

接近参数计数参考下界的自适应么正量子过程层析 *

王沛霖 # 肖天琦 #† 周张凯 周晓祺 ‡

(中山大学, 光电材料与技术全国重点实验室, 广州 510275)

量子过程层析是量子信息科学中实现未知量子操作完整表征的基础方法, 在量子计算、量子通信和量子计量等领域具有重要应用。对于作用在 d 维系统上的一般量子信道, 其独立实参数个数通常为 $\mathcal{O}(d^4)$; 在么正先验条件下, 这一数量可显著减少。已有自适应方案已将么正量子过程层析所需的独立测量数据条数压缩至 $d^2 + d - 1$, 但从参数计数来看, 忽略整体全局相位后未知么正过程仅含 $d^2 - 1$ 个独立实参数, 因此所需数据条数仍存在进一步压缩空间。针对这一问题, 本文提出了一种面向么正量子过程的自适应量子过程层析方案。在纠缠辅助量子过程层析框架下, 基于自适应测量策略, 将层析过程表述为候选么正集合的逐步收缩, 并在可实现探测态空间中直接优化搜索测量态, 以提高对候选过程的区分效率。数值结果表明, 在所考察的维度与精度阈值范围内, 该方案可在 d^2 条独立测量数据下实现稳定的高精度重构, 使所需数据条数达到接近 $d^2 - 1$ 参考下界的水平。该结果为高维么正量子过程的高效表征提供了一种结构清晰且具有数值支撑的自适应方法。

关键词: 量子过程层析; 自适应测量; 么正信道

PACS: 03.65.Wj, 03.67.-a, 03.67.Ac

1 引言

量子过程层析 (quantum process tomography, QPT) ^[1,2] 旨在通过实验数据对未知量子过程进行完整表征, 是量子信息科学中的基础任务之一, 在量子计算 ^[3-6]、量子通信 ^[7-10] 和量子计量 ^[11,12] 等方向均

* 国家自然科学基金 (批准号: 62575313) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: tianqi.xiao.quantum@gmail.com

‡ 通信作者. E-mail: zhouxq8@mail.sysu.edu.cn

具有重要应用。对于理想封闭系统，量子态演化由么正算符描述；而在量子计算中，量子门和量子线路在本质上也对有限维希尔伯特空间上的么正操作^[13-15]。因此，么正量子过程的准确表征直接关系到量子门实现、线路验证和器件标定等关键问题。

从参数计数的角度看，作用在 d 维系统上的一般量子信道通常具有 $d^4 - d^2$ 个独立实参数，其唯一重构一般需要同数量级的测量资源。相比之下，若已知待测过程为么正信道，则忽略整体全局相位后，未知过程仅包含 $d^2 - 1$ 个独立实参数。这表明，在么正先验条件下，量子过程层析所需的独立测量数据条数有望显著低于一般量子信道层析。由此引出的一个自然问题是：在么正先验下，唯一确定一个未知么正过程究竟最少需要多少条独立测量数据？围绕这一问题，已有研究给出了一系列具有代表性的结果^[16-18]。Gutoski 和 Johnston 证明，当未知过程被承诺为么正信道时， $4d^2 - 2d - 4$ 个测量数据足以唯一重构该未知信道^[16]。随后，随着自适应层析的发展，研究者开始根据已获得的测量信息动态更新后续测量，从而提高单次测量的信息提取效率^[19-22]。Wang 等人将自适应思想系统引入么正过程层析，构造出一个对任意么正信道均成立、所需独立测量数据条数为 $d^2 + d - 1$ 的自适应方案^[18]，并构成了么正过程自适应层析中的一个重要标杆。需要说明的是，这里所说的“独立测量数据”指在理想无统计误差模型下每轮测量得到的一个可作为独立约束的标量值，而非有限样本条件下的重复采样次数。

尽管已有自适应方案已经显著压缩了所需数据条数，但从方法结构上看，许多方案中的探测态仍来自预先构造的完备集合，即测量方向仍受限于一个预设的有限集合。由此自然产生一个进一步的问题：能否摆脱固定探测态集合的限制，直接在可实现探测态空间中搜索判别能力更强的测量态，从而更有效地压缩候选过程空间，并使所需独立测量数据条数进一步接近 $d^2 - 1$ 这一由参数计数所给出的参考下界？

针对这一问题，本文提出了一种面向么正量子过程的自适应量子过程层析方案。在纠缠辅助量子过程层析框架下，借助 Choi-Jamiołkowski 同构，可将未知么正过程的表征转化为对应 Choi 纯态的重构^[23-26]。在此基础上，层析过程被表述为候选么正集合在测量约束下的逐步收缩，并在每一轮中直接在可实现探测态空间内搜索判别能力更强的测量态，从而提高对不同候选过程的区分效率。数值结果表明，该方案可在 d^2 条独立测量数据下实现稳定的高精度重构，其所需数据条数已接近 $d^2 - 1$ 的参考下界。该方法为高维么正量子过程的高效表征提供了一种可行途径。

2 理论框架与自适应策略

2.1 么正过程的纠缠辅助表征

考虑作用在 d 维希尔伯特空间上的么正信道 $\mathcal{U}(\rho) = U\rho U^\dagger$, 其中 $U \in U(d)$ 为么正矩阵。忽略整体全局相位后, 物理上可区分的未知么正过程包含 $d^2 - 1$ 个独立实参数。

为避免对多组输入态分别实施探测, 这里采用纠缠辅助量子过程层析框架。设系统和辅助系统的维度均为 d , 在二者之间制备最大纠缠态

$$|\Phi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{p=0}^{d-1} |p\rangle_s \otimes |p\rangle_a. \quad (1)$$

未知么正过程仅作用于系统部分, 则整体输出态为

$$|\Psi_U\rangle = (U \otimes I)|\Phi_d\rangle. \quad (2)$$

这是与么正矩阵 U 一一对应的 Choi 纯态, 因此, 对未知么正过程的表征可等价地转化为对纯态 $|\Psi_U\rangle$ 的重构。

为使表达更紧凑, 引入向量化记号

$$|A\rangle\rangle = \sum_{m,n=0}^{d-1} A_{mn} |m\rangle_s |n\rangle_a. \quad (3)$$

于是式 (2) 可写为

$$|\Psi_U\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} |U\rangle\rangle. \quad (4)$$

这说明么正矩阵 U 的全部信息已经编码在归一化纯态 $|\Psi_U\rangle$ 中。

2.2 可实现探测态空间与投影概率

这里关注的不是对 $|\Psi_U\rangle$ 做一般意义下的完全纯态层析, 而是在么正先验条件下, 通过合理设计探测态, 使每一条新获得的独立测量数据都尽可能提高对未知过程的约束效率。

对于任意已知么正矩阵 $V \in U(d)$, 定义与之对应的探测态为

$$|\varphi(V)\rangle = (V \otimes I)|\Phi_d\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} |V\rangle\rangle. \quad (5)$$

因此, 搜索的并不是任意双体纯态, 而是如下可实现探测态集合

$$\mathcal{M} = \{|\varphi(V)\rangle = (V \otimes I)|\Phi_d\rangle \mid V \in U(d)\}. \quad (6)$$

这一集合由么正算符诱导的最大纠缠态构成，实验上对应于在系统端施加一个可控么正变换后实施相应的最大纠缠投影，因此具有明确的物理可实现性。

给定探测态 $|\varphi(V)\rangle$ ，其与目标态 $|\Psi_U\rangle$ 的重叠概率为

$$p(V; U) = |\langle \varphi(V) | \Psi_U \rangle|^2 = \frac{|\text{Tr}(V^\dagger U)|^2}{d^2}. \quad (7)$$

下文将 $p(V; U)$ 称为该轮测量得到的投影概率。在理想无统计误差模型下，每一次测量得到的一个投影概率值都可视为一条独立测量数据。

2.3 历史数据约束下的候选集合

设第 $i+1$ 轮之前已经实施了 i 个探测态 $|\varphi(V_a)\rangle_{a=1}^i$ ，并获得了对应投影概率

$$p_a = p(V_a; U), \quad a = 1, 2, \dots, i. \quad (8)$$

则与全部历史数据严格一致的候选么正集合可定义为

$$\Omega_i = \{W \in U(d) \mid p(V_a; W) = p_a, a = 1, 2, \dots, i\}. \quad (9)$$

在理想模型中，式 (9) 给出精确候选集合；在实际数值实现中，为兼顾有限数值精度，通常引入容差参数 ϵ ，并采用如下容差候选集合：

$$\Omega_i^{(\epsilon)} = \{W \in U(d) \mid |p(V_a; W) - p_a| \leq \epsilon, a = 1, 2, \dots, i\}. \quad (10)$$

为叙述简洁，下文在不致混淆时仍将当前候选集合统记为 Ω_i 。

随着历史数据不断累积，候选集合 Ω_i 将逐步收缩。问题的关键在于：在当前候选集合已经由历史数据约束确定的条件下，如何选择下一轮探测态，使不同候选过程之间的差异被尽可能放大？

2.4 基于极差的自适应探测态选择

直观上，一个好的探测态应当使当前候选集合中的不同候选过程在该探测方向上给出尽可能不同的投影概率。基于这一想法，这里采用投影概率在候选集合上的极差作为判别能力指标。对于候选探测矩阵 V ，定义

$$g_{i+1}(V) = \max_{W \in \Omega_i} p(V; W) - \min_{W \in \Omega_i} p(V; W). \quad (11)$$

若 $g_{i+1}(V)$ 较大, 则说明当前候选集合中的不同候选过程在探测方向 V 上响应差异更明显, 因此该探测态更有利于在下一轮测量后进一步压缩候选集合。

于是, 第 $i+1$ 轮探测态通过如下优化确定:

$$V_{i+1}^{\text{opt}} = \arg \max_{V \in U(d)} g_{i+1}(V), \quad (12)$$

对应的最优探测态为

$$|\varphi_{i+1}^{\text{opt}}\rangle = |\varphi(V_{i+1}^{\text{opt}})\rangle. \quad (13)$$

记 $g_{i+1}^{\text{max}} = g_{i+1}(V_{i+1}^{\text{opt}})$ 为第 $i+1$ 轮的最大优化极差值。

与从预设完备探测态集合中进行筛选的做法不同, 式 (12) 是在整个可实现探测态空间 $\mathcal{M}$ 中直接搜索当前最有区分力的探测方向。这也是该方法与已有方案在结构上的主要区别。

2.5 当前估计、后验评价与停止准则

为在数值仿真中追踪重构过程, 在每一轮历史数据更新后引入当前估计

$$\hat{U}_i = \arg \min_{W \in U(d)} \sum_{a=1}^i [p(V_a; W) - p_a]^2. \quad (14)$$

它表示在么正约束下对历史数据的最小二乘拟合结果。由此, 对应的当前重构态为

$$|\Psi_{\hat{U}_i}\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} |\hat{U}_i\rangle. \quad (15)$$

在数值仿真中, 由于真实目标么正矩阵 U 已知, 因此可以以后验方式定义第 i 轮的重构保真度

$$F_i = |\langle \Psi_{\hat{U}_i} | \Psi_U \rangle|^2 = \frac{|\text{Tr}(\hat{U}_i^\dagger U)|^2}{d^2}, \quad (16)$$

以及失真度

$$\Delta_i = 1 - F_i. \quad (17)$$

其中, F_i 仅作为数值仿真中的后验评价指标; 在真实未知过程实验中, U 不可直接获得, 因此不能将 F_i 作为在线停止条件。

对实际算法而言, 更合理的停止方式有两类: 其一, 当最大优化极差值 g_{i+1}^{max} 下降到预设阈值 η 以下时停止; 其二, 在给定测量预算下达到预设的数据条数后停止。数值部分主要关注理想精确数据模型下的数据压缩能力, 因此使用 F_i 和 Δ_i 对算法性能进行后验分析。

对于以最大优化极差值作为停止指标的情形，当最大优化极差值为 0 时，说明候选集合中不同候选过程在所有可实现探测方向上的响应已无法区分，因而候选集合已经在物理意义上唯一确定未知么正过程。在数值模拟过程中，当最大极差值降至一个趋于零的小量 η 时即可停止。一般按经验值 η 可取 10^{-3} 至 10^{-4} ，但一个更精确的方法是，可先用本文方案对一系列选定的目标过程进行层析训练，得到大量关于最大极差值与重构保真度之间的对应数据。通过对这些数据进行分析，我们即可知道想要达到目标精度所要求的阈值大小。这一过程类似于机器学习当中的预训练过程。需要说明的是，本文工作主要是解决么正过程层析最小测量数据的基础问题，因此，本文数值主要采用固定独立测量数据条数进行后验比较。

综上，这一自适应么正量子过程层析过程可以概括为：历史投影概率数据逐步累积，候选么正集合持续收缩；在每一轮中，根据当前候选集合直接搜索判别能力更强的下一轮探测态，从而提高每一条新数据对未知过程的约束效率。

3 数值仿真与结果分析

为验证所提自适应方案的有效性，对不同维度下的固定目标么正过程进行了数值仿真，并从两个角度分析算法性能：一是重构保真度随独立测量数据条数增加的演化规律；二是在固定数据条数条件下，不同维度和不同样本上的失真度分布。图 1 给出了固定目标么正过程下重构保真度 F_i 随数据条数 i 增加的演化结果，其中图 1(a)–(c) 对应维度 $d = 4$ 的三个代表性目标过程，图 1(d)–(f) 对应维度 $d = 5$ 的三个代表性目标过程。对每一个固定目标过程，采用不同初值和不同数值优化路径重复重构，因此同一子图中的多条曲线反映了同一目标过程在不同初始化条件下的重构轨迹。

从图 1 可以看出，在不同维度、不同目标过程以及不同初始化条件下，重构保真度总体上都随数据条数增加而提高，并最终逼近 1。这说明所提自适应探测态选择策略能够随着历史数据的累积不断压缩候选集合，并逐步提升当前估计的准确度。尽管不同轨迹在早期和中期的上升速度存在明显差异，但总体收敛趋势是一致的，表明该算法对不同目标过程均具有较好的适用性。进一步观察图 1 可见，当数据条数接近 $d^2 - 1$ 时，已有相当一部分样本进入高保真区域，说明 $d^2 - 1$ 这一由参数计数所给出的参考下界具有明确的物理意义；但与此同时，仍有少数轨迹在该位置附近尚未完全收敛，继续增加少量数据后才迅速提升并稳定在高保真区域。这表明，对当前的自适应搜索策略和数值实现而言， $d^2 - 1$ 更适合被理解为一个接近可达的参数计数参考下界，而不是对所有样本都可直接作为经验停止点的数据条数。另一方面，本文在图中标出 $d^2 + d - 1$ ，主要是将其作为已有自适应么正过程层析方案在独立测量数据条数上的标杆，用于从

测量数据资源角度与本文方法进行参照。由图 1 可见，在达到这一数据条数标杆之前，本文所提方法下的大部分轨迹已经进入高保真区域，说明该自适应策略具有进一步压缩独立测量数据条数的潜力。

基于图 1 所反映的现象，进一步选取 $d^2 - 1$ 、 d^2 和 $d^2 + 1$ 三个相邻的数据条数作为比较对象，以考察参考下界附近的重构精度与稳定性。图 2 给出了固定数据条数条件下的失真度 $\Delta = 1 - F$ 分布，其中

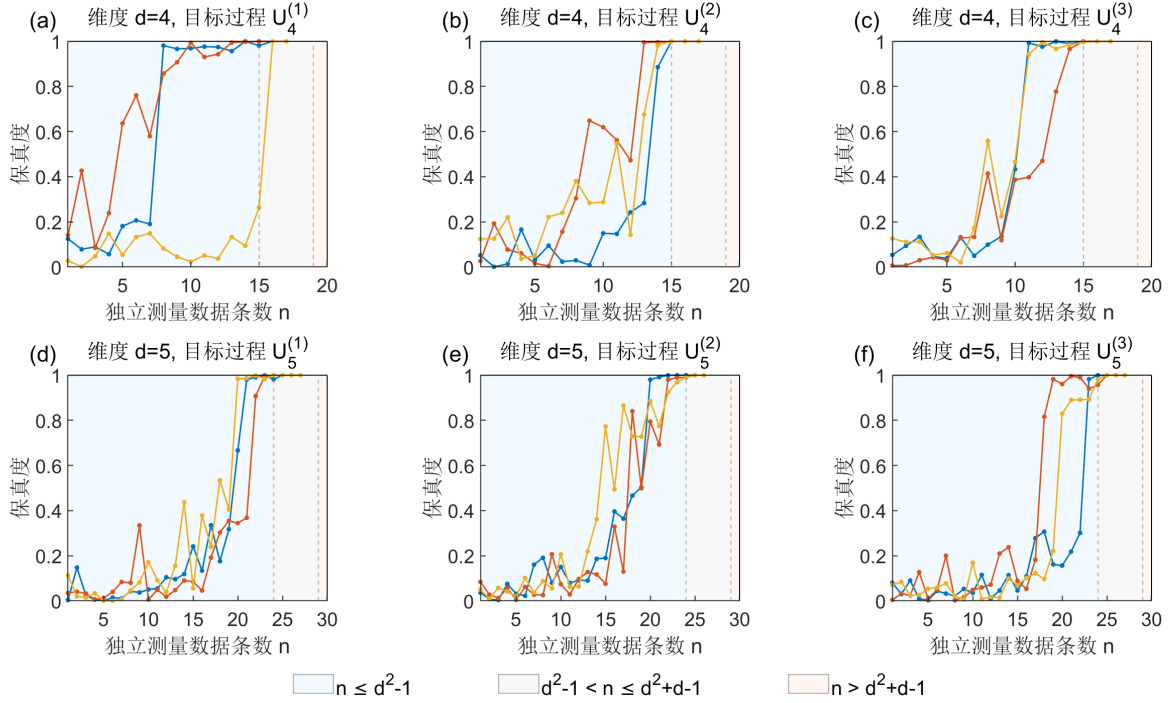


图 1 不同固定未知么正过程下重构保真度随独立测量数据条数的演化。(a)–(c) 对应维度 $d = 4$ 的三个代表性未知过程，(d)–(f) 对应维度 $d = 5$ 的三个代表性未知过程。图中阴影区域分别表示独立测量数据条数不大于 $d^2 - 1$ 、在 $d^2 - 1$ 到 $d^2 + d - 1$ 之间和大于 $d^2 + d - 1$ 的区间。每个子图中的三条不同颜色曲线表示同一固定目标么正过程下，由不同随机初值和数值优化路径得到的三次独立重构轨迹。

Fig. 1. Evolution of the reconstruction fidelity with the number of independent measurement data for different fixed unknown unitary processes. Panels (a)–(c) correspond to three representative unknown processes in dimension $d = 4$, and panels (d)–(f) correspond to three representative unknown processes in dimension $d = 5$. The shaded regions indicate the ranges where the number of independent measurement data is no greater than $d^2 - 1$, between $d^2 - 1$ and $d^2 + d - 1$, and greater than $d^2 + d - 1$, respectively. In each panel, the three colored curves represent three independent reconstruction trajectories for the same fixed target unitary process, obtained from different random initial conditions and numerical optimization paths.

图 2(a)–(c) 分别对应数据条数取 $d^2 - 1$ 、 d^2 和 $d^2 + 1$ 的情形。对于每一个维度，选取 12 个不同的目标幺正过程，并对每一个过程独立重复重构 5 次，以统计不同目标过程和不同初始化条件下的误差分布。这里将 $\Delta \leq 10^{-4}$ 作为高精度重构的判据。考虑到 MATLAB 双精度浮点数的机器精度约为 10^{-16} ，图中所有低于该量级的结果统一记为 10^{-16} 。

从图 2(a) 可以看到，当数据条数取为 $d^2 - 1$ 时，已经有大量样本的失真度落入 10^{-4} 以下，但仍可见部分样本停留在较高误差区域。这说明此时算法在多数情况下已经具有较强的重构能力，但稳定性仍受目标过程和初始化条件影响。相比之下，当数据条数增加到 d^2 时，如图 2(b) 所示，大多数样本的失真度进一步下降；对于较低和中等维度，结果已经相当集中，而在较高维度上仍可见少量离群点。继续增加到 $d^2 + 1$ 时，如图 2(c) 所示，离群点进一步减少，整体分布更加集中，说明在较高维度下增加一条额外数据

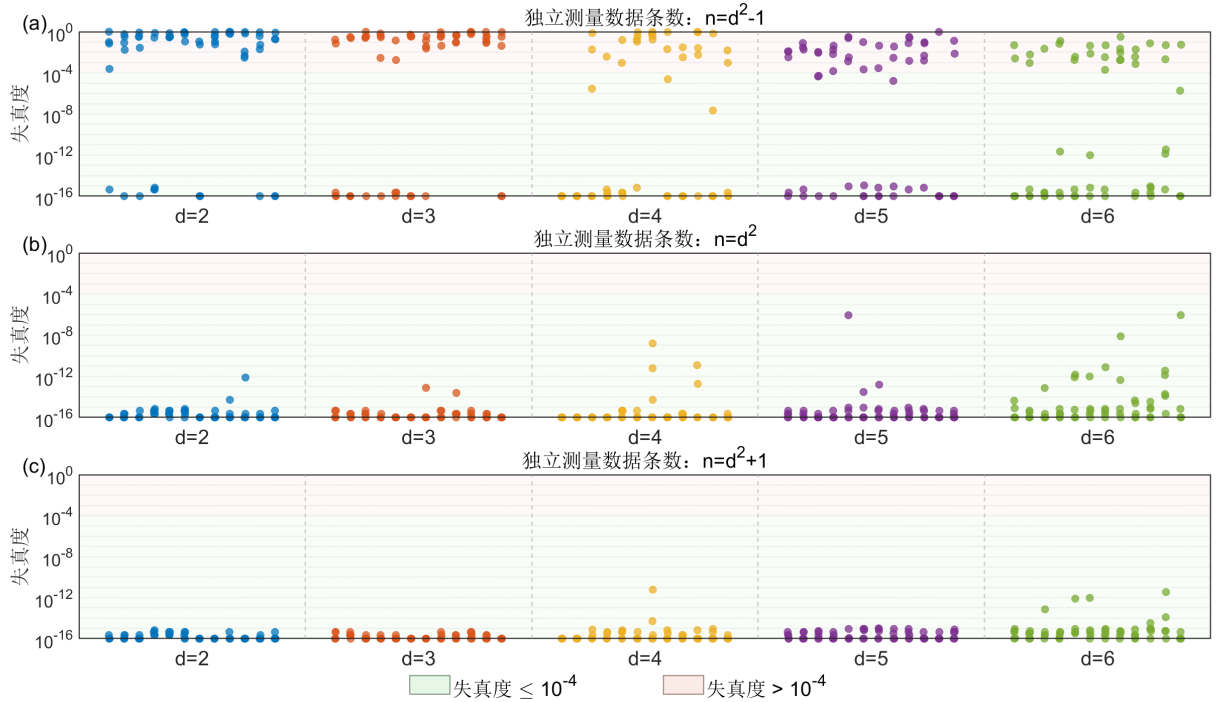


图 2 固定独立测量数据条数条件下不同维度的失真度 $\Delta = 1 - F$ 。其中，(a)–(c) 分别对应独立测量数据条数取 $d^2 - 1$ 、 d^2 和 $d^2 + 1$ 的情形，纵轴采用对数坐标。图中阴影区域分别表示 $\Delta \leq 10^{-4}$ 和 $\Delta > 10^{-4}$ 的区间。

Fig. 2. Infidelity $\Delta = 1 - F$ for different dimensions under fixed number of independent measurement data. Panels (a)–(c) correspond to the cases where the number of independent measurement data is set to $d^2 - 1$, d^2 , and $d^2 + 1$, respectively. The vertical axis is shown on a logarithmic scale. The shaded regions indicate the ranges where $\Delta \leq 10^{-4}$ and $\Delta > 10^{-4}$, respectively.

仍然可能带来一定的稳定性增益。

综合图 1 和图 2 可以得到如下认识：第一，所提方案在不同维度和不同目标过程下都表现出良好的总体收敛性；第二， $d^2 - 1$ 已经十分接近高精度重构所需的临界数据条数，因此可视为一个具有明确物理含义的参考下界；第三，从数值结果看，在所考察的维度与精度阈值范围内， d^2 条独立测量数据已经能够实现稳定的高精度重构，其所需数据条数已接近由参数计数所给出的参考下界 $d^2 - 1$ 。在较高维度或个别困难样本上，增加少量数据仍可能带来进一步提升。

需要特别指出的是，这里的数值结果建立在理想精确投影概率模型之上，主要关注独立测量数据这一资源量的压缩能力，而不涉及有限重复采样条件下的统计涨落问题。因此，上述结论应理解为对理想模型中数据条数的数值刻画，而不是对有限样本实验成本的直接结论。

4 结 论

本文研究了么正先验条件下量子过程层析中的数据压缩问题，提出了一种面向么正量子过程的自适应量子过程层析方案。在纠缠辅助量子过程层析框架下，未知么正信道可等价表示为对应的 Choi 纯态，从而将层析过程表述为历史投影概率数据逐步累积、候选么正集合持续收缩以及探测态自适应优化的迭代过程。

与已有方法依赖预先构造的完备探测态集合不同，该方案在每一轮中直接在可实现探测态空间内搜索判别能力更强的探测态，从而提高对不同候选过程的区分效率。数值结果表明，在所考察的维度与精度阈值范围内，该方案可在 d^2 条独立测量数据下实现稳定的高精度重构，其所需数据条数已接近由参数计数所给出的参考下界 $d^2 - 1$ 。

同时需要指出的是，这里主要讨论的是理想精确投影概率模型下的自适应重构问题，尚未涉及有限重复采样、统计噪声和实验误差等现实因素。后续工作可进一步从两个方向展开：一是将该自适应策略推广至有限样本与噪声情形；二是结合具体实验平台，分析探测态制备、测量实现及算法复杂度等问题；总体来看，该方法为高维么正量子过程的高效表征提供了一种结构清晰且具有数值支撑的可行途径。

需要说明的是，本文中关于自适应优势的讨论主要基于两点：一是已有保证性结果中，非自适应方案所需独立测量数据条数仍为 $4d^2 - 2d - 4$ ，而已有自适应方案可降低至 $d^2 + d - 1$ ；二是本文方法在每一轮中根据当前候选集合直接优化下一轮探测态，使新增测量数据尽可能放大候选过程之间的差异。由此，自适应策略能够更系统地利用历史测量信息，提高单条独立测量数据对候选集合的约束效率。当然，本文并

不排除某些非自适应测量序列在特定目标过程上以较少数据取得较高后验保真度的可能性；但这种个别样本上的高保真并不等同于对一般未知么正过程的稳定高精度重构，也不等同于历史测量约束已经唯一确定该过程。

附录 A: 数值实现流程

本节给出本文自适应么正量子过程层析方案的数值实现流程。在么正先验下，候选空间被限制为么正矩阵集合 $U(d)$ ，从而无需引入一般 CPTP 约束下的半正定规划。算法的核心包括两个部分：一是基于历史数据求取当前估计；二是在当前候选集合约束下搜索下一轮最优探测态。

输入：系统维度 d ；历史探测矩阵集合 $\mathcal{V}_i = \{V_1, V_2, \dots, V_i\}$ ；历史投影概率集合 $\mathcal{P}_i = \{p_1, p_2, \dots, p_i\}$ ；容差参数 ϵ ；多初值个数 num ；最大迭代次数 $I_{\max}$ ；收敛阈值 tol 。

输出：当前估计 $\hat{U}_i$ ；下一轮最优探测矩阵 V_{i+1}^{opt} ；对应最大优化极差值 $g_{i+1}^{\max}$ 。

步骤 1：计算当前估计。在 $U(d)$ 上求解最小二乘问题

$$\hat{U}_i = \arg \min_{W \in U(d)} \sum_{a=1}^i [p(V_a; W) - p_a]^2.$$

数值实现中采用多初值非线性优化，以减弱局部极小值带来的影响。对每个初始点分别执行优化，并从所有可行解中选取残差最小者作为当前估计 $\hat{U}_i$ 。

步骤 2：定义当前候选集合。在给定容差 ϵ 的条件下，将候选集合写为

$$\Omega_i^{(\epsilon)} = \{W \in U(d) \mid |p(V_a; W) - p_a| \leq \epsilon, a = 1, \dots, i\}. \quad (\text{A1})$$

步骤 3：计算给定探测矩阵 V 的极差。对于任意候选探测矩阵 $V \in U(d)$ ，分别求解

$$p_{\max}(V) = \max_{W \in \Omega_i^{(\epsilon)}} p(V; W), \quad (\text{A2})$$

$$p_{\min}(V) = \min_{W \in \Omega_i^{(\epsilon)}} p(V; W), \quad (\text{A3})$$

并定义

$$g_{i+1}(V) = p_{\max}(V) - p_{\min}(V). \quad (\text{A4})$$

步骤 4：搜索下一轮最优探测态。在 $U(d)$ 上求解

$$V_{i+1}^{\text{opt}} = \arg \max_{V \in U(d)} g_{i+1}(V), \quad (\text{A5})$$

并记

$$g_{i+1}^{\max} = g_{i+1}(V_{i+1}^{\text{opt}}). \quad (\text{A6})$$

数值实现中同样采用多初值策略，以减小初始点对优化结果的影响。

步骤 5：实施下一轮测量并更新历史数据。将探测矩阵 V_{i+1}^{opt} 对应的探测态

$$|\varphi_{i+1}^{\text{opt}}\rangle = (V_{i+1}^{\text{opt}} \otimes I)|\Phi_d\rangle \quad (\text{A7})$$

用于下一轮测量，得到新的投影概率 p_{i+1} ，并将 V_{i+1}^{opt} , p_{i+1} 加入历史数据集中。

步骤 6：判断停止。若达到预设数据预算，或最大优化极差值 $g_{i+1}^{\max}$ 低于经验阈值 η ，则停止迭代；否则返回步骤 1 进入下一轮。

需要说明的是，在本文数值仿真中，重构保真度 F_i 仅用于后验评价算法性能，而不作为真实未知过程场景中的在线停止条件。

附录 B: 数值仿真中使用的目标过程

为考察本文方案在固定目标过程条件下的层析能力，数值仿真中在 $d = 4$ 和 $d = 5$ 两种维度下分别选取三个固定目标过程作为待重构对象。这样处理可以避免由于目标过程本身变化而引入额外影响，从而将比较重点集中在不同维度及不同初始化条件下算法的收敛行为上。

根据正文中的向量化表示，若

$$|\Psi_U\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}}|U\rangle, \quad (\text{B1})$$

则 Choi 纯态的系数矩阵为

$$C_U = \frac{U}{\sqrt{d}}. \quad (\text{B2})$$

将图 1 中使用的目标过程写成对应的系数矩阵 C_U 的两位小数近似值，而不是直接把它们写成么正矩阵 U 本身。对应么正矩阵可由

$$U = \sqrt{d}C_U$$

恢复。精确数值由程序生成并用于全部仿真，下面仅给出展示用的两位小数近似值。

1. 四维情形 $d = 4$

$$C_4^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.02 & -0.02 + 0.00i & 0.35 + 0.35i & -0.02 - 0.05i \\ -0.04 + 0.01i & 0.05 - 0.00i & -0.05 - 0.02i & -0.38 - 0.31i \\ -0.30 + 0.26i & 0.16 + 0.26i & 0.02 + 0.02i & 0.03 + 0.03i \\ 0.29 - 0.08i & 0.05 + 0.39i & -0.03 + 0.01i & -0.04 + 0.02i \end{pmatrix}. \quad (\text{B3})$$

$$C_4^{(2)} = \begin{pmatrix} 0.02 & -0.01 - 0.01i & 0.44 - 0.23i & 0.04 - 0.02i \\ -0.20 + 0.08i & -0.30 - 0.24i & -0.02 - 0.00i & 0.24 + 0.02i \\ 0.19 - 0.39i & -0.24 + 0.04i & -0.00 + 0.02i & 0.03 + 0.04i \\ 0.12 + 0.04i & 0.14 + 0.15i & -0.04 - 0.02i & 0.41 + 0.16i \end{pmatrix}. \quad (\text{B4})$$

$$C_4^{(3)} = \begin{pmatrix} 0.01 & 0.02 - 0.01i & 0.00 - 0.01i & 0.48 - 0.13i \\ 0.17 + 0.33i & -0.23 + 0.05i & -0.00 - 0.24i & 0.00 + 0.00i \\ -0.24 - 0.18i & -0.02 + 0.12i & -0.10 - 0.37i & -0.00 + 0.00i \\ 0.15 - 0.01i & 0.22 - 0.36i & -0.08 - 0.20i & -0.02 + 0.02i \end{pmatrix}. \quad (\text{B5})$$

2. 五维情形 $d = 5$

$$C_5^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.04 & -0.05 - 0.01i & 0.01 - 0.04i & -0.22 - 0.06i & 0.31 + 0.22i \\ 0.11 + 0.05i & -0.04 + 0.12i & -0.06 - 0.37i & 0.14 - 0.09i & 0.04 - 0.03i \\ -0.20 + 0.23i & 0.03 - 0.08i & -0.16 - 0.13i & -0.12 + 0.18i & -0.08 + 0.07i \\ -0.05 - 0.20i & -0.29 - 0.22i & -0.11 - 0.05i & 0.07 + 0.04i & -0.01 + 0.02i \\ -0.06 + 0.21i & -0.05 - 0.19i & 0.01 + 0.03i & 0.00 - 0.26i & 0.08 - 0.19i \end{pmatrix}. \quad (\text{B6})$$

$$C_5^{(2)} = \begin{pmatrix} 0.10 & 0.08 - 0.07i & -0.08 - 0.12i & -0.02 - 0.04i & -0.11 - 0.38i \\ 0.04 - 0.22i & -0.23 + 0.08i & 0.04 - 0.22i & 0.10 + 0.17i & 0.02 - 0.02i \\ -0.03 - 0.30i & 0.11 + 0.02i & 0.08 + 0.26i & 0.00 + 0.06i & 0.06 - 0.11i \\ -0.09 - 0.07i & -0.14 + 0.14i & 0.03 - 0.04i & -0.33 - 0.18i & 0.01 - 0.04i \\ 0.14 - 0.12i & 0.26 + 0.10i & 0.14 - 0.18i & -0.02 - 0.10i & -0.08 + 0.14i \end{pmatrix}. \quad (\text{B7})$$

$$C_5^{(3)} = \begin{pmatrix} -0.18 & 0.01 - 0.29i & 0.00 + 0.07i & 0.03 - 0.02i & -0.15 - 0.23i \\ -0.02 + 0.14i & 0.10 + 0.07i & 0.01 + 0.08i & -0.25 + 0.29i & -0.07 - 0.06i \\ -0.18 + 0.08i & 0.06 - 0.21i & -0.04 - 0.01i & -0.05 + 0.04i & 0.18 + 0.28i \\ -0.29 + 0.09i & 0.02 + 0.23i & 0.10 + 0.12i & 0.19 + 0.00i & 0.03 - 0.01i \\ -0.02 + 0.13i & 0.02 + 0.05i & -0.40 - 0.08i & 0.10 + 0.01i & -0.07 - 0.02i \end{pmatrix}. \quad (\text{B8})$$

附录 C: 低于参数计数参考下界时的失真度统计

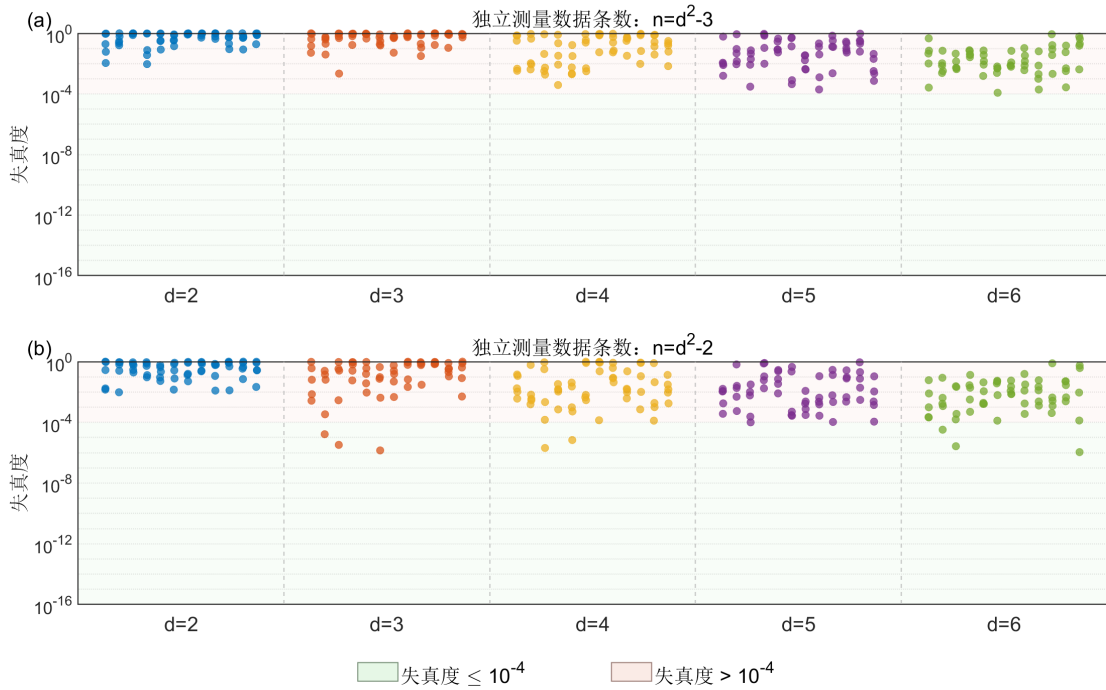


图 C1 低于参数计数参考下界时不同维度的失真度统计。其中，(a) 和 (b) 分别对应独立测量数据条数取 $n = d^2 - 3$ 和 $n = d^2 - 2$ 的情形，纵轴为失真度 $\Delta = 1 - F$ ，并采用对数坐标。图中阴影区域分别表示 $\Delta \leq 10^{-4}$ 和 $\Delta > 10^{-4}$ 的区间。

Fig. C1. Infidelity statistics for different dimensions below the parameter-counting reference lower bound. Panels (a) and (b) correspond to the cases where the number of independent measurement data is set to $n = d^2 - 3$ and $n = d^2 - 2$, respectively. The vertical axis denotes the infidelity $\Delta = 1 - F$ and is shown on a logarithmic scale. The shaded regions indicate the ranges where $\Delta \leq 10^{-4}$ and $\Delta > 10^{-4}$, respectively.

正文图 1 中可以看到，部分重构轨迹在独立测量数据条数小于 $d^2 - 1$ 时已经达到较高保真度。这里需要强调的是， $d^2 - 1$ 是由么正过程独立参数个数给出的参数计数参考下界，反映的是一般未知么正过程的自由度规模和必要约束数目的参考尺度，并不意味着每一条具体数值重构轨迹都必须在达到 $d^2 - 1$ 条数据之后才可能出现较高后验保真度。

对于某些特定目标过程、特定随机初值以及特定自适应优化路径，前几轮自适应选择到的探测态可能已经具有较强判别能力，使当前最小二乘估计较快接近真实过程。因此，个别轨迹可能在 $n < d^2 - 1$ 时提前进入高保真区域。然而，这种后验估计的高保真并不等价于历史测量约束已经唯一确定该未知么正过程；在数据条数低于参数计数参考下界时，候选集合通常仍可能存在非平凡自由度。因此，少数轨迹提前达到高保真区域不能理解为少于 $d^2 - 1$ 条独立测量数据已经足以稳定唯一重构一般未知么正过程。

为进一步说明这一点，本文补充统计了低于 $d^2 - 1$ 数据条数时的失真度分布。如图 C1 所示，图 C1(a) 和图 C1(b) 分别对应独立测量数据条数取 $n = d^2 - 3$ 和 $n = d^2 - 2$ 的情形。图中横轴按照系统维度 $d = 2, 3, 4, 5, 6$ 分组，每一组中的散点对应不同目标么正过程以及不同随机初值条件下得到的重构结果；纵轴为失真度 $\Delta = 1 - F$ ，并采用对数坐标。本文仍以 $\Delta \leq 10^{-4}$ 作为高精度重构判据，图中阴影区域分别表示达到和未达到该判据的结果区间。

从图 C1 可以看出，当独立测量数据条数取 $n = d^2 - 3$ 和 $n = d^2 - 2$ 时，虽然部分样本已经进入 $\Delta \leq 10^{-4}$ 的高精度区域，但仍有大量样本停留在 $\Delta > 10^{-4}$ 的区域，尤其在较高维度下这一现象更加明显。这说明，在低于参数计数参考下界的数据条数下，重构结果对目标过程和初始化条件仍较为敏感，尚不能稳定实现高精度重构。

因此，图 1 中少数轨迹在 $n < d^2 - 1$ 时提前达到高保真，应理解为特定目标过程和特定优化路径下的快速收敛现象，而不是对参数计数参考下界的否定。上述统计结果进一步支持本文的表述： $d^2 - 1$ 应理解为由参数计数给出的参考下界，而在本文所考察的维度和精度阈值范围内， d^2 条独立测量数据对应更加稳定的高精度重构表现。

附录 D: 八维情形下的代表性数值结果

为进一步回应高维数值验证的问题，本文补充给出了维度 $d = 8$ 时的代表性重构结果。正文中已经对 $d = 2$ 至 $d = 6$ 的多个维度、多个目标过程以及不同初始化条件进行了统计验证，用以展示所提自适应探测态优化方案随维度变化的整体收敛趋势和数据压缩能力。本附录进一步选取 $d = 8$ 情形下的一个代表

性目标么正过程，考察其重构保真度随独立测量数据条数增加的演化情况。

如图 D1 所示，横轴为独立测量数据条数 n ，纵轴为当前估计过程与目标过程之间的重构保真度 F 。图中虚线分别标出参数计数参考下界 $d^2 - 1$ 和已有自适应方案的保证性数据条数标杆 $d^2 + d - 1$ 。对于 $d = 8$ ，这两个参考位置分别为 $d^2 - 1 = 63$ 和 $d^2 + d - 1 = 71$ 。

从图 D1 可以看出，在该代表性样本中，随着独立测量数据条数逐步增加，重构保真度整体呈上升趋势。虽然早期和中期存在一定波动，但在数据条数接近 d^2 时，保真度进入高保真区域，并在随后进一步

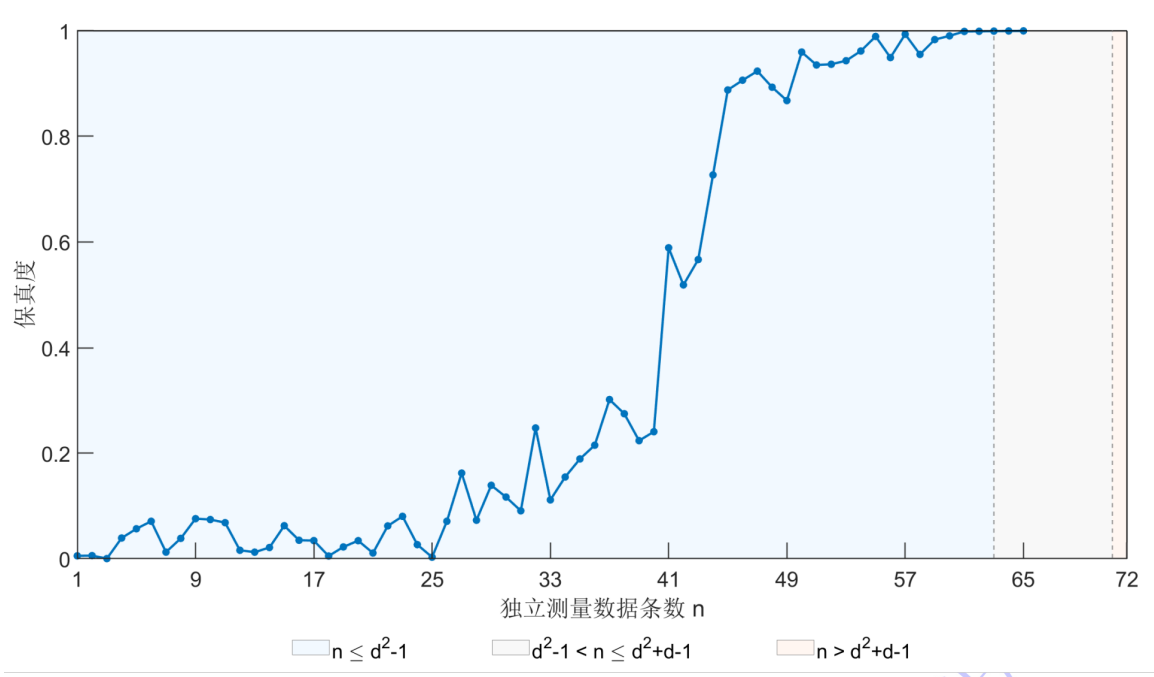


图 D1 维度 $d = 8$ 时代表性未知么正过程的重构保真度随独立测量数据条数的演化。横轴为独立测量数据条数 n ，纵轴为重构保真度 F 。虚线分别表示参数计数参考下界 $d^2 - 1$ 和已有自适应方案的保证性数据条数标杆 $d^2 + d - 1$ 。对于 $d = 8$ ，二者分别对应 $n = 63$ 和 $n = 71$ 。图中阴影区域分别表示独立测量数据条数不大于 $d^2 - 1$ 、在 $d^2 - 1$ 到 $d^2 + d - 1$ 之间和大于 $d^2 + d - 1$ 的区间。

Fig. D1. Evolution of the reconstruction fidelity with the number of independent measurement data for a representative unknown unitary process in dimension $d = 8$. The horizontal axis denotes the number of independent measurement data n , and the vertical axis denotes the reconstruction fidelity F . The dashed lines indicate the parameter-counting reference lower bound $d^2 - 1$ and the guaranteed data-count benchmark $d^2 + d - 1$ of an existing adaptive scheme, corresponding to $n = 63$ and $n = 71$ for $d = 8$, respectively. The shaded regions indicate the ranges where the number of independent measurement data is no greater than $d^2 - 1$, between $d^2 - 1$ and $d^2 + d - 1$, and greater than $d^2 + d - 1$, respectively.

趋近于 1。这一现象与正文中 $d = 2$ 至 $d = 6$ 的统计结果所体现的整体趋势一致，即所提自适应探测态优化方案能够通过历史测量数据逐步压缩候选集合，并在接近参数计数参考下界的数据条数附近实现高精度重构。

需要说明的是，随着维度升高，算法中涉及的么正约束非线性优化、候选集合极值搜索以及多初值优化的计算开销都会显著增加。因此，本附录中的 $d = 8$ 结果主要作为更高维情形下的代表性数值演示，用于补充说明所提方案在更高维度下的可行性和收敛趋势。更大规模、更系统的高维统计验证，以及面向高维问题的更高效数值优化实现，将作为后续工作进一步开展。

参考文献

- [1] Chuang I L, Nielsen M A 1997 *J. Mod. Opt.* **44** 2455
- [2] Poyatos J F, Cirac J I, Zoller P 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 390
- [3] Ladd T D, Jelezko F, Laflamme R, Nakamura Y, Monroe C, O'Brien J L 2010 *Nature* **464** 45
- [4] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, Chen M C, Peng L C, Luo Y H, Qin J, Wu D, Ding X, Hu Y, Hu P, Yang X Y, Zhang W J, Li H, Li Y X, Jiang X, Gan L, Yang G W, You L X, Wang Z, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W 2020 *Science* **370** 1460
- [5] Shor P W 1994 In *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (Santa Fe, USA), p 124
- [6] Grover L K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 325
- [7] Gisin N, Ribordy G, Tittel W, Zbinden H 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 145
- [8] Xu F H, Ma X F, Zhang Q, Lo H K, Pan J W 2020 *Rev. Mod. Phys.* **92** 025002
- [9] Bennett C H, Brassard G 1984 In *Proceedings of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing* (Bangalore, India), p 175
- [10] Chen Y A, Zhang Q, Chen T Y, Cai W Q, Liao S K, Zhang J, Chen K, Yin J, Ren J G, Chen Z, Han S L, Yu Q, Liang K, Zhou F, Yuan X, Zhao M S, Wang T Y, Jiang X, Zhang L, Liu W Y, Li Y,

Shen Q, Cao Y, Lu C Y, Shu R, Wang J Y, Li L, Liu N L, Xu F H, Wang X B, Peng C Z, Pan J W
2021 *Nature* **589** 214

- [11] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 010401
- [12] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L 2011 *Nat. Photonics* **5** 222
- [13] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [14] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, DiVincenzo D P, Margolus N, Shor P, Sleator T, Smolin J A, Weinfurter H 1995 *Phys. Rev. A* **52** 3457
- [15] DiVincenzo D P 2000 *Fortschr. Phys.* **48** 771
- [16] Gutoski G, Johnston N 2014 *J. Math. Phys.* **55** 032201
- [17] Baldwin C H, Kalev A, Deutsch I H 2014 *Phys. Rev. A* **90** 012110
- [18] Wang H Y, Zheng W Q, Yu N K, Li K R, Lu D W, Xin T, Li C, Ji Z F, Kribs D, Zeng B, Peng X H, Du J F 2016 *Sci. China Phys. Mech.* **59** 100313
- [19] Huszár F, Houlby N M T 2012 *Phys. Rev. A* **85** 052120
- [20] Mahler D H, Rozema L A, Darabi A, Ferrie C, Blume-Kohout R, Steinberg A M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 183601
- [21] Kravtsov K S, Straupe S S, Radchenko I V, Houlby N M T, Huszár F, Kulik S P 2013 *Phys. Rev. A* **87** 062122
- [22] Hou Z B, Zhu H J, Xiang G Y, Li C F, Guo G C 2016 *npj Quantum Inf.* **2** 16001
- [23] Altepeter J B, Branning D, Jeffrey E, Wei T C, Kwiat P G, Nielsen M A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 193601
- [24] D'Ariano G M, Lo Presti P 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4195
- [25] Leung D W 2003 *J. Math. Phys.* **44** 528

[26] Choi M D 1975 *Linear Algebra Appl.* **10** 285

录用稿件，非最终出版稿

Adaptive Unitary Quantum Process Tomography

Approaching the Parameter-Counting Reference

Lower Bound*

WANG Peilin[#] XIAO Tianqi^{#†} ZHOU Zhangkai ZHOU Xiaoqi[‡]

(*School of Physics and State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies,
Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China*)

Abstract

Quantum process tomography is a fundamental tool for characterizing unknown quantum operations in quantum computing, communication, and metrology. For a general quantum channel on a d -dimensional Hilbert space, the number of independent real parameters scales as $O(d^4)$, leading to rapidly increasing measurement resources. If the process is unitary, only $d^2 - 1$ independent real parameters remain after removing the global phase. Existing adaptive schemes have reduced the required number of independent measurement data for unitary quantum process tomography to $d^2 + d - 1$, but a gap still remains from the parameter-counting reference lower bound $d^2 - 1$.

We propose an adaptive quantum process tomography scheme for unitary processes to approach this bound. The method is formulated in the framework of entanglement-assisted quantum process tomography. By applying the unknown unitary operation to one subsystem of a maximally entangled state, the process characterization is converted into the reconstruction of the corresponding Choi pure state. In the ideal noiseless model, each measured projection probability is regarded as one independent datum, and all historical probabilities constrain a candidate unitary set.

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62575313).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: tianqi.xiao.quantum@gmail.com

[‡] Corresponding author. E-mail: zhouxq8@mail.sysu.edu.cn

The key innovation is the direct adaptive optimization of probe states. Instead of selecting the next probe state from a predetermined finite set, we search for it in the experimentally accessible probe-state space induced by unitary operations. For each candidate probe state, the range of the predicted projection probabilities over the current candidate set is used as a distinguishability measure. The probe state with the largest probability range is selected, so that the next measurement can amplify the difference among the remaining candidates and efficiently shrink the feasible set.

Numerical simulations for different dimensions, target unitary processes, and random initial conditions show that the proposed strategy steadily improves the reconstruction fidelity. Within the tested dimensions and accuracy thresholds, stable high-fidelity reconstruction can be achieved with about d^2 independent measurement data, close to $d^2 - 1$. Statistical comparisons around $d^2 - 1$, d^2 , and $d^2 + 1$ indicate that d^2 provides more stable high-precision reconstruction in the tested cases. A representative $d = 8$ result also supports the convergence trend in a higher-dimensional case. This work provides a structurally clear and numerically supported adaptive approach for efficient unitary quantum process tomography near the minimal-data regime, while finite-sample and noisy scenarios remain for future study.

Keywords: quantum process tomography; adaptive measurement; unitary channel