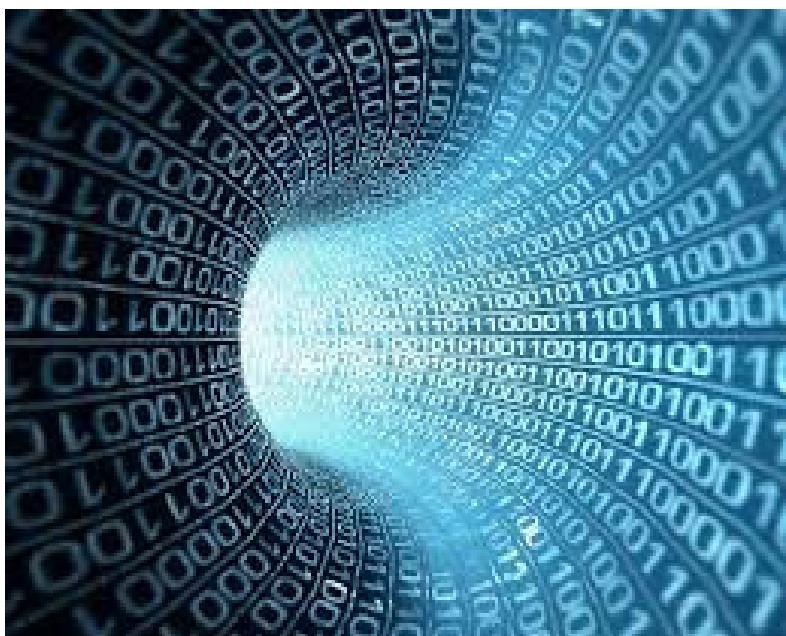


交叉信息研究院

学术科研简报



2018年 1-7月

目录

智能+&金融科技

- 02 计算生物学（曾坚阳研究组）
- 04 网络科学（徐葳研究组）
- 05 能源经济学（吴辰晔、于洋研究组）
- 06 随机建模与优化（黄隆波研究组）
- 08 理论计算机科学（段然研究组）
- 09 计算经济学（唐平中研究组）
- 10 理论计算机科学（李建研究组）

量子信息

- 12 量子计算与网络（段路明研究组）
- 13 离子量子计算（金奇奂研究组）
- 16 量子密码（马雄峰研究组）
- 18 超导量子计算（孙麓岩研究组）
- 19 量子人工智能（邓东灵研究组）
- 20 量子信息理论（魏朝晖、尹璋琦等）

计算生物学（曾坚阳研究组）

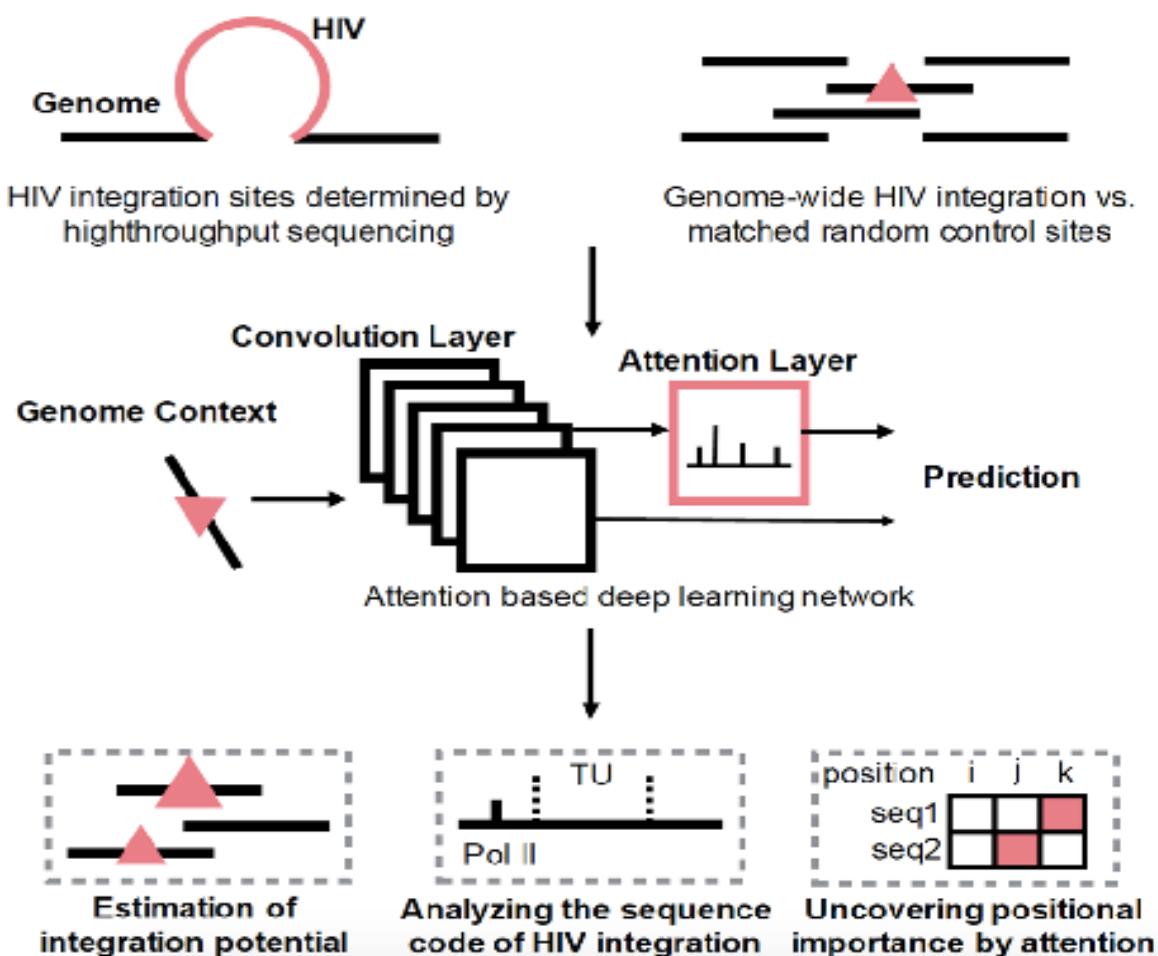
主要完成人：曾坚阳、洪礼翔、肖安

DeepHINT: 利用深度学习注意力机制研究HIV病毒基因组整合位点

根治HIV的最大挑战在于病毒基因组在人体基因组中的整合而产生的“潜藏病毒库”。在此项工作中，曾坚阳研究组应用深度学习技术，实现了HIV病毒整合位点的准确预测。同时，为了增强模型的可解释性，从而更好地提供对HIV整合位点选择的机理解释，研究组引入了注意力机制。结果表明，曾坚阳研究组设计的DeepHINT (Deep learning for HIV INtegraTion) 模型可以将注意力集中在生物功能性位点，并且富集了许多可能的调控序列单元(regulatory motif)，为后续的HIV整合机制研究提供了可能的方向。

该成果论文“DeepHINT: Understanding HIV-1 integration via deep learning with attention”发表在 *bioRxiv - the preprint server for biology* 上。

*Hailin Hu, An Xiao, Sai Zhang, Yangyang Li, Xuanling Shi, Tao Jiang, Linqi Zhang, Lei Zhang, Jianyang Zeng.
DeepHINT: Understanding HIV-1 integration via deep learning with attention.
bioRxiv. 2018.*

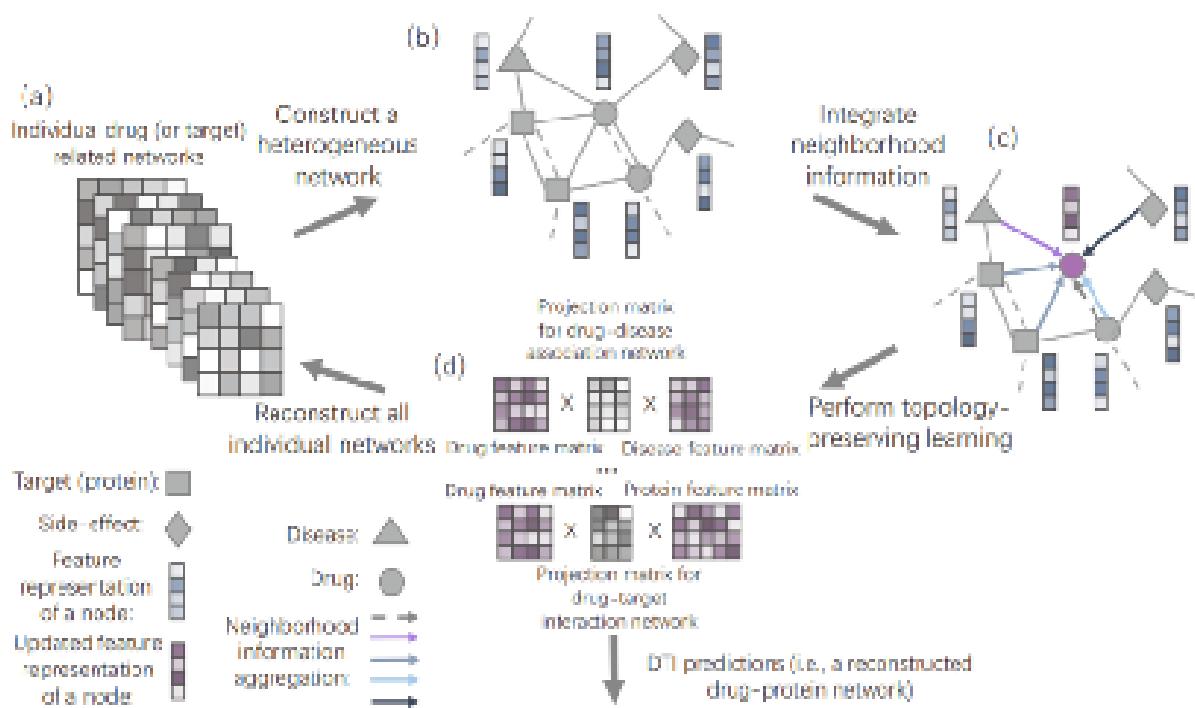


NeoDTI: 基于神经网络的异构网络信息整合及其在药物-靶标相互作用预测上的应用

曾坚阳研究组预测潜在的药物-靶标相互作用有助于加速药物研发并节省成本，具有极大的科研与市场价值。在各类药物-靶标预测算法当中，基于系统生物学的方法通过发掘药物、靶标在各种生物网络（例如：蛋白质相互作用网络、药物-疾病关联网络等）中的信息与特征，对目标进行预测。现有的基于系统生物学预测算法主要受限于两方面（1）在从生物网络中提取药物、靶标的特征这一步骤中，主要依照领域知识人工提取。因而所提取的特征并不能保证一定适用于预测目标；互作用关系建模。曾坚阳研究组提出基于图卷积（graph convolution）操作的神经网络NeoDTI对药物、靶标相关的异构网络进行建模。（2）预测模型主要基于逻辑回归、矩阵分解等线性或者双线性方法，模型的表达力不足以对药物-靶标相NeoDTI通过图卷积操作使得异构网络内的顶点之间相互传递信息（特征）并

进行药物-靶标相互作用预测。药物、靶标的特征以及神经网络的参数通过端到端（end to end）训练得到，无需人工设计特征。计算实验表明NeoDTI在预测性能上显著优于现有方法。该研究成果“NeoDTI: neural integration of neighbor information from a heterogeneous network for discovering new drug–target interactions”发表在*Bioinformatics*上。

Fangping Wan, Lixiang Hong, An Xiao, Tao Jiang, Jianyang Zeng; NeoDTI: neural integration of neighbor information from a heterogeneous network for discovering new drug–target interactions. Bioinformatics, bty543

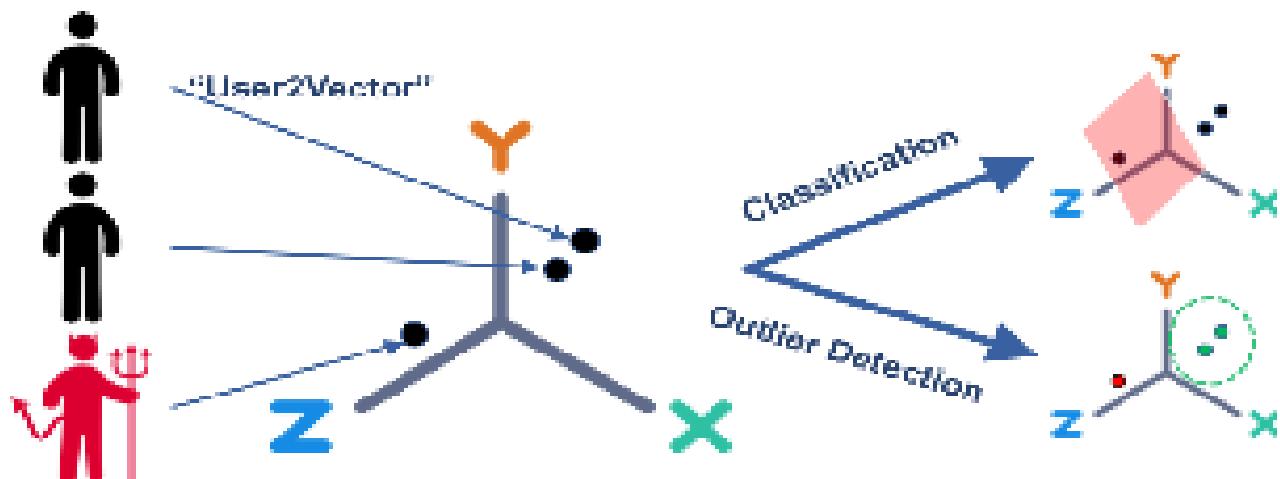


NeoDTI 流程图

网络科学 (徐葳研究组)

主要完成人：徐葳、王国赛

反数据转售

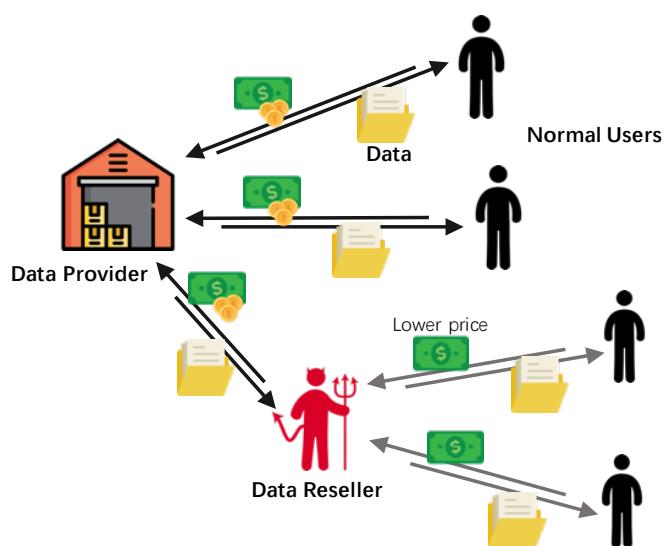


交叉信息院徐葳助理教授研究组和慧安金科（北京）科技有限公司的合作研究论文“Do Not Pull My Data for Resale: Protecting Data Providers Using Data Retrieval Pattern Analysis”发表于Sepecial Interest Group on Information Retrieval 2018会议。

该论文聚焦于数据供应服务，首次提出了“反数据转售”问题，并给出了系统的解决方案。多年以来，数据供应商通过提供基于网页或基于API的专业数据查询服务，对金融、经济、学术等领域作出重要贡献。而在数据供应商的用户群体中，存在着部分滥用数据查询API爬取并转售大量数据从而获利的数据转售者。这类异常用户损害了数据供应商的利益，且可能对数据版权造成侵犯。为了解决“数据转售”问题，研究者们结合特征工程和机器学习算法，创新地提出了一种通过对用户使用数据服务的行为进行建模分析检测数据转售者的方案。在特征工程方面，研究者们富有洞见地归纳出数据转售者行为模式规律，并设计了一系列能够有效刻画转售行为的特征。面对用户群体标签稀缺的问题，研究者们结合有

监督学习和无监督学习方法，利用异常检测算法有效地在无标签用户群体中挖掘出数据转售者。在数据供应商提供的约9000人的数据集上，研究者们的方法得到了高质量且具可解释性的结果，也获得了有关数据转售行为的新发现。目前，研究者们已将该方法作为服务提供给了国内某知名数据供应商。

这一研究协助数据服务商解决了实际应用场景中的数据转售问题，同时在信息检索领域开拓了新的研究方向，对未来用户行为分析领域的研究和实践具有积极的启发意义。



Guosai Wang, Wei Xu, Ling Huang, Shiyang Xiang, Yitao Duan.
Do Not Pull My Data for Resale: Protecting Data Providers Using
Data Retrieval Pattern Analysis. SIGIR 2018

能源经济学（吴辰晔、于洋研究组）

主要完成人：吴辰晔、于洋

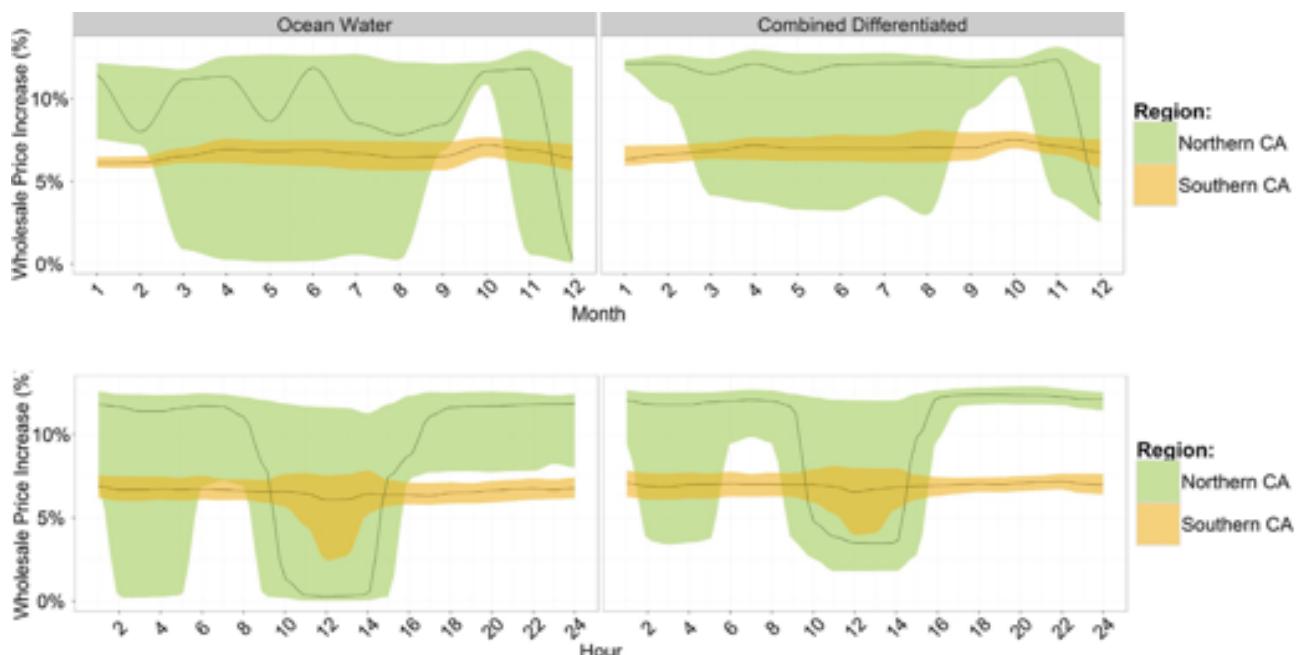
温室气体减排的系统性生态和民生影响

减缓全球气候变化是国际环境治理的急迫任务。大量研究着眼于温室气体排放的核算和减排策略的设计，对于温室气体减排的生态和民生影响却研究不多。该研究组在一系列研究中，分析了温室气体排放在不同系统中和其他民生和环保障碍。与此同时，研究组通过对电力系统的分析，发现温室气体减排目标在局部地区与海洋生态保护的矛盾。保护海洋生态要求对沿海核电厂和火电厂的冷却水排放进行限制，这会迫使电力系统更多的启用高二氧化碳排放的机组。另一方面，研究组在针对我国的研究中发现，导致我国温室气体排放量升高的大部分原因是由于我国中低收入基层的膳食营养结构倒退导致的。基于1997-2011年的数据研究发现虽然我国人民普遍

收入增加。但是由于饮食习惯和不同种类食材的可获得难易程度不同，造成我国中低收入阶层的饮食结构不尽合理。这种不合理既不利于居民身体健康也造成了过多的碳排放，这意味着对于我国中低收入阶层的膳食结构改善，能同时对居民身体健康和温室气体排放降低产生正面影响。于洋、吴辰晔研究组在 *Applied Energy* 杂志发表了“Balancing marine ecosystem impact and freshwater consumption with water-use fees in California’s power markets: An evaluation of possibilities and trade-offs”，以及在 *Nature Sustainability* 发表题为“*The environmental impacts of rapidly changing diets and their nutritional quality in China*”的文章。

Jose Bolorinosa, Yang Yu, Newsha K. Ajami, Ram Rajagopal. Balancing marine ecosystem impact and freshwater consumption with water-use fees in California’s power markets: An evaluation of possibilities and trade-offs.
Applied Energy 226 (2018): 644-654

Pan He, Giovanni Baiocchi, Klaus Hubacek, Kuishuang Feng, Yang Yu. The environmental impacts of rapidly changing diets and their nutritional quality in China.
Nature Sustainability 1.3 (2018): 122



随机建模与优化 (黄隆波研究组)

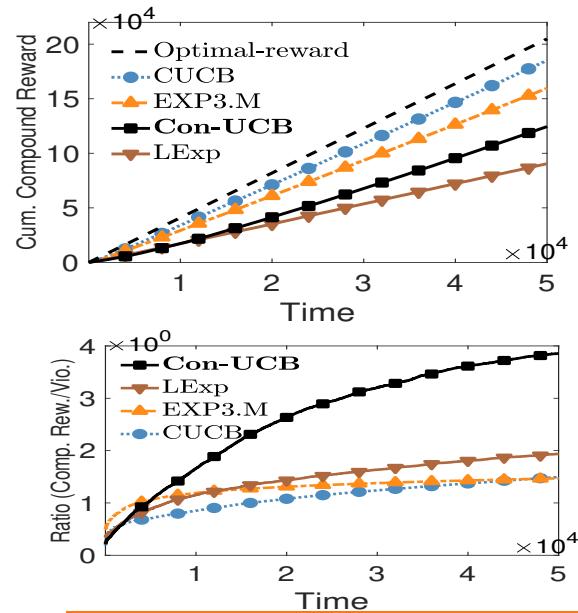
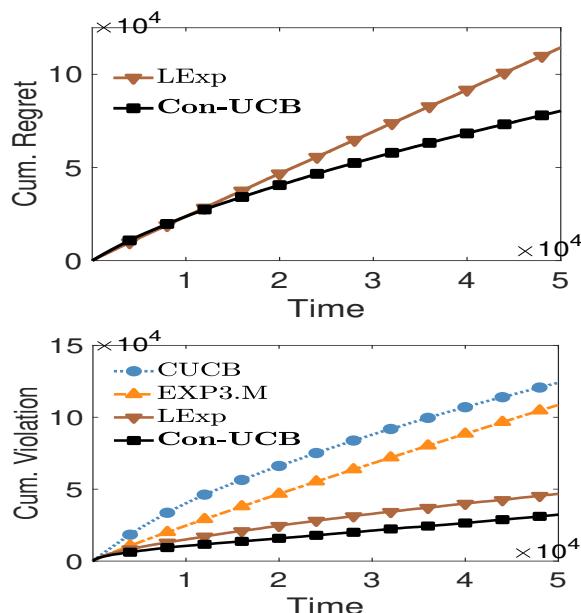
主要完成人：黄隆波、陈琨、郝天一

不止于点击率：基于多层反馈的网络链接选择

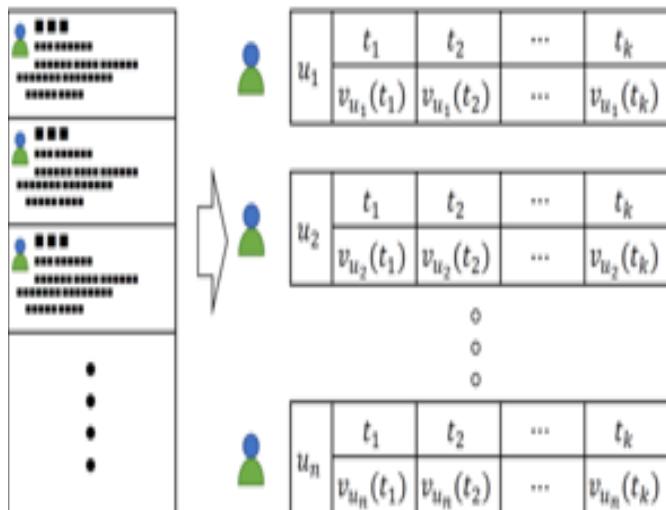
在互联网的组织结构中，网络链接占据着重要的地位，它们把纷繁复杂的内容组织起来，为网站和移动应用吸引用户，创造利润。这些链接可以是广告、新闻、商品推荐等等。电商如Amazon和淘宝会推荐商品来提高销量；社交网络如Facebook和Google+会持续推送热门话题和好友动态来增加用户活跃度；在线媒体如HBO和iQIYI会展示目前热门的电影和电视剧来吸引订阅。很多链接在本质上都有一种多层反馈结构，向研究者提供了有关用户行为的重要信息。第一层反馈可以是链接的点击率，反映链接本身的吸引力；第二层反馈来自于链接指向的页面，反映用户对链接指向内容的喜好程度。很多情况下，点击率反映链接的受欢迎程度，而真正带来利益的购买行为属于第二层反馈。对于网站而言，这两种收益都很重要，而不能仅仅关注链接点击率。基于以上发现，黄隆波研究组和香港中文大学的吕自成研究组合作研究了满足第一层期望总收益

不少于一定界限的条件下最优化；第二层总收益的链接选择问题。由于每个链接的多层收益具有随机性，而其分布未知，需要进行在线学习和优化。该研究首创地将该问题阐述为受限多臂老虎机问题，并提出了Con-UCB算法。研究证明了与拥有全部信息的离线最优算法相比，Con-UCB 算法的两层收益累积损失都是亚线性的，即Con-UCB 算法可以得到渐进最优选择。基于实际数据的实验也验证了Con-UCB 算法相比已有算法，包括也是由他们在去年提出的LExp 算法的优势。该研究成果“Beyond the Click-Through Rate: Web Link Selection with Multi-level Feedback”发表于 the 27th International Joint Conference on Artificial Intelligence and the 23rd European Conference on Artificial Intelligence上。

K. Chen, K. Cai, L. Huang, and J. C. S. Lui, Beyond the Click-Through Rate: Web Link Selection with Multi-level Feedback. IJCAI-ECAI 2018



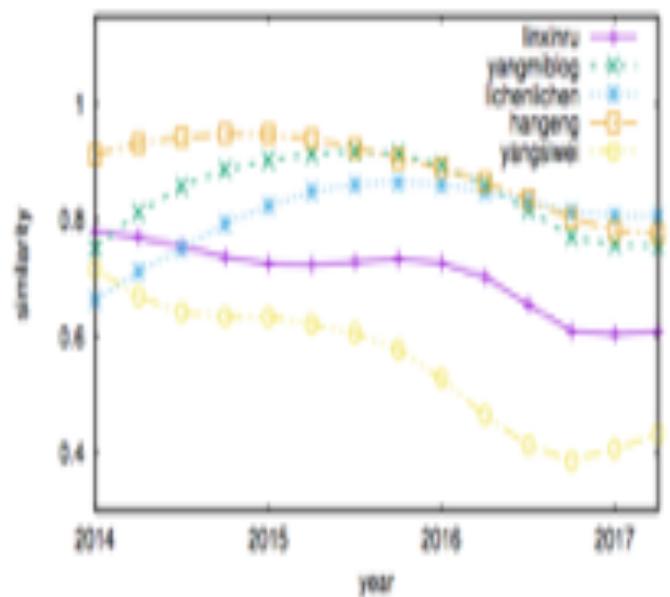
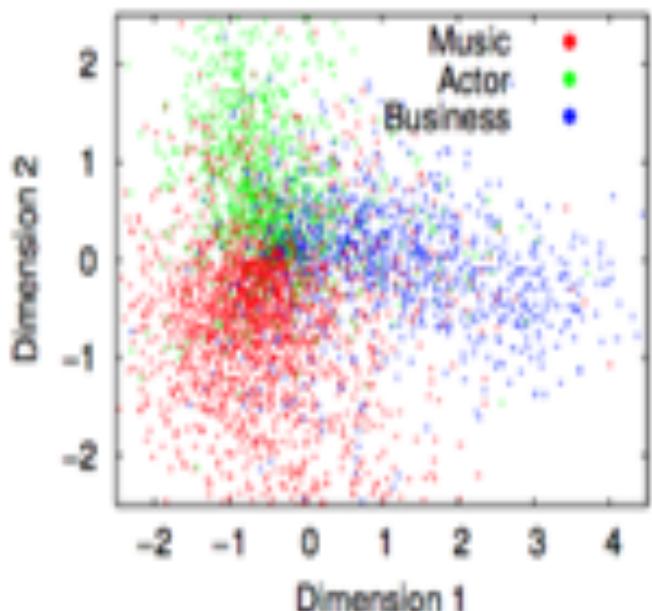
基于社交互动活动的在线社交网络中的时变用户向量化方法



可时变用户向量化示意图

黄隆波研究组在 the 27th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI) 上发表了题为“Social Interaction Activity based Time-Varying User Vectorization Method for Online Social Networks”的文章。该论文主要介绍了在线社交网络中的用户建模问题。在论文中，黄隆波研究组提出了一个基于社交网络互动的时变用户向量化模型 (Tuv)。Tuv模型可以良好地对用户的特征进行建模，并应用于现实中的社交网络用户分析。使用Tuv模型，可以通过用户社交互动活动来提取用户的隐含特征，并生成随时间变化的用户向量。在Tuv模型中，使用的技术包括 word2vec、负样本采样 (negative sampling) 以及随机梯度下降 (SGD) 等。Tuv模型考虑了多方面的用户间特征信息，包括用户互动信息、文本信息以及时间信息等，并且考虑到了用户在不同时间段内的特征向量变化情况。

Tuv模型可以被应用到众多在线社交网络领域内的现实应用问题，如用户关注度估计、用户相似性分析以及用户职业预测。该工作使用了新浪微博中的微博与互动数据作为目标，并设计了一系列实验，证明Tuv模型可以被良好地应用于上述的现实应用中。



T. Hao and L. Huang. A Social Interaction Activity based Time-Varying User Vectorization Method for Online Social Networks. IJCAI 2018

理论计算机科学 (段然研究组)

主要完成人: 段然、辜勇、章乐、谢远航、吕凯风、任瀚林、武弘勋

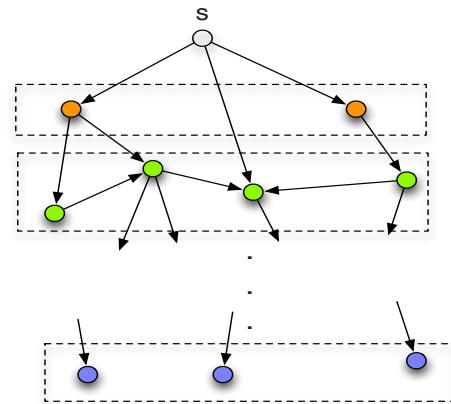
图论算法的新进展

最宽路 (Widest path, 也叫瓶颈路Bottleneck path) 问题是图论算法领域最经典的问题之一。众所周知, 一条路的宽度是由其最窄的部分所决定, 所以最宽路问题就是要找到连接两点的最窄边最宽的路。与最短路问题一样, 单源最宽路问题可以用经典的使用斐波那契堆的Dijkstra算法解决, 其时间复杂度为 $O(m+n\log n)$, 其中 m 是边数, n 是点数。当 $m=O(n)$ 时与比较模型下的排序时间相同。如何在比较模型下突破这个时间复杂度就成了重要而且非常有趣的问题。无向图中的最宽路问题可以归约到最小生成树 (minimum spanning tree) 问题上, 而早在70年代最小生成树的时间复杂度就突破了排序限制[Tarjan 1975, Yao 1975]。有向图中的点对点最宽路可以用简单的分治法做到 $O(m \log^* n)$ [Gabow & Tarjan 1987] ($\log^* n$ 表示多少次 \log 操作能把 n 降到2)。但是有向图单源最宽路问题, 即找到从一点到其它所有点的最宽路, 却一直没有突破 $O(m+n\log n)$ 的时间界限。

交叉信息院段然助理教授与硕士生谢远航以及姚班计科50班吕凯风合作发表的论文给出了时间复杂度为 $O(m\sqrt{(\log n)} + \sqrt{(mn\log n \log\log n)})$ 的比较模型下的单源最宽路算法, 成功突破了排序界限。该论文发表在欧洲理论计算机会议ICALP18。研究组的算法通过随机划分边权对所有点进行分治, 并且对最宽路问题的性质做了更加深入的分析。目前在将要进入清华学习的武弘勋同学的帮助下, 时间复杂度已能做到 $O(m\sqrt{(\log n)})$ 。

另外, 交叉信息院段然助理教授与计科60班的任瀚林同学合作的论文给出了更快的有限边最短路 (Bounded-leg shortest path) 问题的近似算法。之前最快的计算所有点之间对所有边长限制的近似最短路算法的时间复杂度是 $\tilde{O}(n^3\epsilon^{-1})$ [Duan & Pettie 2008], 而段然研究组

的算法利用了快速矩阵乘法, 将时间复杂度降为 $\tilde{O}(n^{(3+\omega)/2}\epsilon^{-1.5}\log W)=O(n^{2.686}\epsilon^{-1.5}\log W)$, 其中 $\omega < 2.373$ 是矩阵乘法的时间复杂度的指数, W 为整数边权上界。可以看到 $\tilde{O}(n^{(3+\omega)/2})$ 是每两点间最宽路算法的时间复杂度, 而有限边连通性问题可以简单地归约到最宽路问题上, 所以这个算法已经达到常数近似下的最优。



段然助理教授与研究生章乐、辜勇同学合作发表的论文给出了更快的计算所有点间的非递减路径问题的算法。给定一个有权的有向图, 一条非递减路径是指路径上的边的权值形成一个非递减的关系。之前关于该问题的最好结果是 $\tilde{O}(n^{(9+\omega)/4})=O(n^{2.844})$ [Vassilevska Williams 2008]。该研究组第一个算法将该时间复杂度改进至 $\tilde{O}(n^{2+\omega/3})=O(n^{2.791})$ 。同时, 利用长方形矩阵乘法加速法, 研究组给出一个更好一点的结果 $O(n^{2.78})$ 。

Ran Duan, Kaifeng Lyu, Yuanhang Xie.
Single-Source Bottleneck Path Algorithm Faster than Sorting
for Sparse Graphs. ICALP 2018

Ran Duan, Hanlin Ren. Approximating All-Pair Bounded-Leg Shortest Path and APSP-AP in Truly-Subcubic Time.
ICALP 2018

Ran Duan, Yong Gu, Le Zhang. Improved Time Bounds
for All Pairs Non-decreasing Paths in General Digraphs.
ICALP 2018

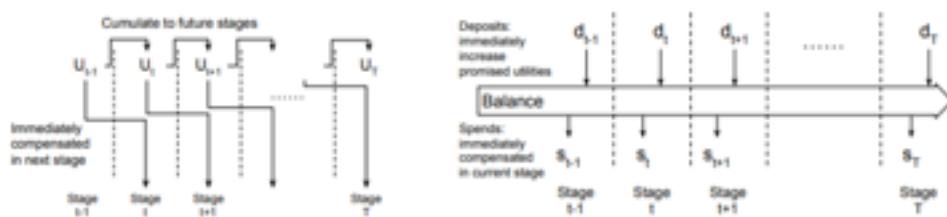
计算经济学（唐平中研究组）

主要完成人：唐平中、左淞

动态拍卖机制设计

2018年上半年，唐平中副教授领导的计算经济学实验室取得一系列科学进展。在论文发表方面，截止2018年7月份，发表A类论文11篇，其中国际计算与经济年会（ACM-EC-18）2篇（中国仅2篇），国际智能体与多智能体年会（AAMAS-18）5篇（“Pingzhong Tang”成为大会的关键词），万维网会议（WWW-18）2篇，美国人工智能年会（AAAI-18）2篇；在产学研结合方面，获得阿里巴巴全球创新奖的资助，于淘宝的搜索事业部推进强化机制设计技术；在实验室的努力和学院的资助下，上半年申请发明专利

7项。该实验室博士生左淞，指导老师唐平中与谷歌纽约研究员的论文“Non-clairvoyant dynamic mechanism design”发表于EC-18，并作口头报告。该论文的期刊版本正在经济学最顶级期刊 *Econometrica* 做第一轮修改。论文定义了一类新的动态机制设计的问题，即拍卖者设计的机制不能利用将来的分布信息。在这个假设下，拍卖者能否设计近似最优收益的机制？文章提出了一类通用的名为“银行账户”机制，证明对最优收益的常数倍近似。该机制可通过打折券的方式进行实现，具有较强的应用价值。



Yulong Zeng, Pingzhong Tang. The price of prior dependence in auctions. ACM EC 2018

Vahab Mirrokni, Renato Paes Leme, Song Zuo, Pingzhong Tang. Non-clairvoyant dynamic mechanism design. ACM EC 2018

Weiran Shen, Pingzhong Tang, Yulong Zeng. A Closed-Form Characterization of Buyer Signaling Schemes in Monopoly Pricing. AAMAS 2018

Weiran Shen, Pingzhong Tang, Yulong Zeng. Buyer optimal distributions. AAMAS 2018

Yuan Deng, Weiran Shen, Pingzhong Tang. Coalitional Permutation Manipulations in the Gale-Shapley Algorithm. AAMAS 2018

Qingpeng Cai, Pingzhong Tang, Yulong Zeng. Ranking mechanism design for price-setting agents in e-commerce. AAMAS, 2018

Pingzhong Tang, Dingli Yu. Balanced outcomes in wage bargaining. AAMAS, 2018

Mengjing Chen, Weiran Shen, Song Zuo, Pingzhong Tang. Optimal vehicle dispatching schemes via dynamic pricing. WWW-2018

Qingpeng Cai, Aris-Filos Ratzikas, Yawei Zhang, Pingzhong Tang. Reinforcement mechanism design for e-commerce. WWW-2018

Qingpeng Cai, Aris-Filos Ratzikas, Yawei Zhang, Pingzhong Tang. Reinforcement mechanism design for fraudulent behavior in e-commerce. AAAI-2018

Yuan Deng, Weiran Shen, Pingzhong Tang. Coalition manipulations of the Gale-Shapley algorithm. AAAI-2018

理论计算机科学 (李建研究组)

主要完成人：李建、吴旋、金逸飞、占玮、傅昊、黄棱潇、姜少峰

一般度量空间中大规模数据聚类问题核心集的高效构造算法

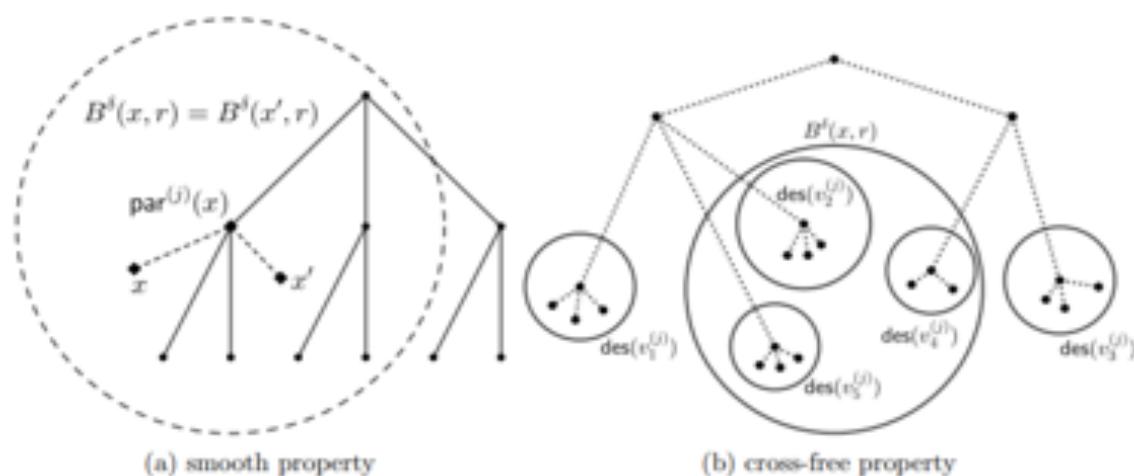
核心集技术是当前用于大规模数据聚类问题一个主要技术。即通过采样的方法，得到大数据的一个很小的子集，使得在这个子集上的聚类结果和原大数据的结果近似相同。这个子集即称为核心集(coreset)。前人的算法多是集中在欧式空间中。李建研究组提出了第一个有效的一般度量空间中的一般聚类问题构造核心集的算法，且核心集大小和空间的doubling维度有关。

李建研究组建立了由距离引起的范围空间的doubling维度和VC维度间的一个关系。事实上，人们可以很容易地构造实例，使得doubling维度和VC维度中任何一个都不能小于另一个的某个函数。研究组证明如下有趣的结论：如该成果研究组成员允许距离函数d的扰动，则VC维度可以有关于doubling维度的上界的。这是两个重要的维度（一个是几何维度，一个是组合维度）间的一个关系，具有独立的理论意义，可能会找到其他应用。

此外，李建研究组改进了[Feldman and Langberg, STOC11]中关于 ϵ -approximation和robust coresets之间的关系。同时，通过扩展该组的coreset，该组可以加速Friggstad等人在FOCS 2016中关于聚类问题的局部搜索算法。

文章发表于理论计算机会议FOCS 2018。作者为黄凌潇（原交叉信息院博士生，现EPFL博士后），姜少峰（Weizmann Institute博士后），李建（交叉信息院副教授），吴旋（交叉信息院硕士生）。文章部分工作在黄凌潇仍为交叉信息院博士生、姜少峰在交叉信息院访问时完成。

Lingxiao Huang, Shaofeng H.-C. Jiang, Jian Li, Xuan Wu. *Eps-Coresets for Clustering (with Outliers) in Doubling Metrics*. FOCS 2018



解决Yao-Yao图相关未解决问题

姚期智院士1982年提出了一种建立最小生成树的技术，并设计了称为Yao图的几何图。研究者发现Yao是拓展图Spanner（即任意2点间图上最短路距离接近2点间欧几里得距离）。但Yao图中的点有可能有很大的度数，这在无线网络应用中是一个可能的缺点。Xiangyang Li 和 Pengjun Wan 在02年提出了用2步Yao图的构造方法得到的更稀疏的图，称为Yao-Yao图。该图在无线网络中有重要的应用。但Yao-Yao图是否是拓展图一直是一个未解问题。研究者猜想所有Yao-Yao图应该都是拓展图。该问题计算几何Open Problem project 中的 Problem 70 (<http://cs.smith.edu/~orourke/TOPP/P70.html>)。李建研究组利用分型理论，构造了一个接近40页的反例，否定了该猜想，即Yao-Yao图可能不是拓展图。该成果发表于计算几何年会SOCG2018。作者是交叉信息院博士毕业生金逸飞、副教授李建、姚班本科生占玮（现Princeton大学博士研究生）。

Yifei Jin, Jian Li, Wei Zhan. *Odd Yao-Yao Graphs are Not Spanners*. SoCG 2018

Problem 70: Yao-Yao Graph a Spanner?	
Statement	
Is the Yao-Yao Graph a $\tilde{\alpha}$ -spanner for constant $\tilde{\alpha}$? A geometric graph is a $\tilde{\alpha}$ spanner (or just a spanner) if, for every pair of nodes u, v , there is a path from u to v whose total weight is at most $\tilde{\alpha}$ times the Euclidean distance between them. See below for the definition of the Yao-Yao Graph.	
Origin	Yao (1977)
Status/Conjectures	Open
Partial and Related Results	The Yao graph Y_3 is defined as follows. At each node u , any $\pi/4$ -equally-separated rays originated at u define a cone of angle $\pi/2$. If there are any, add a directed edge $u \rightarrow v$ to Y_3 . It is known that for the undirected Y_3 , $\tilde{\alpha} = 4$. For Y_5 , it is a 5-spanner, and reduces the maximum degree of nodes as follows. At each node u , all incoming edges are treated as an undirected graph. Many properties of Y_5 have been established, but whether or not Y_7 is a 7-spanner is still open.
Categories	spanners; geometric graphs
Entry Revision History	J. O'Rourke, 29 Dec 2008.
Bibliography	
200-10	Prosenjit Bose, Iiro Niemi, Damjan Karim, Joseph O'Rourke, Ben Seamone, Michael Smid, and Stefanie Wuhrer. Yao graphs are spanners. <i>arXiv:1801.2913v1 [cs.CG]</i> , January 2018.
100-02	Yu Wang and Xiang-Yang Li. Distributed spanner with bounded degree for wireless ad-hoc networks. In <i>IPDPS '02: Proc. of the 16th IEEE Int. Parallel and Distributed Processing Symposium</i> , pages 194–201, 2002.
Yao82	A. C. Yao. On constructing minimum spanning trees in k -dimensional spaces and related problems. <i>SIAM J. Comput.</i> 11(6):721–736, 1982.

一类随机优化问题的 多项式时间近似方案

李建研究组开发了一个框架，该框架可以得到一类随机动态程序的多项式时间近似方案（PTAS）：该组获得了几个随机组合优化问题的第一个PTAS。尤其是获得ProbeMax的PTAS：有n个秘书候选人，每个候选人里有一个能力值 X_i ， X_i 是一个随机变量，具有已知（离散）分布。研究组可以按某个顺序面试这些候选人（面试时，研究组就知道这个人能力的具体值）。研究者可以最多面试m个候选人，最后会选择这m个面试过的人中最好的。研究组的目标是设计一种面试方法（选择哪些候选人面试），以使最后选择的秘书的预期能力值最大。Asadpour等人给出了近似比为 $1-1/e$ 的近似算法。研究组得到了这个问题的第一个PTAS。接下来，研究者还获得了其他几个问题的PTAS：潘多拉魔盒问题的某个变种，随机目标，随机二十一点背包问题等。文章发表于理论计算机会议ICALP 2018。主要作者是交叉信息研究院博士毕业生傅昊和副教授李建。

Hao Fu, Jian Li and Pan Xu. A PTAS for a Class of Stochastic Dynamic Programs. ICALP 2018



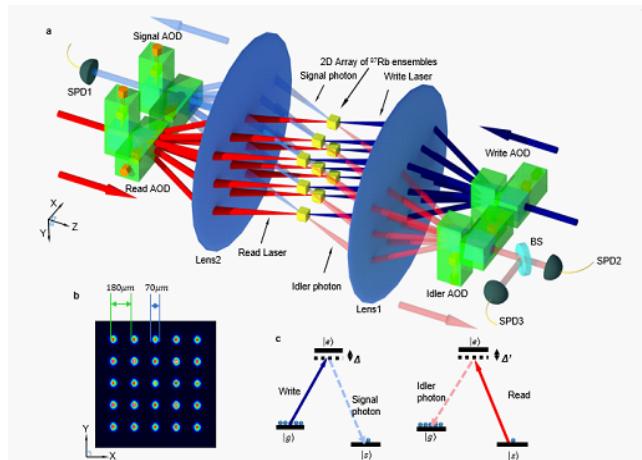
$$\begin{array}{ll} x_1 = 1 \text{ w.p. 0.5} & x_2 = 3 \text{ w.p. 1.0} \\ x_1 = 5 \text{ w.p. 0.5} & \\ c_1 = 0 & c_2 = 1 \end{array}$$

量子计算与网络（段路明研究组）

主要完成人：段路明、濮云飞、吴宇恺、蒋楠、常伟、李畅、张胜

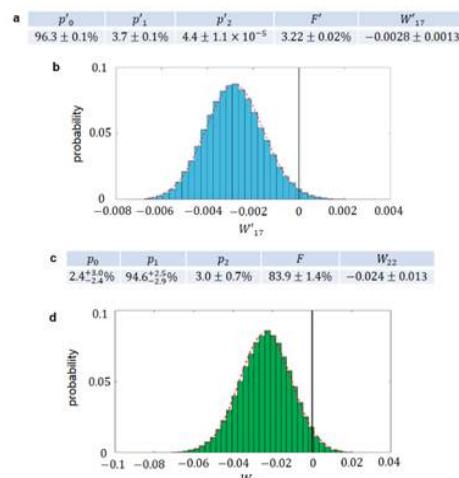
25个独立量子接口之间的量子纠缠

该成果的研究论文“Experimental entanglement of 25 individually accessible atomic quantum interfaces”发表于 *Science Advances* 上。



在二维原子系综量子接口阵列之间产生和验证量子纠缠的实验装置图

量子接口（Quantum interfaces）用于实现量子信息在光子和存储粒子（通常为原子）之间的相干转化，是连接量子存储器或量子计算单元与光量子通信通道间的重要界面。类似于经典接口的广泛应用，量子接口是量子信息领域的基本元器件，实现量子接口之间的纠缠是构建量子网络和未来量子互联网的一个基本要求。在量子信息科学中，光子拥有最快的传输速度，是传播量子信息的最佳载体，而原子拥有很长的量子相干时间，被广泛用于量子信息的存储。量子接口将光子和存储原子连接起来，实现量子信息在不同载体间的高效相互转换。2001年，段路明与合作者提出著名的DLCZ (Duan-Lukin-Cirac-Zoller)量子中继方案，建议用原子系综作为光子与存储器之间的量子接口。得益于众多原子和光模式之间的集体增强效应，基于原子系综的DLCZ方案是量子接口的一个理想选择，在量子信息领域影响很大，国际上多个研究组致力于实现DLCZ型量子



25个原子系综量子接口阵列中量子纠缠的验证

接口及其相互间的量子纠缠。加州理工学院的著名量子信息和量子光学专家Kimble研究组，在此方向经过系列工作，于2010年实现了4个DLCZ型量子接口之间的纠缠，代表此前的国际记录。

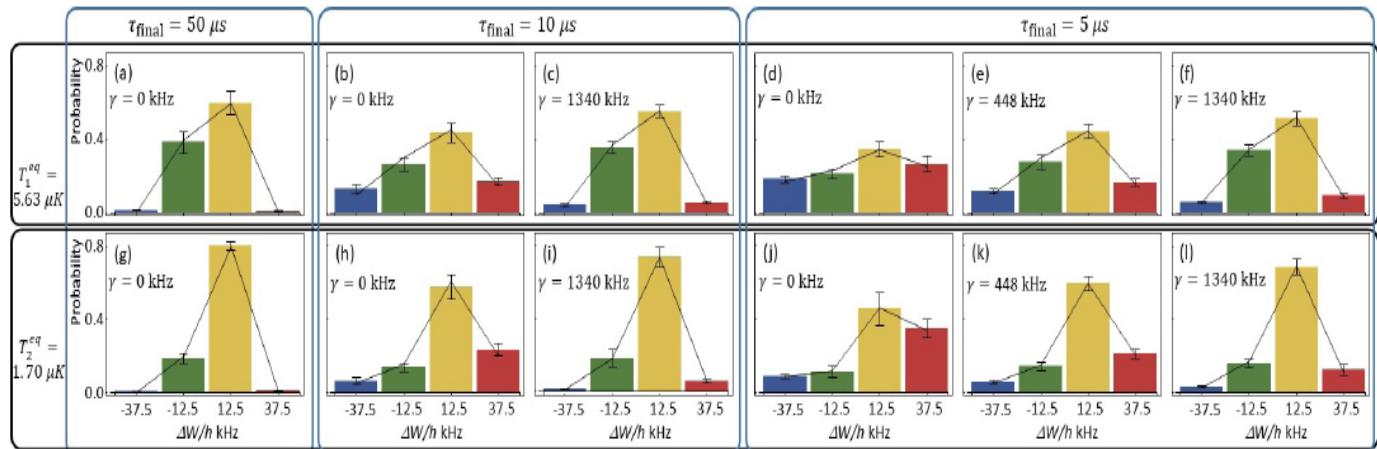
为实现更多量子接口间的纠缠，构造更大的量子纠缠网络，段路明研究组研发了新颖的二维量子接口阵列，解决了相关技术问题，可以方便地实现多个量子接口间的纠缠。研究人员通过光束复分技术，独立寻址并相干调控 5×5 的量子接口阵列，制备了多体量子纠缠态，在25个量子接口之间，实验利用纠缠判据以高置信度证明至少存在22体以上的真实纠缠，刷新了量子接口纠缠数量的世界记录。

Yunfei Pu, Yukai Wu, Nan Jiang, Wei Chang, Chang Li, Sheng Zhang and Luming Duan.
Experimental entanglement of 25 individually accessible atomic quantum interfaces. Science Advances 2018

离子量子计算（金奇奂研究组）

主要完成人：金奇奂、张静宁、吕定顺、张君华、安硕明、汪野、沈杨超、张宽、严马可、路尧、张帅宁、刘振宇、王鹏飞

退相干环境中的量子非平衡功关系



温度分别为 $T=5.63\mu\text{K}$ 和 $T=1.70\mu\text{K}$ 时，不同的驱动周期和退相干强度对应的功分布

金奇奂研究组的工作关注的是非平衡功关系 $\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F}$ 。这一关系将不可逆过程所做的功 W 的涨落与初末平衡态自由能的差 ΔF 联系起来。虽然在经典系统中，这一关系已被大量研究和实验验证，但其量子推广仍不完备。量子情况下最普适的理论分析是抽象的，而已有的实验验证只针对孤立系统这一特殊情况。该研究组的理论和实验工作填补了这一空白，研究了受到退相干环境影响的系统，退相干是热力学环境下量子演化的标志。在给出这一特定环境下功关系的物理推导后，研究组展示了与理论预测相符的实验结果。这些以囚禁镱离子为平台的实验展示

金奇奂研究组预计这些实验将激发关于同时受到退相干和耗散影响的量子系统中的非平衡功关系的进一步研究。该成果论文“Verification of the quantum nonequilibrium work relation in the presence of decoherence”发表在 *New Journal of Physics* 上。

Andrew Smith, Yao Lu, Shuoming An, Xiang Zhang, Jing-Ning Zhang, Zongping Gong, H. T. Quan, Christopher Jarzynski, Kiwhan Kim, *Verification of the quantum nonequilibrium work relation in the presence of decoherence*.

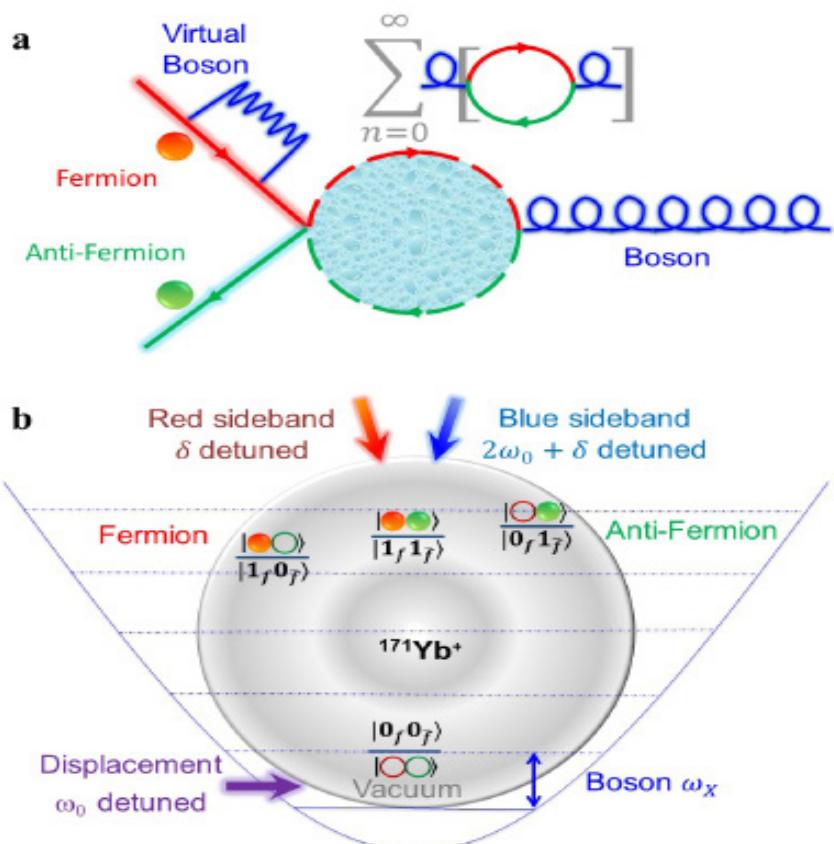
New J. Phys. 20, 013008 (2018)

囚禁离子系统中量子场论的量子模拟

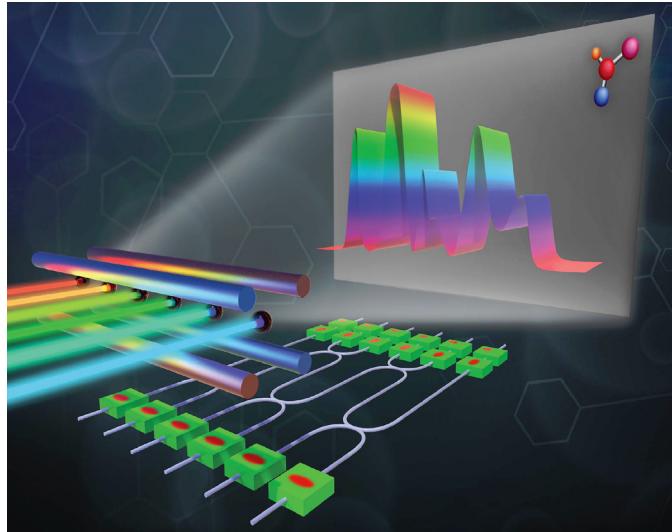
金奇奂研究组实验演示了如何在囚禁离子系统中模拟量子场论中的现象，比如粒子的产生和湮灭以及自相互作用过程等。研究者在实验中，实现了原理验证性的量子模拟实验，演示了以波色模式为媒介的费米子——反费米子散射过程。在实验中研究者利用离子振动模式来编码模拟的波色模式，同时将费米模式的状态映射到离子的4个电子能级中。这是首个利用离子的不同自由度同时模拟波色子和费米子的实验。此外，与标准的经典或量子计算途径不同，该研究组的方法不局限于微扰区域，而是可以观测到深入非微扰区域的精确动力学。

即使对于拥有许多量子比特的量子计算机来说，这样的计算也是十分困难的。金奇奂研究组相信此项实验打开了通向量子场论的可扩展数字——模拟混合量子模拟的大门。该成果论文“Experimental quantum simulation of fermion-antifermion scattering via boson exchange in a trapped ion”发表于 *Nature Communications* 上。

Xiang Zhang, Kuan Zhang, Yangchao Shen, Jingning Zhang, Man-Hong Yung, Jorge Casanova, Julen S. Pedernales, Lucas Lamata, Enrique Solano, Kiwhan Kim. Experimental quantum simulation of fermion-antifermion scattering via boson exchange in a trapped ion. *Nature Commun.* 9, 195 (2018)



费米子-反费米子散射过程和该过程与囚禁镱离子系统的映射关系。a,费米子、反费米子和波色子之间相互作用的费曼图。b,在囚禁镱离子系统中实现该相互作用的哈密顿量涉及的编码和操作。

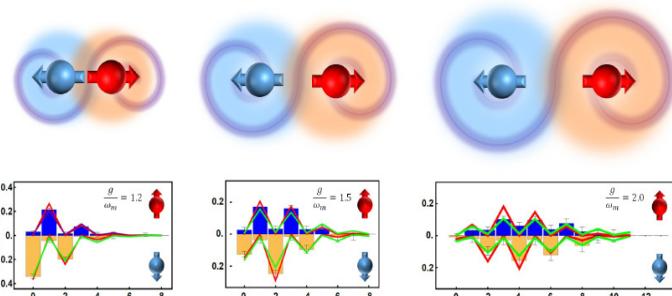


基于离子阱系统的分子振动能谱模拟示意图

金奇奂研究组在量子实验系统中首次实现了分子振动能谱的模拟。值得一提的创新之处是，该模拟是基于离子阱系统中的声子，而不是已经有过多次实验尝试的光学系统中的光子。为了在实验系统中实现可信赖的声子操控采样，研究组开发了能够在一次试验中保持相位相干性的操控，这些操控包括多个声子模的位移、压缩和旋转。同时，研究组还开发了两个声子模整体投影测量的实验方法，每个声子模能多达10个声子。作为结果展示，研究组成功模拟了二氧化硫(SO₂)的振动能谱，并验证了在误差范围之内理论计算和实验结果之间的吻合。这项研究工作为超出经典计算能力的复杂分子模拟打下了坚实的基础。该成果论文“Quantum optical emulation of molecular vibronic spectroscopy using a trapped-ion device”发表于 *Chemical Science* 上。

Yangchao Shen, Joonsuk Huh, Yao Lu, Junhua Zhang, Kuan Zhang, Shuaining Zhang, Kiwhan Kim. Quantum optical emulation of molecular vibronic spectroscopy using a trapped-ion device. *Chemical Science* 9, 836 (2018)

金奇奂研究组的实验系统是被囚禁在由振荡电场产生的谐振子势阱中的单个¹⁷¹Yb⁺离子。通过适当地调节聚焦于¹⁷¹Yb⁺离子上的拉曼激光束的频率，研究组在一个与激光频率相关的旋转坐标系中产生QRM哈密顿量。在这个有效哈密顿量中，研究者可以通过简单地调整激光频率来任意地控制耦合强度和模式频率的比率。囚禁离子模拟器的可控性使研究组能够通过实验探索QRM的许多通常难以观测的现象，如在超强和深强耦合区域的奇特现象。例如，研究组通过实验观察到旋转波近似的失效和往复运动的声子波包的出现。最重要的是，金奇奂研究组绝热地制备了深强耦合区域QRM的基态，并检测到玻色子场和二能级系统之间的非平凡的量子纠缠。该成果论文“Quantum Simulation of the Quantum Rabi Model in a Trapped Ion”发表于 *Physical Review X* 上。



深强耦合区域量子拉比模型的基态

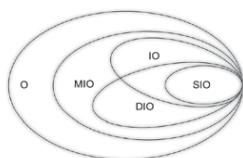
Dingshun Lv, Shuoming An, Zhenyu Liu, Jing-Ning Zhang, Julen S. Pedernales, Lucas Lamata, Enrique Solano, and Kiwhan Kim. Quantum Simulation of the Quantum Rabi Model in a Trapped Ion. *Phys. Rev. X* 8, 021027 (2018)

量子密码 (马雄峰研究组)

主要完成人：马雄峰、袁骁、赵琦、周泓伊、曾培、周游

量子相干性非渐进 条件下的稀释问题

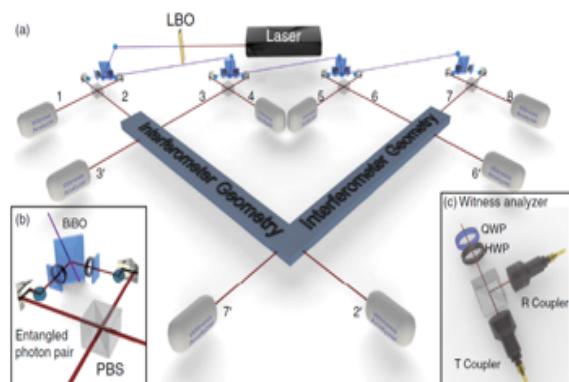
量子相干性是一种量子力学特有的性质，其作为一种特殊资源在量子信息处理过程中起着举足轻重的作用，例如量子计算、量子随机数的产生等。对这一资源的操作与度量是量子物理中非常重要而核心的内容。在之前的工作中，量子相干性在渐进条件下提纯和稀释已经有了系统的研究。但是在实际系统中渐进条件中的无穷份完全相同互相独立的资源的假设往往无法满足，因此考虑在非渐进条件下的量子相干性转换非常重要。这样的非渐进条件下，即只有一份资源时的量子信息处理任务在量子密码学、量子纠缠等研究中都有着重要的应用。与美国Chitambar教授小组合作，研究组提出了量子相干性非渐进条件下的稀释问题。为了解决这一问题研究组提出了不同的相干性度量去系统地量化研究了针对不同的非相干操作下的稀释率，如非相干操作(IO)、最大非相干操作 (MIO) 、退相干守恒非相干操作 (DIO) 以及严格非相干操作(SIO)，这几种非相干操作的关系如图所示。该研究为进一步研究量子相干性的非渐进条件下的转化以及量子相干性和量子随机数的关联提供了基础。该成果论文“*One-Shot Coherence Dilution*”发表于 *Physical Review Letters* 上。



Qi Zhao, Yunchao Liu, Xiao Yuan, Eric Chitambar, Xiongfeng Ma. *One-Shot Coherence Dilution*. *Physical Review Letters* 120 (7), 070403 (2018)

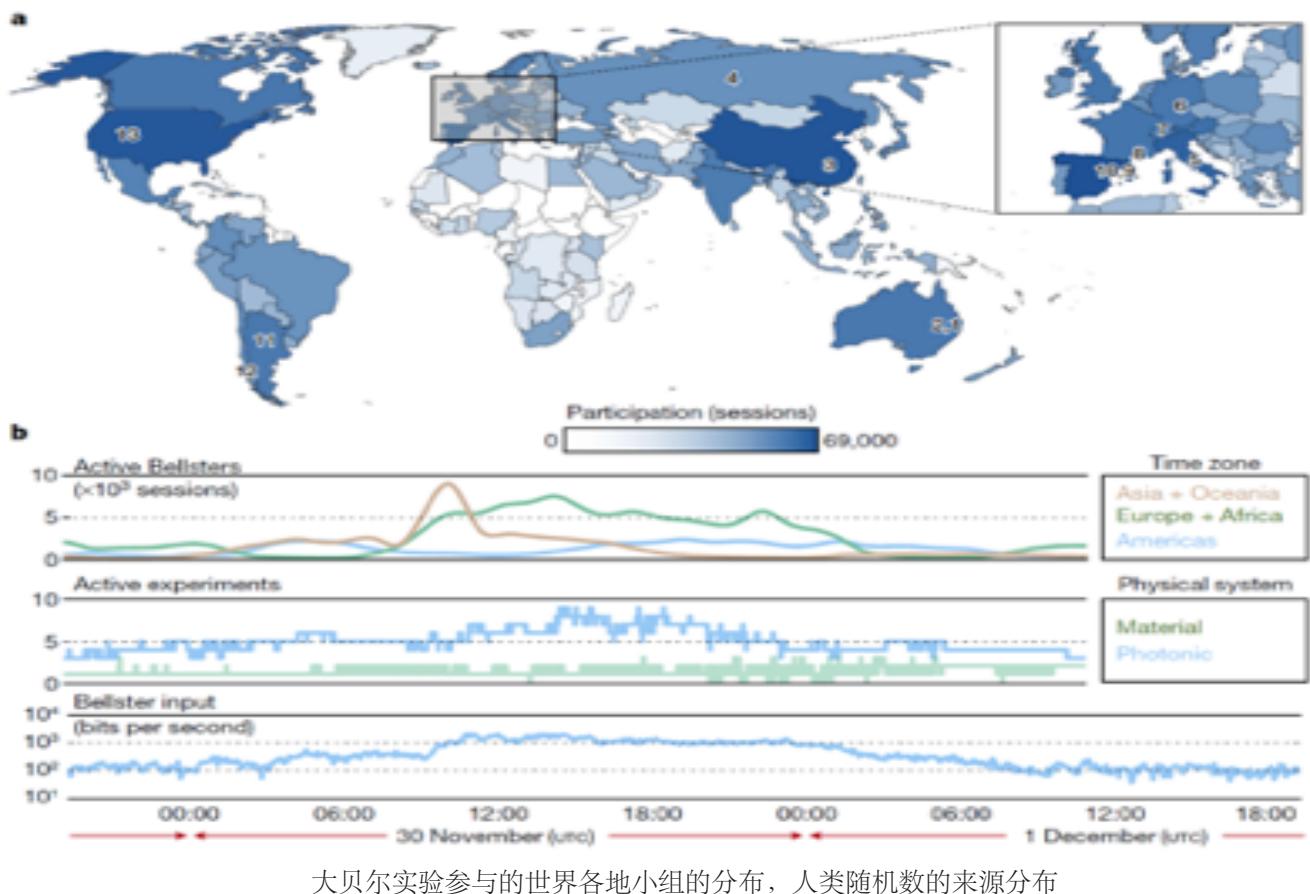
高效的多体纠缠结构的探测方案

在量子纠缠方向，马雄峰研究组在理论上提出了高效的多体纠缠结构的探测方案，其中包括对于纠缠可分性、纠缠深度等重要指标的探测，并与实验组合作在光学平台上首次实现了多体量子纠缠结构的探测。该方案提出了两个不同的纠缠见证，分别只需要两个局部测量，通过提供互补的信息探测出纠缠的具体结构。这一方案的实验实现最多使用了8光子纠缠，具体实验装置图如下图。此项成果可以用来标定大规模量子纠缠的制备，为未来大规模量子纠缠的探测提供了有效工具，也为基于量子纠缠的量子计算方案打下基础。该成果论文“*Entanglement structure: Entanglement partitioning in multipartite systems and its experimental detection using optimizable witnesses*”发表于 *Physical Review X* 上。



He Lu, Qi Zhao, Zheng-Da Li, Xu-Fei Yin, Xiao Yuan, Ju-Chen Hung, Luo-Kan Chen, Li Li, Nai-Le Liu, Cheng-Zhi Peng, Yeong-Cherng Liang, Xiongfeng Ma, Yu-Ao Chen, and Jian-Wei Pan. *Entanglement structure: Entanglement partitioning in multipartite systems and its experimental detection using optimizable witnesses*. *Phys. Rev. X* 8, 021072 (2018)

大贝尔检测



大贝尔实验参与的世界各地小组的分布，人类随机数的来源分布

贝尔不等式方向，马雄峰研究组参与了大贝尔检测的合作“The BIG Bell Test Collaboration”。

贝尔测试提供了验证区分量子力学和经典局域隐变量理论的实验手段。贝尔测试的特点在于其结论不依赖于物理理论的假设。然而为了实现贝尔测试则需要克服各种实验漏洞。几个著名的漏洞是局域性漏洞，探测效率漏洞和随机选择基矢漏洞。局域性漏洞和探测效率漏洞可以通过提高实验装置的精度来克服。然而，由于并不存在不依赖于物理假设的随机数，随机数漏洞则无法从物理上彻底地消除。该项目利用了超过100,000名志愿者完成一个在线游戏，利用人们的自由意志从而选择出不可预测的随机数。来自世界各地的13个实验小组通过利用人类产生的随机数实现了大贝尔测试，从而克服了在贝尔测试中著名的随机数漏洞。基于人类的自由意志，人类随机产生的随机数在本质上具有一定的随机性。利用这种

随机性可以从某种程度上解决贝尔测试中的随机数漏洞。

马雄峰研究组作为大贝尔测试的参与小组之一。通过对人类随机数的随机性刻画，研究组提出了贝尔测试成功概率和人类随机数的随机性的关系。研究者进一步将该理论应用到实际的贝尔测试中并和实验小组合作进行实验验证。实验结果表明，只要人类的自由意志不能被很强地控制，那么人类的随机数就可以用到贝尔测试中来排除局域隐变量。该成果论文“Challenging local realism with human”发表于 *Nature* 上。

X. Ma, X. Yuan. The BIG Bell Test Collaboration. Challenging local realism with human. *Nature* 557 (7704), 212 (2018)

超导量子计算 (孙麓岩研究组)

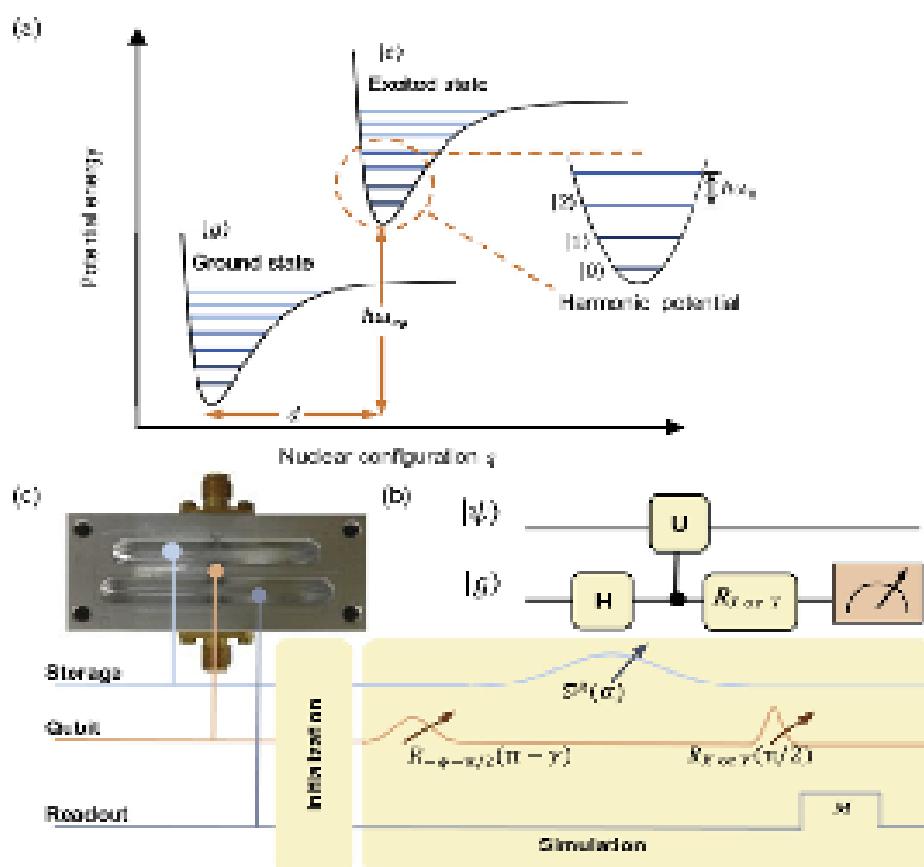
主要完成人: 孙麓岩、胡伦嘉

分子光谱模拟

分子光谱是研究分子结构的重要手段, 但是分子光谱的观测受实验条件的限制非常大。比如实际观测的分子大多处于平衡态, 其在非平衡态下的情况很难被观测到。对分子光谱的理论计算也往往受限于经典计算机的计算能力, 对复杂分子的光谱预期基本无能为力。量子模拟原则上可以解决这个问题, 在分子光谱和量子化学方面有很好的应用前景。通过与南科大理论课题组合作, 孙麓岩研究组利用超导量子电路在实验中模拟了简单分子光谱: 不仅可以模拟分子处于平衡态, 而且可以模拟通常实验条件难以实现的非平衡态下的光谱。

这项研究为利用量子模拟来预期和理解复杂分子光谱奠定了基础。该研究成果“*Simulation of molecular spectroscopy with circuit quantum electrodynamics*”发表 *Science Bulletin* 上

L. Hu, Y. Ma, Y. Xu, W. Wan, Y. Ma, K. Liu, H. Wang, Y. Song, M. H. Yung, and L. Sun. Simulation of molecular spectroscopy with circuit quantum electrodynamics. Science Bulletin, 63, 293 (2018)



基于超导量子电路的分子光谱模拟

量子人工智能 (邓东灵研究组)

单独完成人: 邓东灵

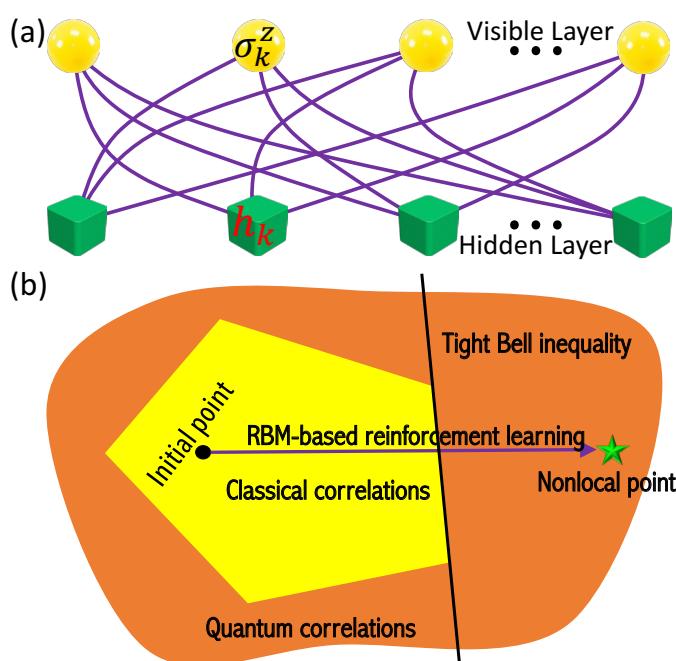
机器学习与量子多体非定域性

邓东灵助理教授在 *Physical Review Letters* 发表单独作者论文: “Machine Learning Detection of Bell Nonlocality in Quantum Many-Body Systems”, 开启机器学习在研究量子多体非定域性中的应用。

量子非定域性是量子系统一个非常奇特的性质, 它描述比量子纠缠更强的关联-任何表现非定域性的量子态一定是纠缠的, 反之则不一定成立。在实际应用中, 它是构建设备无关量子技术, 如无条件安全量子密钥分配、自认证随机数产生器等, 不可或缺的资源。对量子非定域性的思考和研究最早可以追溯到20世纪初发生在爱因斯坦和波尔之间关于量子力学基础的著名争论。1964年, 约翰贝尔提出了一种可以区分量子力学与局域实在论的测试方法, 即著名的贝尔不等式。从此, 量子系统的非定域性可以通过实验测试贝尔不等式的破坏来定量刻画。

然而, 由于描述量子态的希尔伯特空间随系统大小指数增加, 在量子多体系统中研究非定域性变得极为困难。邓东灵的工作把机器学习的方法引入到量子多体非定域性的研究中, 通过实例展示了机器学习在处理这方面问题的极大优势, 解决了一些用传统方法无法解决或极为困难的问题(比如计算随机全关联系统贝尔不等式最大破坏)。该工作在机器学习与量子多体非定域性之间建立了桥梁, 将对未来认识和发展量子人工智能及其应用产生广泛的影响。

Dongling Deng. Machine Learning Detection of Bell Nonlocality in Quantum Many-Body Systems. Phys. Rev. Lett. 120, 240402, (2018)



(a) 用于研究量子多体非定域性的人工神经网络

(b) 在多体系统中用机器学习方法探测量子非定域性主要思想示意图

量子信息理论（魏朝晖、尹璋琦等）

主要完成人：魏朝晖、尹璋琦、黄奕

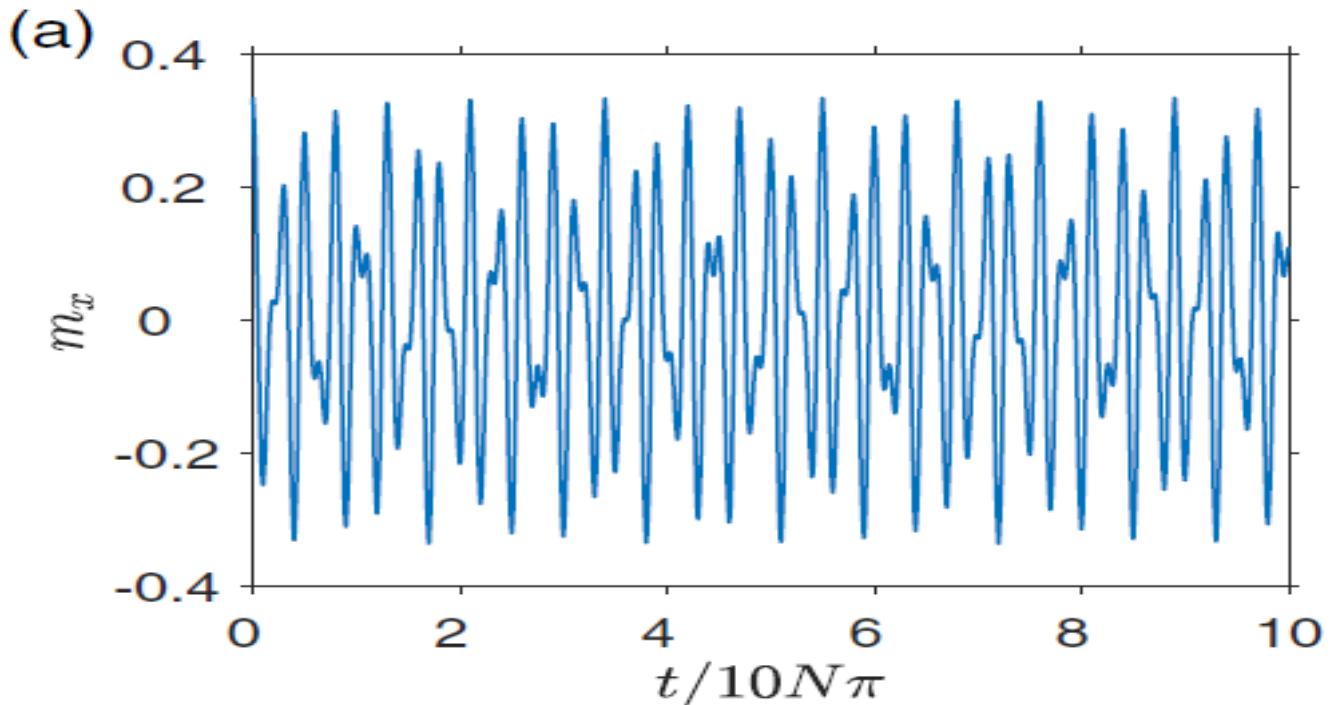
针对Qudit量子系统幅度损耗的量子纠错码

量子纠错码将在量子计算的物理实现中起到根本性的重要作用。人们在设计量子纠错码的时候，通常假设噪音模型由Pauli矩阵组成的Kraus算子来刻画。但在实际情况中噪音的Kraus算子并不一定是Pauli类型的矩阵，比如幅度损耗噪音。因而，原有模型设计的纠错码没有充分考虑实际情况，导致纠错的性能会受到一些影响，有继续改善的空间。在这种背景下，针对qubit量子系统幅度损耗等非Pauli类型的噪音量子纠错需要，人们提出了一系列专门的纠错码，取得了较好的效果。但是，如果量子计算系统由qudit构成，则这些成果不再适用，根本原因是qudit系统

的幅度损耗噪音物理过程复杂很多，且具有许多不同的情形，数学形式也各不相同。魏朝晖研究组研究了qudit幅度损耗的物理过程，分别抽取出各种情形的Kraus模型，进而提出了一系列全新的专用量子纠错码，在此类型噪音上的性能超过了以往的量子纠错码。该研究成果“Quantum Error-Correcting Codes for Qudit Amplitude Damping”发表在 *IEEE Transactions on Information Theory* 上。

Markus Grassl, Linghang Kong, Zhaohui Wei, Zhang-Qi Yin, and Bei Zeng. Quantum Error-Correcting Codes for Qudit Amplitude Damping. IEEE Transactions on Information Theory, 64, 4674 (2018)

n	$GF(3^2)$	CSS	AQECC	GC (linear)	GC (nonlinear)
4	3^0	3^0	1	3	3
5	3^1	3^1	6	3^2	11
6	3^2	3^2	11	3^3	3^3
7	3^3	3^3	29	3^3	11×3^1
8	3^4	3^4	84	3^5	3^5
9	3^5	3^5	3^5	3^5	11×3^3
10	3^6	3^6	3^6	3^6	3^6
11	3^6	3^7	3^7	3^7	11×3^5
12	3^7	3^8	3^8	3^8	3^8
13	3^8	3^9	3^9	3^8	11×3^6
14	3^9	3^9	3^9	3^{10}	3^{10}
15	3^{10}	3^{10}	3^{10}	3^{10}	11×3^8
16	3^{11}	3^{11}	3^{11}	3^{12}	3^{12}

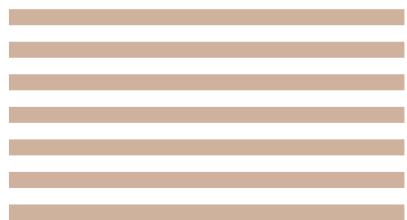
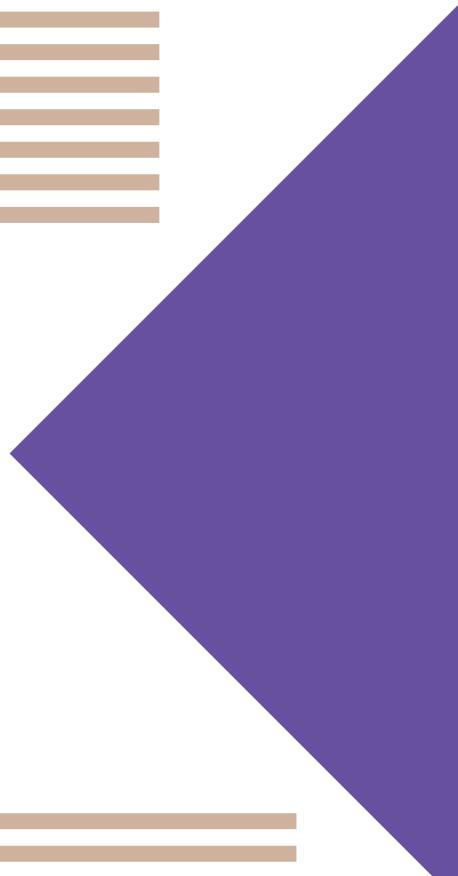
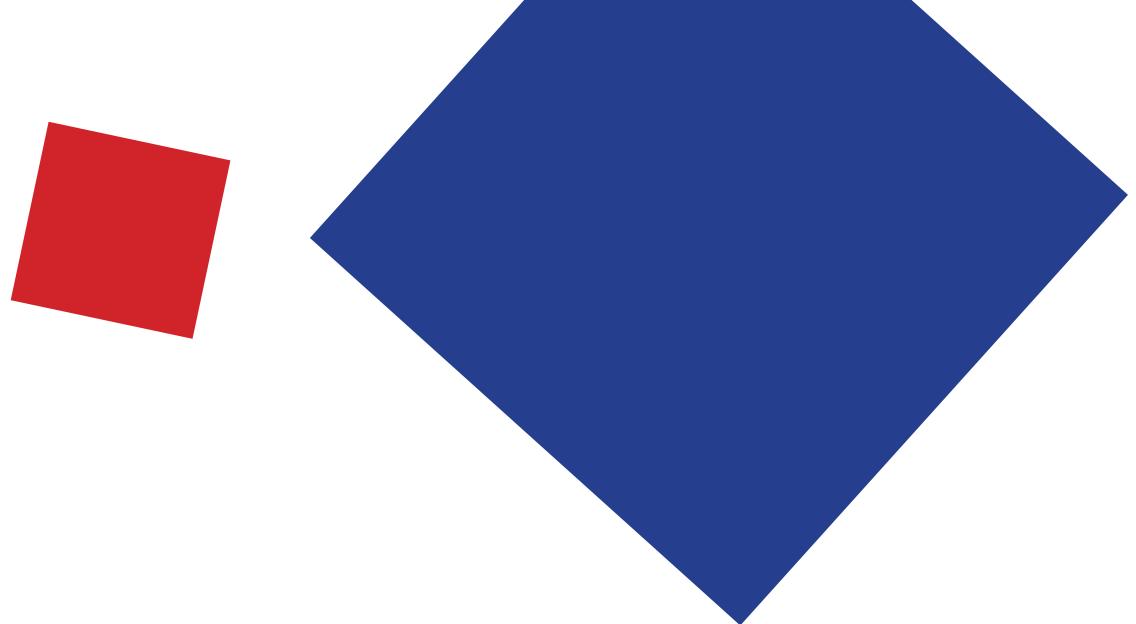


有限自旋LMG模型基态附近磁化率 m_z 随时间的变化，此时系统处于量子时间准晶体态

自从2012年时间晶体的概念提出，对此的争议与讨论非常多。尹璋琦研究组研究了有限多体自旋的Lipkin-Meshkov-Glick(LMG)模型，通过计算时间上的关联函数解析地证明了，LMG模型基态处于铁磁相区域内时，一旦局域化，就会破缺时间平移对称性，呈现时间晶体态。这是一个纯粹的量子效应，振动频率与自旋数N成反比。该组进一步发现这个系统基态附近的振动具有两个特征频率。其中一部分由于系统能级的离散性，另外一部分来自自旋算符之间的对易关系不为零。这种由于自旋对易关系不为零而导致的自发振动，以前的量子时间晶体理论中没有发现过。当两个频率之比是无理数时，可以自然地形成时间上的准晶体。研究组也把数值解与解析结果比较，可互相印证。数值计算发现自旋波函数局域化之后的状态能量比基态高 $O(1/N^2)$ 。当自旋数N很大时，时间晶体态会长时间保持，正比于 N^3 。

该成果研究论文“Symmetry breaking dynamics of the finite-size Lipkin-Meshkov-Glick model near ground state”，今年1月份发表后，已被发表在*Physical Review Letters*, *Physical Review A* 等刊物上的论文多次引用。此工作由来自西安交通大学的实习生黄奕在清华大学交叉信息研究院量子信息中心实习期间，在助理研究员尹璋琦博士的指导下完成。

Yi Huang, Tongcang Li, Zhang-qi Yin.
Symmetry breaking dynamics of the finite-size Lipkin-Meshkov-Glick model near ground state,
Phys. Rev. A 97, 012115 (2018)



Edited by Kailin Li
Reviewed by Xiamin Lv

