰，为表征 m6A 修饰和研究其内在机制提供了一种新的视角。

该成果研究论文: Xiong Y, He X, Zhao D, et al. “Modeling multi-species RNA modification through multi-task curriculum learning”, *Nucleic acids research*, 2021.



六、计算机系统结构

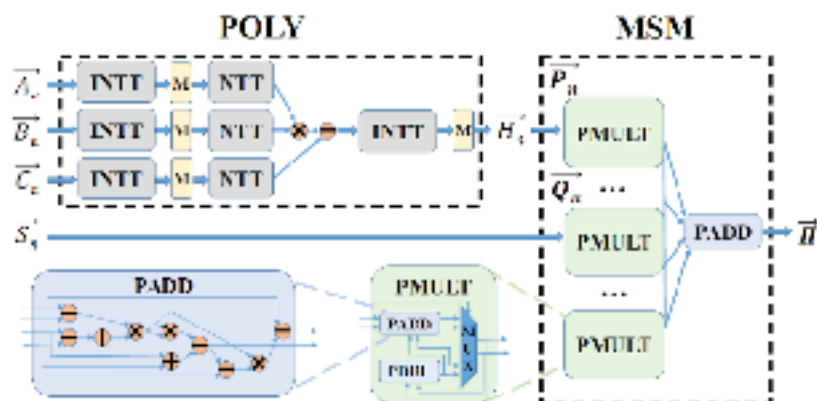
主要完成人：高鸣宇研究组（高鸣宇、张烨、孙广宇、王豪杰、翟季东、贾志豪）

针对零知识证明算法的流水线专用加速芯片架构

数据隐私安全问题是大数据和云计算时代的一大严峻挑战。现代密码学算法可以提供可靠的数据保护方式。其中，零知识证明（zero-knowledge proof, ZKP）是一种强大的密码学协议，可以使得一方（证明者）向另一方（验证者）证明一个计算陈述是正确的，而不泄露计算本身的数据信息，以此保证计算的隐私性。其广泛应用在可信计算，区块链扩容，匿名货币等领域。然而，应用零知识证明最核心的障碍在于证明者生成证明的过程非常耗时。这一过程包含有限域上的高次多项式计算和椭圆曲线上的大规模模幂运算。

为了更高效的支持现实世界中零知识证明算法的广泛应用，高鸣宇研究组提出了名为 PipeZK 的高效的流水线芯片架构。PipeZK 主要包含两个子系统。第一个子系统主要处理有限域上的高次多项式计算。通过利用傅里叶变换分解分解庞大的计算任务，同时对底层模块进行定制化流水线设计，并利用数据分片、片上转置等技术优化对数据流的控制。第二个子系统主要处理椭圆曲线上的大规模模幂运算。采用计算复杂度最优的 Pippenger 算法将大规模模幂转化为点加运算，并结合真实应用场景下系数分布规律，提出了更简单的任务分配机制，用最小的控制逻辑实现负载均衡。结果表明，PipeZK 可以将常规的密码学测试集的证明产生时间缩短 10 倍以上，可以将隐私货币 Zcash 的证明产生时间缩短 5 倍以上。

该成果研究论文：Ye Zhang, Shuo Wang, Xian Zhang, Jiangbin Dong, Xingzhong Mao, Fan Long, Cong Wang, Dong Zhou, Mingyu Gao, and Guangyu Sun. “PipeZK: Accelerating Zero-Knowledge Proof with a Pipelined Architecture”, ISCA 2021.

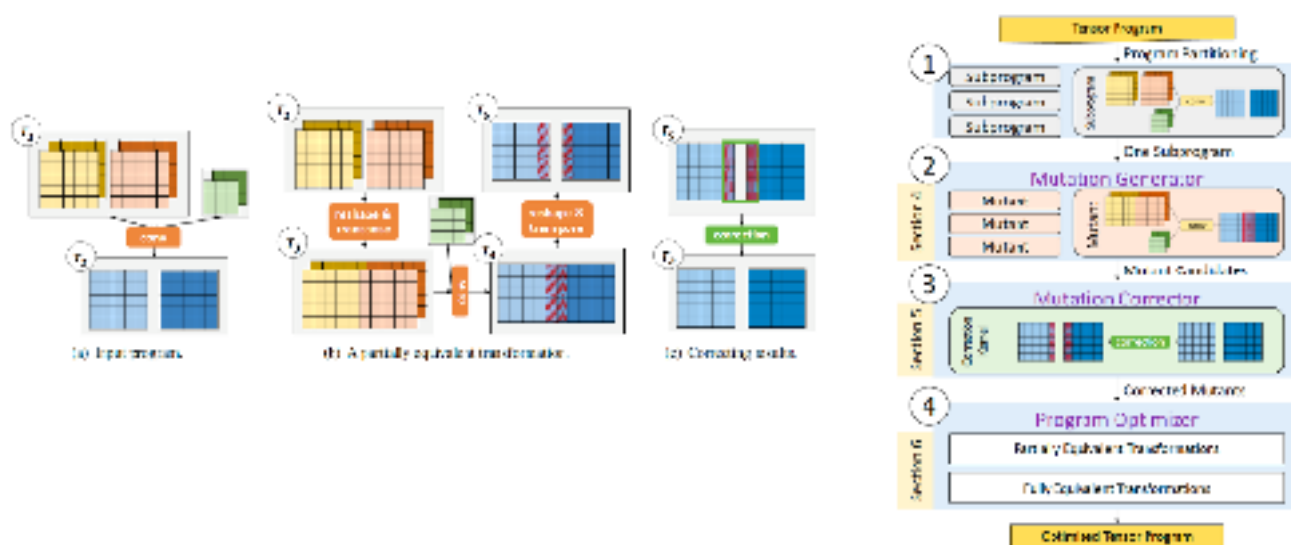


首次提出基于部分等价变换和自动修正的张量程序优化框架

高性能的张量程序是现实应用中深度神经网络模型的核心。当前的神经网络编程框架通常利用完全等价的算子变换对张量程序进行优化，从而在保持数学关系不变的情况下提高程序的性能。然而，仅限于采用完全等价变换错失了进一步优化的机会。例如，只对于结果张量中的一部分输出值保持原有数学关系的部分等价变换可以对张量程序进行更多样化的转换，从而得到更优化的结果。

高鸣宇研究组首次提出了利用部分等价变换和自动修正方法对张量程序进行优化的神经网络编程框架。这一框架可以自动化地发现和采用仅对于一部分输出值保持原有数学关系、但可以极大提高执行效率的算子变换。对于其他的输出值，该研究组的框架可以自动生成额外的修正算子对误差进行修复，从而保证了结果张量中的所有输出值都与原张量程序的结果一致。该研究组推导了严格的理论基础，以简化输出值的等价性检验和自动修正算子的生成。同时设计了高效的搜索算法，可以在张量层、算子层、图层等多个层次快速发现最有潜力的部分等价和完全等价变换。结果表明，高鸣宇研究组所提出的基于部分等价变换的框架与现有系统相比可以最大提升 2.5 倍的性能。

该成果研究论文：Haojie Wang, Jidong Zhai, Mingyu Gao, Zixuan Ma, Shizhi Tang, Liyan Zheng, Yuanzhi Li, Kaiyuan Rong, Yuanyong Chen, and Zhihao Jia. “PET: Optimizing Tensor Programs with Partially Equivalent Transformations and Automated Corrections”, OSDI 2021.



七、区块链系统

主要完成人：徐葳研究组（徐葳、曾丽仪）

首个大规模以太坊挖矿数据集

在基于工作量证明共识 (Proof-of-work, PoW) 的区块链系统中, 矿工掌控系统超过 50% 算力将破坏系统的安全性。

现实中，头部矿池掌控大量算力，如图 1 所示，以太坊的头部三大矿池（Ethermine, Spark Pool, F2Pool）掌握超过占全网 54% 的算力，给区块链系统安全带来极大的威胁。其他 PoW 区块链亦存在头部矿池掌握大多数算力的情况。

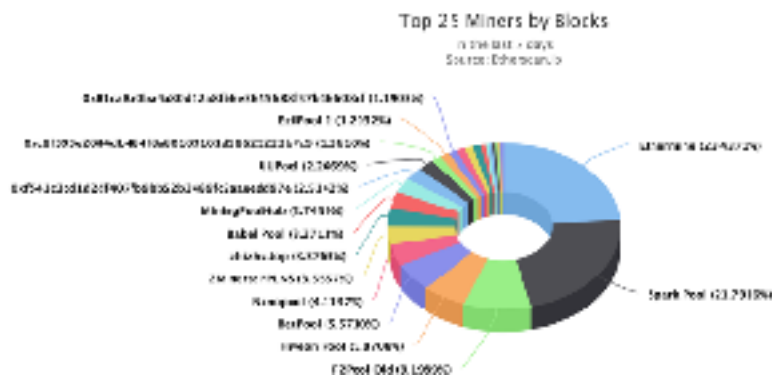


图 1: 以太坊算力分布图 (源自 Etherscan, 2021.06.24)

以太坊的挖矿生态构成如图 2 所示，区块记录矿工帐号，这些帐号来自矿池管理者或者独立矿工，他们直接获得系统发放的挖矿奖励，矿池收到奖励后再通过链上交易分发给矿池参与者。过去，算力去中心化的分析工作主要停留在分析头部矿池的算力分布，忽略了其他挖矿参与者的算力情况。徐葳研究组发现研究以太坊算力去中心化情况不能仅仅局限于分析挖矿节点（矿池和独立矿工）的算力分布，也应该考虑矿池参与者的挖矿行为和算力分布情况，为度量算力去中心化程度和防止算力集中的解决方案提供更多洞悉。

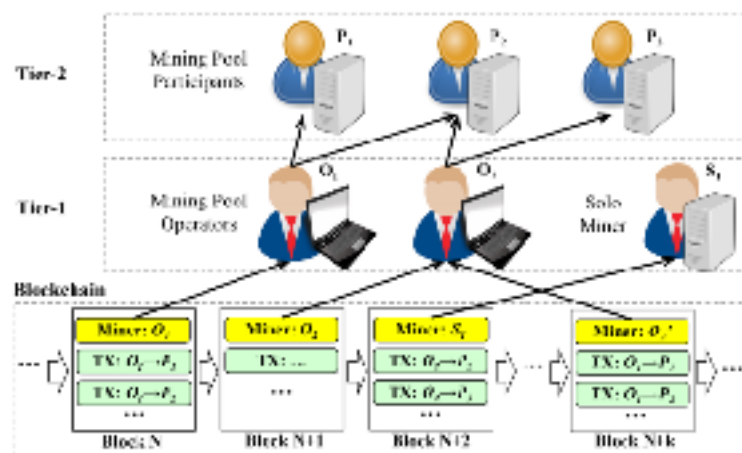


图 2: 以太坊挖矿生态构成图

然而，以太坊帐号都是去实名化的，单从链上交易无法准确识别矿池参与者帐号，目前学术界没有关于矿池参与者的真实数据集。该研究结合链上和链下的多个数据源识别矿池参与者帐号和矿池分发奖励交易，数据集识别流程图 3 所示。

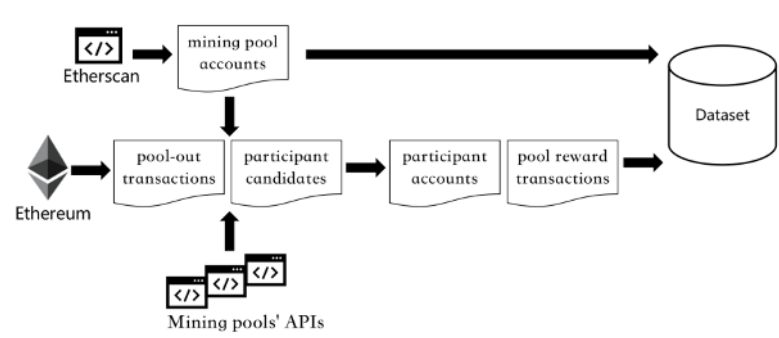


图 3：以太坊挖矿数据集识别流程图

此项研究是对以太坊矿池参与者的首个大规模识别分析工作，创建首个大规模以太坊挖矿数据集。该数据集涵盖以太坊自上线（2015 年 7 月 30 日）以来至 2020 年 4 月 10 日的近 5 年数据，包含所有矿工帐号的奖励交易、识别的矿池帐号、识别的矿池参与者帐号和矿池发至矿池参与者的奖励交易，覆盖近两年内占全网平均 77% 算力的挖矿行为。

该研究深入分析矿池之下矿池参与者的算力分布情况、矿池参与者同时参与多个矿池或在多个矿池间跳转的挖矿行为、矿工选择加入矿池的多元原因，进一步丰富以太坊算力去中心化程度的评估，讨论矿池挖矿算力的可控性，推理思考现有研究工作提出的阻止矿池集中算力的解决方案的可行性，给区块链社区带来基于数据驱动的深层次的算力去中心化研究。

该成果研究论文：Liyi Zeng, Yang Chen, Shuo Chen, Xian Zhang, Zhongxin Guo, Wei Xu and Thomas Moscibroda. "Characterizing Ethereum's Mining Power Decentralization at a Deeper Level", IEEE INFOCOM 2021.

八、理论计算机科学

主要完成人：段然研究组（段然）

接近最优的无线网络通讯中能量 - 时间关系

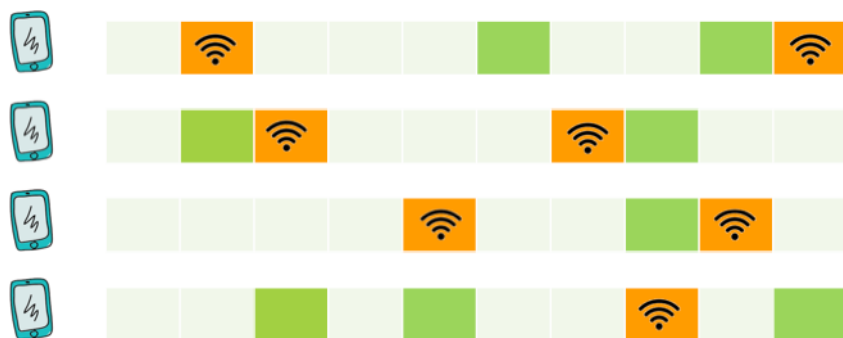
段然研究组研究无线移动网络的基本模型：一共有 n 个设备，设备 ID 为 $1 \dots N$ 。只有一个通信频道，时间被划分成离散的时间块，设备在每个时间块可以广播一条消息，或者收听消息，或者休眠。广播或接收消息会消耗一个单位的能量，休眠状态不消耗能量。当一个时间块内只有一个设备广播消息时其他设备可以收听到该消息。如果一个时间块里有两个或多个设备同时发送消息，其他设备只能听到噪音。基于各个设备能否分辨噪音（有多个设备同时广播）和静音（无设备广播），理论上又分为 4 个模型：

- **Strong-CD** 发送方和接收方都可以分辨噪音和静音
- **Sender-CD** 只有发送方可以分辨噪音和静音
- **Receiver-CD** 只有接收方都可以分辨噪音和静音（发送方无任何反馈）
- **No-CD** 发送方和接收方都不能分辨噪音和静音

在无线网络中，领头人选举问题是指要选出一个设备为领头人并且得到大家认可。由于在解决了领头人选举问题后，整个网络就可以被当成集中式系统，所以很多问题的算法都可以规约到领头人选举问题上。由于电池容量的限制，当前无线移动计算中最稀缺的资源是能量。之前有一些结果研究了领头人选举问题在各个模型下的能量复杂度，比如在 Strong-CD 模型下基本二分算法的能量复杂度和时间复杂度为 $O(\log N)$ ，而 [Chang et al 19] 给出了能量复杂度为 $O(\log \log N)$ 的算法并证明了最优，但其算法的时间复杂度为 $O(N)$ 。所以该研究组具体研究了算法的能量和时间之间的权衡关系。

与苏黎世联邦理工的博士后张艺润（Yi-Jun Zhang）和前计科 50 班学生姜舜华合作，该研究组给出了第一个领头人选举问题的确定性算法的能量和时间复杂度的关系。在 Sender-CD 模型下，如果能量复杂度为 k ($k \geq \log \log N$)，时间复杂度可以做到 $O(kN^{1/k} + n^{1+\epsilon})$ ，改进了之前 k 很小时 $O(N)$ 的时间复杂度。同时证明了即使只有两个设备 ($n=2$)，能量为 k 时时间复杂度也需要 $\Omega(kN^{1/k})$ ，这就证明了这个算法接近最优。在 n 较大时，也给出了 Strong-CD/Sender-CD 模型下能量复杂度为 $O(\max\{1, \log \log(N/n)\})$ 的确定性算法，和 Receiver-CD/No-CD 模型下能量为 $O(\max\{1, \log(N/n)\})$ 的确定性算法，同时也分别证明了 $\Omega(\log \log(N/n))$ 和 $\Omega(\log(N/n))$ 的能量复杂度下界，所以也得到了最优的结果。

该成果研究论文：Yi-Jun Chang, Ran Duan, Shunhua Jiang. "Near-Optimal Time-Energy Trade-Offs for Deterministic Leader Election", to appear in SPAA 2021.



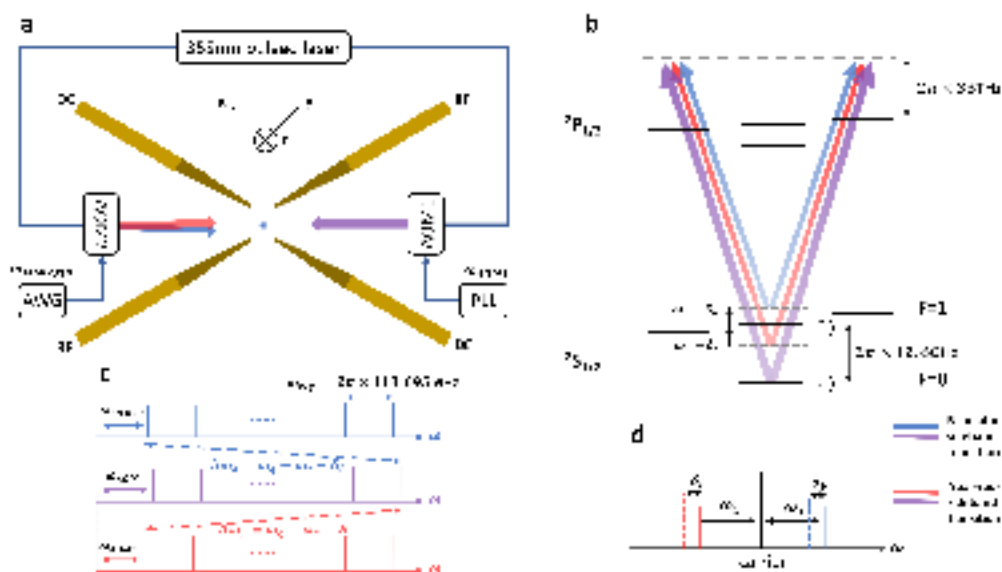
量子信息

一、量子光学

主要完成人：段路明研究组（段路明、蔡明磊、刘子都、赵文定）

首次观测到单离子量子相变

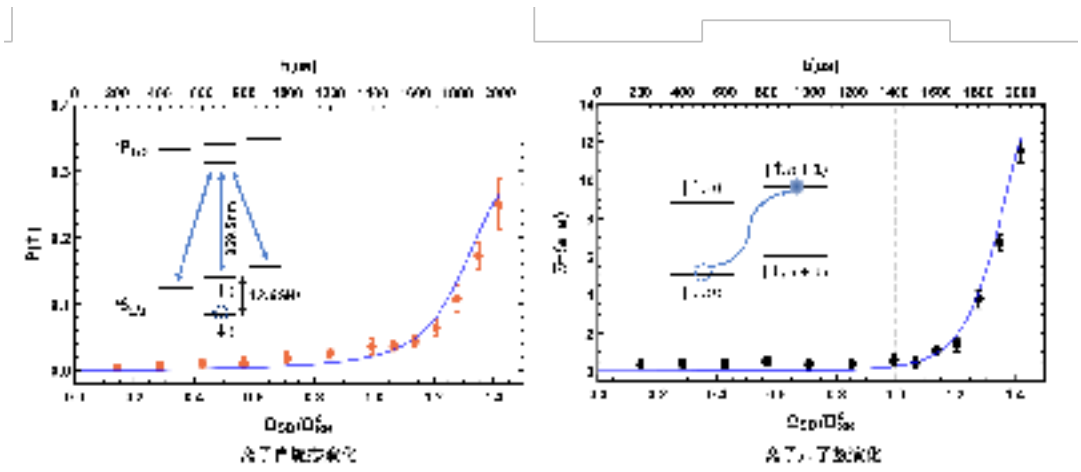
量子拉比模型是典型的光和物质相互作用的全量子模型，该模型历史悠久且内涵丰富。其最早的半经典版本由著名物理学家拉比于上个世纪三十年代提出用于解释微波核磁共振现象。近年来对于其全量子版本的理论研究兴趣一直维持在很高的热度，对于该模型的实验模拟也在多个量子光学实验平台展开。作为最有潜力的量子模拟平台之一，离子阱系统的优势是和环境耦合小，参数可控度高。因此可以在维持必要的相干性的前提下，在多个参数区域模拟量子拉比模型。



离子实验系统示意图

量子相变一般需要多体系统在热力学极限下才能发生，而单离子量子拉比模型可以展示一种新的量子相变，其热力学极限不在依赖于无穷多的离子，而是通过某些系统参数的比例趋于无穷来实现。这种新的量子相变近年来在理论上引起广泛关注，但实验上尚未观测到，因为其需要调控量子系统到极端的参数空间。段路明研究组发展了离子的量子调控方法，利用绝热演化和高纯度的态制备，将量子拉比模型推到极端的参数空间，在此基础上观测了两个序参量的变化，包括离子自旋态和描述离子运动的声子数，通过观测序参量的演化，成功获得了该模型存在量子相变的证据。该实验发展的量子调控方法在离子量子计算与模拟中也有重要应用。

该成果研究论文：M.-L. Cai, Z.-D. Liu, W.-D. Zhao, Y.-K. Wu, Q.-X. Mei, Y. Jiang, L. He, X. Zhang, Z.-C. Zhou, L.-M. Duan. "Observation of a quantum phase transition in the quantum Rabi model with a single trapped ion", Nature Communications 2021.



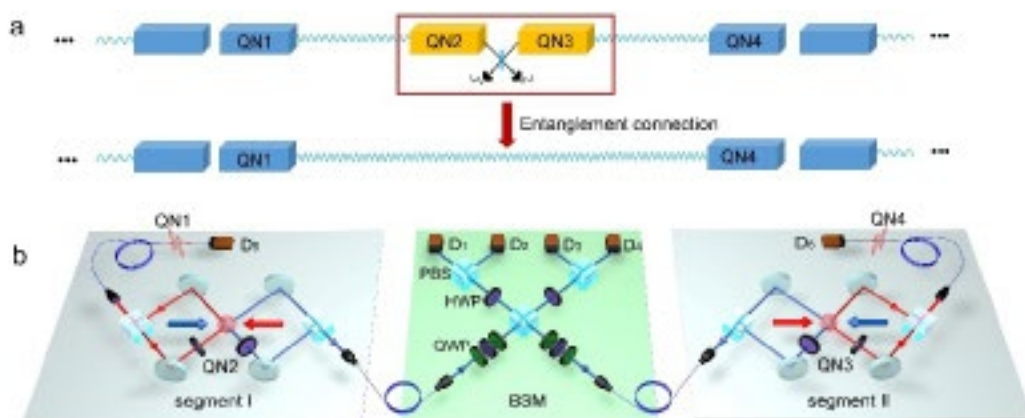
量子拉比模型序参量的演化和量子相变

二、量子通信

主要完成人：段路明研究组（段路明、濮云飞、张胜）

实现量子中继器核心加速步骤

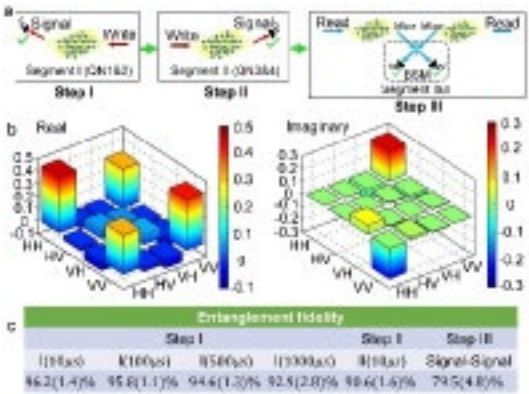
光子在光纤中传播时的指数级衰减是长程量子通讯和大规模量子网络的实现过程中面临的主要问题，而量子中继协议是解决光纤传播损耗的最佳方案。2001 年，段路明教授与合作者提出著名的 DLCZ（Duan-Lukin-Cirac-Zoller）量子中继方案（《自然》，2001），利用原子量子存储器和单光子信道的结合，克服光量子信号在光纤中的指数衰减问题，之后持续成为该领域研究热点。经过世界各国研究团队近 20 年的努力，DLCZ 量子中继协议的实验实现在许多方面已经取得了长足的发展，例如如何在一个小的中继模块中产生量子纠缠的技术已经日趋成熟。但是作为量子中继协议中关键的步骤，即如何将小规模的中继模块通过量子存储器的存储，与邻近的中继模块高效的连接成为一个更大的中继



实验系统示意图

在此项研究中，研究人员通过将超低温铷原子气体囚禁在一维光晶格中，通过光学泵浦将原子制备在对磁场变化不敏感的钟态，并且精确调控施加在原子所在位置的磁场，成功将冷原子量子中继的相干时间提升至数十毫秒量级并能保证读取的量子态具有很高的保真度。此外，结合实时反馈的高速控制系统，通过将先产生量子纠缠的中继模块存储至相邻中继模块也产生量子纠缠之时，实现了相邻两个量子中继模块内部的量子纠缠的异步制备。最后在两个模块之间通过纠缠交换，实现量子中继模块的高效纠缠连接。通过这种方式进行纠缠连接，其连接效率线性正比于单个模块内部纠缠制备所需要的时间，与之前研究中未使用量子存储的同步制备两个中继模块内部的量子纠缠所需要的二次方时间相比，改变了连接效率在规模化上的复杂度；单个量子中继模块内部纠缠制备概率为 0.1% 时，该工作能提高两个量子中继模块纠缠连接的效率 353 倍。当未来量子中继模块从两个扩展到 N 个时，这种效率提升对应了量子中继器对直接传输量子通讯在量子纠缠分发效率上的指数级提升。因此该工作通过使用量子存储，首次实现了不同量子中继模块的按需式纠缠连接，且连接效率得以规模化提升，展现了量子中继器对长程量子通信的核心加速能力。

该成果研究论文: Yun-Fei Pu, Sheng Zhang, Yu-Kai Wu, Nan Jiang, Wei Chang, Chang Li, Lu-Ming Duan. "Experimental demonstration of memory-enhanced scaling for entanglement connection of quantum repeater segments", Nature Photonics 2021.



实验流程和量子中继模块的纠缠连接效率提升

三、超导量子计算

主要完成人：孙麓岩研究组（孙麓岩、蔡伟州、马雨玮、王伟婷）

基于超导量子电路的玻色量子纠错码

量子信息容易受到环境噪声和实验缺陷的影响，这阻碍了实用量子信息处理器的可靠性。而量子纠错（QEC）可以保护量子信息免受噪声影响，这对于通用和可扩展的量子计算至关重要。在许多不同的实验平台中，超导量子电路和超导微波模式中的玻色编码在 QEC 中具有前所未有的潜力。在过去的几年里，玻色编码的 QEC 被证明达到了盈亏平衡点，即逻辑量子比特的寿命得到了增强，超过了组成实验系统的任何单个量子系统的寿命。除此之外，人们还实现了对玻色编码的通用门集和容错操作，将量子信息处理推向了 QEC 时代。

孙麓岩研究回顾了玻色码的最新进展，包括 Gottesman-Kitaev-Preskill(GKP) 编码、猫态编码和二项式编码，并讨论了玻色码在从容错量子计算到量子计量学等各种方向的应用情况。该论文还进一步总结了与玻色码相关的挑战，并展望了玻色码长期的、潜在的研究方向。

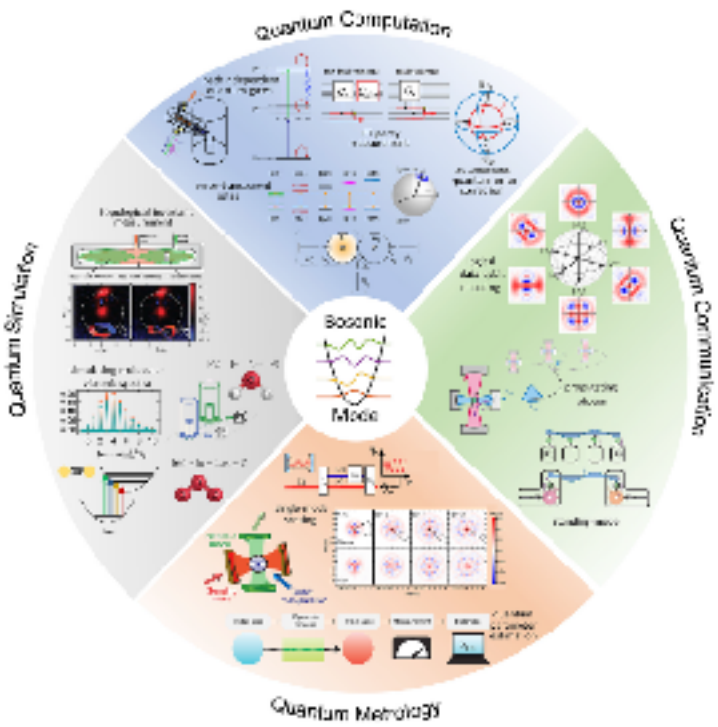


图 1：基于玻色模式的量子应用

玻色模式在许多量子应用中都扮演着不可或缺的角色。图 1 展示了玻色模式在量子计算、量子通信、量子模拟和量子计量学中的广泛应用。关于量子计算，实验上已经演示了基于玻色编码的 QEC 和容错操作。关于量子通信，实验上已经演示了量子态传输、远程纠缠、量子门操作的隐形传输等。单个玻色模式可用于量子计量，用以实现超出经典限制的测量精度。通过构建合适的 QEC 编码有望实现增强的量子传感。此外，玻色模式还可用于模拟固态材料和分子振动。

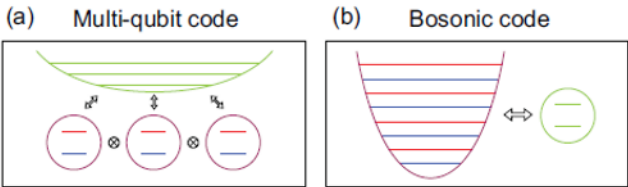


图 2 多量子比特架构与玻色模式架构

通常研究人员在多量子比特架构所组成的高维的希尔伯特空间上进行量子信息处理，而采用单个玻色模式同样可以构成高维的希尔伯特空间。量子比特和谐振子是这两种不同架构的关键元素，在图 2 所示的两种架构中量子比特和谐振子的角色互换了。在基于量子比特的架构中，量子信息存储在量子比特上，谐振子用于耦合或读出量子比特；在玻色模式架构中，量子信息存储在玻色模式中，而量子比特为玻色模式的控制和读出提供必要的非线性。区别于多量子比特架构所采用的表面编码等编码方式进行量子纠错，玻色模式架构可采用单个模式编码并进行量子纠错，极大的减少了实验所需的硬件资源。典型的几种基于单个玻色模式的纠错码有猫态编码、二项式编码和 GKP 编码（图 3）。基于这些玻色编码，无论是理论（1997 年起）还是实验（2015 年起）在近些年都有着飞速的发展。尤其是近几年研究者们相继在实验上演示了基于单个玻色模式的 QEC、量子操作和容错量子操作，同时在多个玻色模式上的量子操作也已实现。为实现通用量子计算，未来研究者们也将继续挑战以及发展基于多个玻色模式上的容错的量子操作（图 4）。

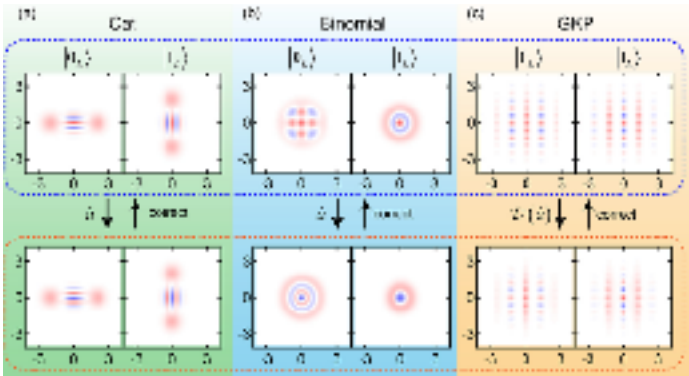
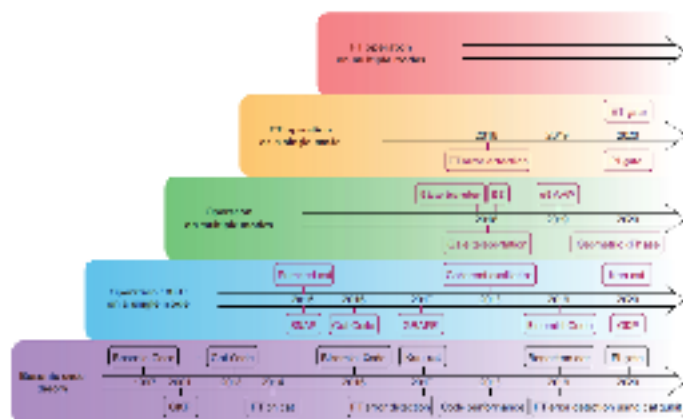


图 3 三种典型的用于量子纠错的玻色编码



尽管实现通用量子计算极具挑战性，但在量子模拟中使用有噪声的量子系统已经引起了许多研究者的兴趣。在 near-term noisy intermediate-scale quantum (NISQ) 时代，早期的量子模拟可以直接应用于探索量子化学、量子优化、材料工程以及凝聚态物理和高能物理的基础研究，也可以激发人们对通用量子计算的进一步研究兴趣。与量子比特阵列相比，玻色子模式在许多物理模型中都是必不可少的，包括玻色采样、分子振动、量子 Rabi 模型、Bose-Hubbard 模型以及非马尔可夫环境的模拟。图 6 展示了已有实验基于玻色模式的分子模拟。

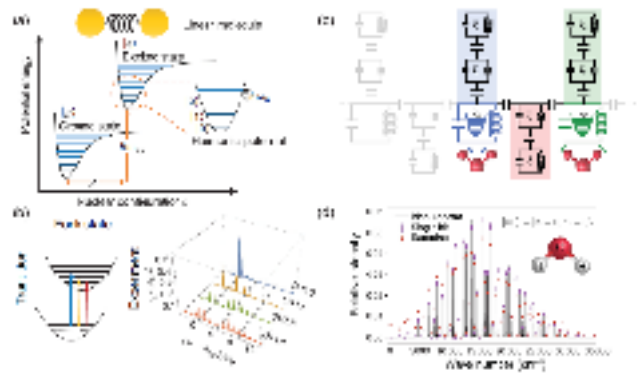


图 6 基于玻色模式的量子模拟

在传统的传感和计量应用中，原子和自旋系统、机械谐振子以及微波和光学模式是最常用的用于检测磁场、加速度、旋转、位移和距离的实验系统。这些系统都可以用玻色模式来描述或近似，因此基于玻色编码的量子增强计量学引起了研究者极大的兴趣。基于单一玻色子模式的量子计量方案也已在离子阱和超导电路中实验实现。特别是，证明了量子增强的、接近海森堡极限的灵敏度（图 7）。另一方面，玻色模式巨大的希尔伯特空间提供了构建 QEC 编码子空间的冗余，该子空间发生错误后会被映射到正交子空间并通过错误纠正恢复。因此，可以通过 QEC 保护编码子空间免受环境噪声的影响来延长探测量子态的相干时间（图 7）。尽管 QEC 增强的量子计量学已经引起了相当大的关注，但它的实验仍然具有挑战性。一个挑战来自所谓的 Hamiltonian-not-in-Lindblad-span(HNLS) 条件，满足此条件则可以构建实现海森堡极限的最佳编码。最近，通过近似 QEC 技术，QEC 在辐射测量中的优势已在超导电路中得到证明，尽管 HNLS 条件并未完全满足，但已证实了玻色模式 QEC 在量子计量学中具有相当大的潜力。

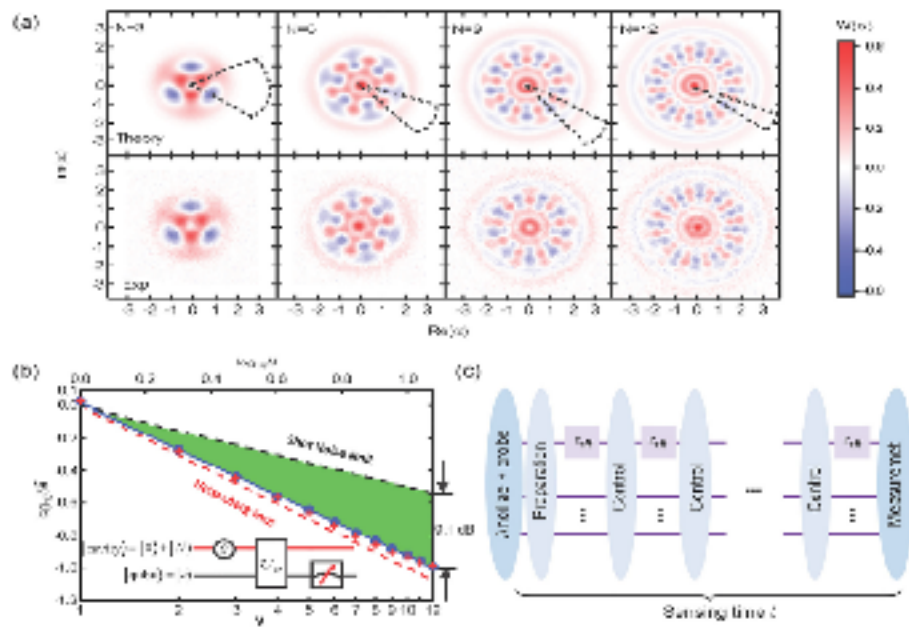


图 7 基于玻色模式的量子计量学

该研究成果论文: Weizhou Cai, Yuwei Ma, Weiting Wang, Chang-Ling Zou, LuyanSun. "Bosonic quantum error correction codes in superconducting quantum circuits", Fundamental Research 2021.

四、实用化 (practical) 量子信息研究

主要完成人：马雄峰研究组（马雄峰、张艺泓、周游、张行健）

对于广义稳定量子纠缠态的有效生成和探测

量子纠缠是量子力学中的重要资源，在很多量子信息处理任务中起着核心作用，包括量子通信、量子计算、量子密码学和量子计量学。量子信息的实验研究致力于实现大规模量子设备，如大规模量子网络和容错量子计算机。该领域的重要目标之一是在大规模量子系统中产生纠缠，也被称为真多体纠缠 (genuine multipartite entanglement, GME)。真多体纠缠的量子系统的规模大小也成为评估不同物理实现下的量子设备的重要标准。

然而，在嘈杂中型量子 (NISQ) 时代，由于量子操作的误差存在，制备和探测大规模真多体纠缠通常是一件困难的事。为了解决这些问题，马雄峰老师和博士生张艺泓、周游、姚班本科生唐一凡提出了一种基于海森堡相互作用的大规模真纠缠生成框架。该框架仅包含非常浅的量子电路，可以直接应用于许多实验平台。为了探测这一量子态的纠缠性质，马雄峰研究组拓展了广义稳定子 (generalized stabilizer) 理论并将其应用到纠缠见证 (entanglement witness) 方法中。具体来说，该研究组分析了目标纠缠态的稳定子性质，并基于此提出了一种搜索算法来优化纠缠见证的测量方案。该算法可对任意纠缠态给出稳定子框架下的最优测量方案，并有优良的噪声鲁棒性。最后，该研究组研究了实验效率和检测鲁棒性之间的权衡关系，以在实验中找到针对特点目标纠缠态最合适的纠缠见证探测方法。

该研究成果论文：Yihong Zhang, Yifan Tang, You Zhou, Xiongfeng Ma. "Efficient entanglement generation and detection of generalized stabilizer states", Physical Review A 2021.

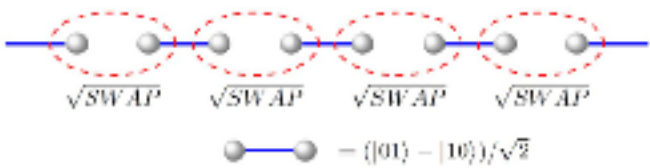


图 1 真纠缠量子态示意图

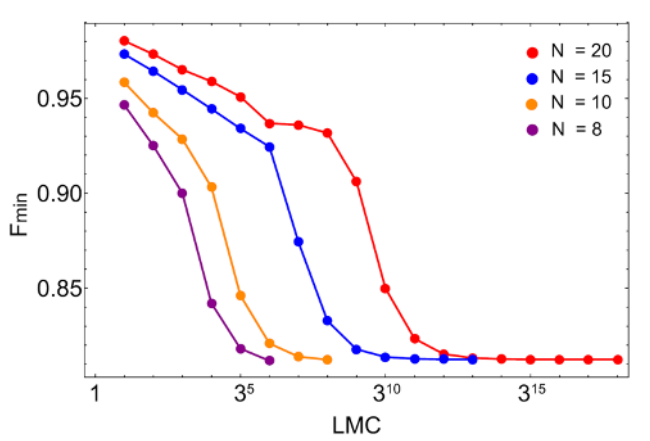


图 2 最优纠缠见证在不同系统规模下的噪声鲁棒性和探测效率关系图

基于超导系统的五比特量子纠错码的实验研究

量子纠错是通用量子计算的重要组成部分，但至今仍没有实验实现通用量子纠错码。为了应对这一挑战，马雄峰老师、赵琦博士和张振博士，本科生刘蕴超，北京大学的袁骁老师和中科大超导量子研究团队实验实现了 $[[5, 1, 3]]$ 纠错码，即所谓的最小完美代码，从而可以纠正通用单量子比特错误。

在实验中，该研究组优化了编码电路，采用超导量子比特阵列实现了基于 $[[5, 1, 3]]$ 码编码的多种典型逻辑量子态，包括魔法态 (magic state) 这一实现非克利福德 (non-clifford) 门不可缺少的资源。编码态的平均保真度为 57.1(3)%，编码空间中的保真度为 98.6(1)%，任意单量子比特错误可通过测量稳定子 (stabilizer) 来识别。该研究组进一步在代码空间内以 97.2(2)% 的保真度实现了逻辑泡利运算。最后，研究组实现了解码电路并以 74.5(6)% 的整体保真度恢复输入态，解码电路共有 92 个量子门。该研究组的工作展示了 $[[5, 1, 3]]$ 纠错码的各关键节点，并验证了用超导量子比特实验实现量子纠错码的可行性。

该成果研究论文：Ming Gong, Xiao Yuan, Shiyu Wang, Yulin Wu, Youwei Zhao, Chen Zha, Shaowei Li, Zhen Zhang, Qi Zhao, Yunchao Liu, Futian Liang, Jin Lin, Yu Xu, Hui Deng, Hao Rong, He Lu, Simon C. Benjamin, Cheng-Zhi Peng, Xiongfeng Ma, Yu-Ao Chen, Xiaobo Zhu, Jian-Wei Pan. " Experimental exploration of five-qubit quantum error correcting code with superconducting qubits", National Science Review 2021.

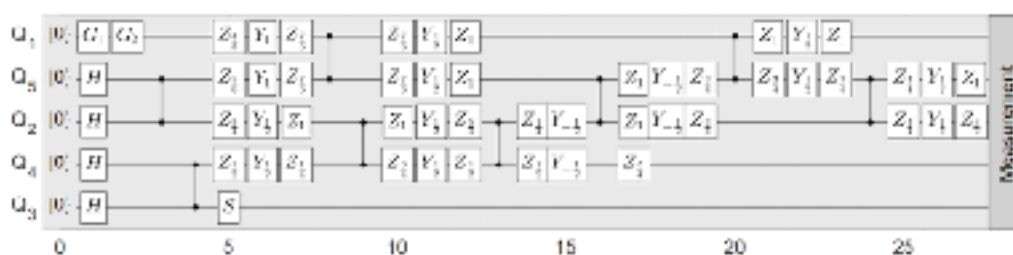


图 3 $[[5, 1, 3]]$ 纠错码的编码线路

设备无关量子随机数扩展

随机性在人类的生产活动中无处不在，也是自然界的基本属性之一，在信息安全、数值模拟、抽样检测等多个领域中有着重要的应用。基于量子物理内禀特性产生的量子随机数被认为是区别于经典随机数的一种真正不可预测的随机性资源。特别的，设备无关的量子随机数产生协议 (device-independent quantum random number generator) 利用了贝尔实验 (Bell test), 不需要对系统内部工作原理进行预先刻画或假设，用户在使用这种量子随机数产生器时，只需根据其输入输出数据的统计结果，便可对随机数的产生情况进行量化判断。一旦统计结果符合协议要求，安全性就得以保证。

然而设备无关随机数产生器需要随机输入，在先前的实验中，输入消耗的随机性多于产生的随机性，从整体上看是随机性的净消耗过程。克服这一问题的途径是进行设备无关量子随机数扩展 (device-independent quantum randomness expansion) 实验。马雄峰老师和博士生张行健与中科大潘建伟团队、南科大范靖云教授等人合作，利用量子概率估计方法 (quantum probability estimation)，基于光学平台，在国际上首次实现了设备无关的量子随机性扩展。在此工作中，团队约在 13.1 小时内产生了 5.47×10^8 比特的随机性，实现了 1.08×10^8 比特的随机性净增加，且可靠性错误不超过 4.6×10^{-10} 。该工作为设备无关量子随机数的实用化发展奠定了坚实基础，被 Physical Review Letters 审稿人给予高度认可，评论为“量子随机数产生 / 随机扩展领域中的开创性工作” (I believe it will be considered a seminal work in the field of quantum random number generation/randomness expansion) 。

该成果研究论文：Ming-Han Li, Xingjian Zhang, Wen-Zhao Liu, Si-Ran Zhao, Bing Bai, Yang Liu, Qi Zhao, Yuxiang Peng, Jun Zhang, Yanbao Zhang, W.J. Munro, Xiongfeng Ma, Qiang Zhang, Jingyun Fan, and Jian-Wei Pan. "Experimental Realization of Device-Independent Quantum Randomness Expansion", Physical Review Letter 2021.

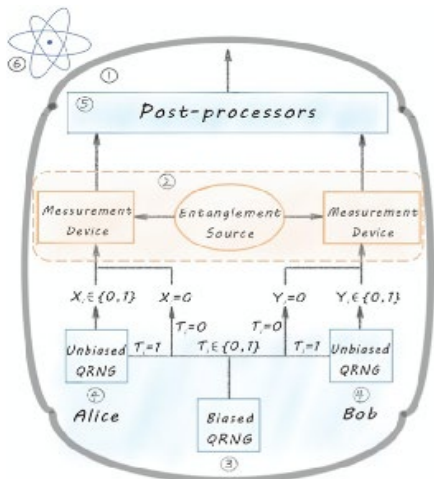


图 4 设备无关量子随机数扩展实验过程示意图

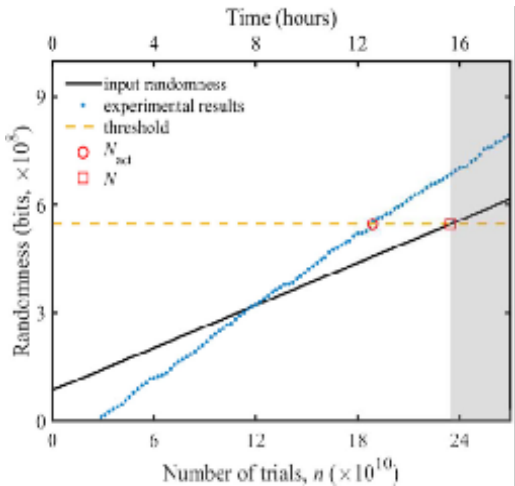


图 5 随机数产生 / 消耗随时间变化曲线。黑实线代表随机性消耗，蓝点线代表随机性产生，在红色圆圈处完成扩展任务

利用不可信设备对相干性度量的估计

由相干性量化的量子态的叠加是区分子量子力学与经典力学的基本特征。相干性在多种不存在经典对应的量子现象中起着至关重要的作用，特别的，相干性是内禀随机性的起源。相干性是众多量子信息处理任务的关键量子资源，如密码学，量子随机数生成，量子热力学等。

量子相干性的估计对于实际任务至关重要。基于理想设备或被很好标定的设备的相干性估计已得到很好的研究。然而，现实测量设备的不完美或故障可能会使估计结果失效。另一方面，设备无关测试 (device-independent test) 在纠缠等多体量子系统特征的见证与量化中，可以在不信任测量设备的情况下得到确切的结果，但在先前的研究中尚不清楚是否可以在相干性这一单体量子特性的探测中使用（半）设备无关测试的方法。对此问题，马雄峰研究组的博士生张行健与本科生刘蕴超、北京大学袁骁助理教授系统地研究了使用不受信任设备的单体相干性见证与估计。在论证了多体设备无关测试无法简单地推广至单体相干性问题的研究中后，该研究组提出了一种新型制备 - 测量 (prepare-and-measure) 方案，可以用来对任意量子态的相干性进行见证与量化估计，并针对相对熵和 l1 范数相干性给出了具体结果。

该成果研究论文: Xingjian Zhang, Yunchao Liu, and Xiao Yuan. "Estimating Coherence Measures with Untrusted Devices", Advanced Quantum Technologies 2021.



图 6 制备 - 测量型的基于不可信测量设备的量子相干性度量估计方案

五、量子人工智能

主要完成人：邓东灵研究组（邓东灵、鲁智德、沈培鑫）

应用神经进化算法实现量子机器学习优化

神经进化 (neuroevolution) 是受动物大脑进化的启发，利用遗传算法来进行神经网络的结构生成，参数更新及整体效率优化。与传统的随机梯度下降算法不同，神经进化不需要计算对于参数的梯度，可实现自动地、逐步地构建神经网络并最终选择出性能最优的深度学习模型。它被广泛用于深度强化学习，自然语言处理，图像识别等问题中。

邓东灵研究组把神经进化算法与量子机器学习线路优化问题结合起来，提出了一种量子神经进化算法。特别地，该研究组在量子线路与有向图之间建立了一个一对一的映射，并基于此映射把寻找合适的量子门序列问题转化为通过马尔可夫过程在相应图中寻找合适路径的问题。通过研究发现，此量子神经进化算法可以找到接近最优的量子变分线路，进而极大地优化量子机器学习使用的量子门个数。为展示此算法相对传统算法的优势，该研究组研究了利用量子分类器进行手写字体识别和拓扑态识别。结果表明，在保持预测精度基本不变的条件下，量子神经进化算法所得量子线路只须已有变分线路的三分之一。

该研究在神经进化与量子机器学习之间架设了新的桥梁，将对今后相关方向的理论和实验研究都产生影响。

该成果研究论文: Zhide Lu, Pei-Xin Shen, and Dong-Ling Deng. “Markovian Quantum Neuroevolution for Machine Learning”, arXiv: 2012.15131v1.

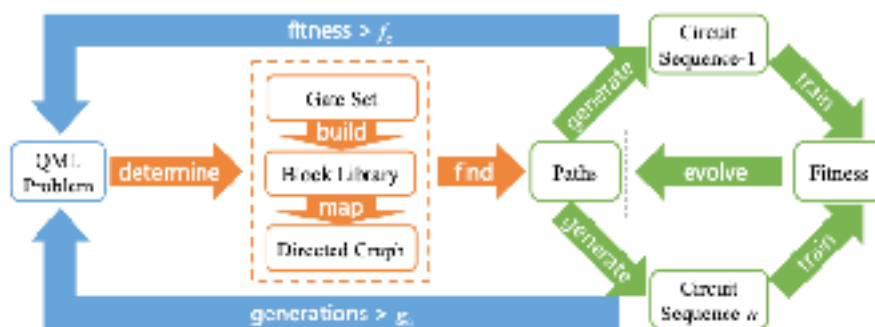


图 1 量子神经进化算法示意图

六、拓扑凝聚态物理

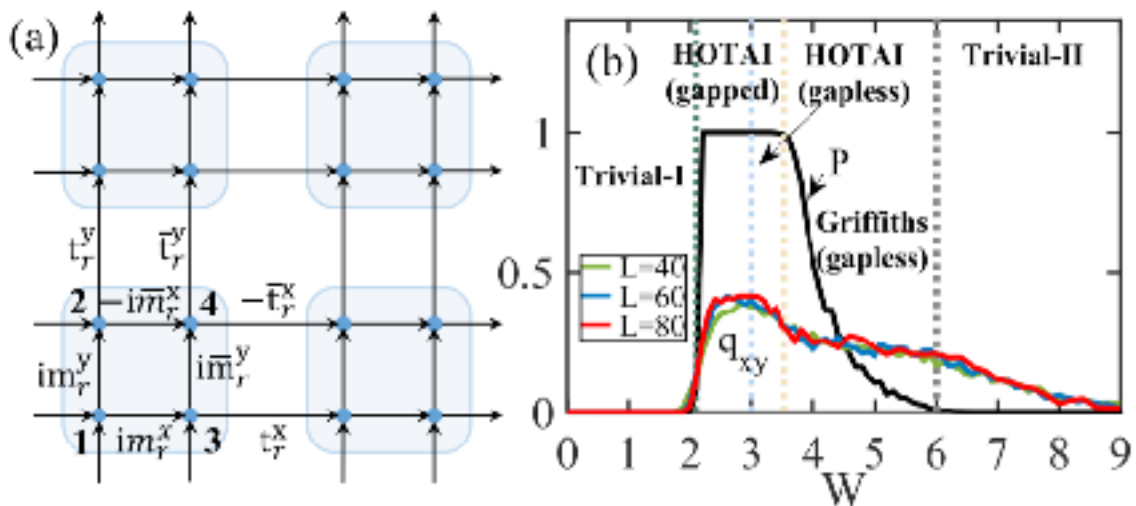
主要完成人：段路明、徐勇研究组（段路明、徐勇、杨炎彬、李楷、王灵昊、戴凝）

首次发现高阶拓扑安德森绝缘体

近年来，高阶拓扑相吸引了人们极大的研究兴趣，而其中大部分研究的是规则的晶格系统。无序是广泛存在的，因此有必要研究无序对系统高阶拓扑的影响。已有研究发现，高阶拓扑绝缘体在较弱的无序下是稳定的。另一方面，无序并非总是破坏系统拓扑，之前的研究发现无序可以从拓扑平庸态诱导一阶拓扑绝缘体，即拓扑安德森绝缘体。因此，无序是否能诱导高阶拓扑安德森绝缘体是一个值得研究的问题。

徐勇研究组研究了具有手征对称性的二维系统中的无序效应，首次发现无序可以驱动从拓扑平庸相到高阶拓扑绝缘体的拓扑相变，这种由无序诱导的高阶拓扑绝缘体被称为高阶拓扑安德森绝缘体。该研究组首次证明了手征对称性可以保护二维系统四极矩的量子化，并通过量子化的四极矩、边界哈密顿量的拓扑以及零能量的角态来表征这种无序诱导的高阶拓扑相。该研究组发现了有能隙和无能隙的高阶拓扑绝缘相，还发现了介于高阶拓扑相和拓扑平庸相之间的临界相，其零能态的局域化性质呈现多分形的特征。最后，该研究组提出了在电路系统中实现并探测高阶拓扑安德森绝缘体的实验方案。这一工作为进一步研究高阶拓扑相中的无序与拓扑的相互影响打开了新的方向。

该成果研究论文：Yan-Bin Yang, Kai Li, L.-M. Duan, and Yong Xu. “Higher-order topological Anderson insulators”, Physical Review B 103, 085408 (2021).

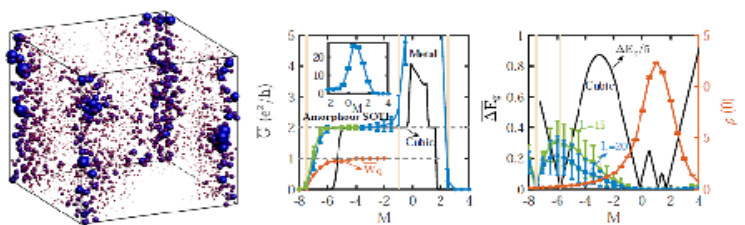


首次发现结构无序诱导的三维二阶拓扑绝缘体

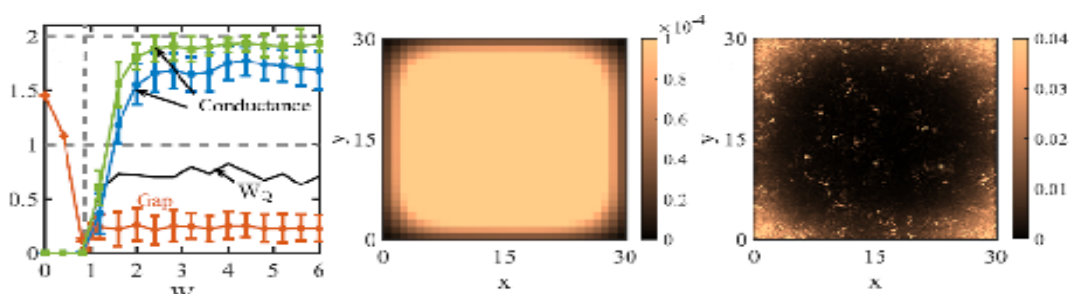
最近，高阶拓扑绝缘体在物理学的各个领域获得广泛关注。考虑一个 n 维系统，这类新型拓扑绝缘体具有 $n-m$ ($1 < m \leq n$) 维无能隙边界态。由于无定形材料在自然界中广泛存在，一个很自然的问题是无定形系统中是否可以存在高阶拓扑绝缘体。之前的研究表明三维二阶拓扑绝缘体需要晶格对称性保护。考虑到无定形系统没有晶格对称性，这似乎意味着三维系统中不能存在二阶拓扑绝缘体。

在此项工作中，徐勇研究组发现三维无定形体系中可以存在二阶拓扑绝缘体，并且结构无序可以诱导出二阶拓扑绝缘体。这意味着在某些条件下无定形系统相比于晶格系统更容易出现二阶拓扑绝缘体。具体而言，该研究组计算了三维随机点阵的二端电导，发现在一个参数区间内，平均电导量子化到 $2e^2/h$ ，表明该三维体系的棱上存在无能隙的边界态。另外，该研究组发现这种绝缘体由四极矩的绕数保护，因此不需要晶格对称性。研究人员还发现在一个参数范围内，在平庸晶格体系中加入格点位置的随机偏移会引起二端电导从 0 到 $2e^2/h$ 的跃变。另外，随着结构无序的增加，局域态密度表明链边界态的出现。以上证据表明结构无序可以诱导出二阶拓扑绝缘体。最后，该研究组考虑时间反演对称性体系，提出两种新的拓扑不变量在实空间刻画二阶拓扑绝缘体的性质。具体计算也表明二阶拓扑绝缘体也可以存在于三维具有时间反演对称性的无定形系统中。此项工作表明高阶拓扑相可能在无定形体系中广泛存在，对于进一步理解无序、对称性和拓扑的关系具有重要意义。

该成果研究论文: Jiong-Hao Wang, Yan-Bin Yang, Ning Dai, Yong Xu. "Structural Disorder Induced Second-order Topological Insulators in Three Dimensions", Physical Review Letter 126, 206404 (2021).



所研究体系链边界态示意图和计算结果



结构无序诱导的三维二阶拓扑绝缘体



清华大学 交叉信息研究院
Institute for Interdisciplinary Information Sciences, Tsinghua University

Edited by Kailin Li

Reviewed by Luming Duan, Jian Li, Xiamin Lv