

量子机器学习综述*

王健¹, 张蕊¹, 姜楠²

¹(智能交通数据安全与隐私保护技术北京市重点实验室(北京交通大学), 北京 100044)

²(北京工业大学 信息学部, 北京 100124)

通信作者: 姜楠, E-mail: jiangnan@bjut.edu.cn



摘要: 近年来, 机器学习一直是被关注和探讨的研究热点, 被应用到各领域并在其中起着重要作用. 但随着数据量的不断增加, 机器学习算法训练时间越来越长. 与此同时, 量子计算机表现出强大的运算能力. 因此, 有研究人员尝试用量子计算的方法解决机器学习训练时间长的问题, 量子机器学习这一领域应运而生. 量子主成分分析、量子支持向量机、量子深度学习等量子机器学习算法相继被提出, 并有实验证明了量子机器学习算法有显著的加速效果, 使得量子机器学习的研究展现出逐步走高的趋势. 对量子机器学习算法进行综述. 首先介绍量子计算基础; 然后对量子监督学习、量子无监督学习、量子半监督学习、量子强化学习以及量子深度学习 5 类量子机器学习算法进行介绍; 接着对量子机器学习的相关应用进行介绍并给出了算法实验; 最后进行总结和展望.

关键词: 量子机器学习; 量子计算; 机器学习; 量子深度学习; 量子实验

中图法分类号: TP18

中文引用格式: 王健, 张蕊, 姜楠. 量子机器学习综述. 软件学报. <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7042.htm>

英文引用格式: Wang J, Zhang R, Jiang N. Survey on Quantum Machine Learning. Ruan Jian Xue Bao/Journal of Software (in Chinese). <http://www.jos.org.cn/1000-9825/7042.htm>

Survey on Quantum Machine Learning

WANG Jian¹, ZHANG Rui¹, JIANG Nan²

¹(Beijing Key Laboratory of Security and Privacy in Intelligent Transportation (Beijing Jiaotong University), Beijing 100044, China)

²(Faculty of Information Technology, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

Abstract: In recent years, machine learning has always been a research hotspot, and has been applied to various fields with an important role played. However, as the data amount continues to increase, the training time of machine learning algorithms is getting longer. Meanwhile, quantum computers demonstrate a powerful computing ability. Therefore, researchers try to solve the problem of long machine learning training time, which leads to the emergence of quantum machine learning. Quantum machine learning algorithms have been proposed, including quantum principal component analysis, quantum support vector machine, and quantum deep learning. Additionally, experiments have proven that quantum machine learning algorithms have a significant acceleration effect, leading to a gradual upward trend in research on quantum machine learning. This study reviews research on quantum machine learning algorithms. First, the fundamental concepts of quantum computing are introduced. Then, five quantum machine learning algorithms are presented, including quantum supervised learning, quantum unsupervised learning, quantum semi-supervised learning, quantum reinforcement learning, and quantum deep learning. Next, related applications of quantum machine learning are demonstrated with the algorithm experiments provided. Finally, the relevant summary and prospect of future study are discussed.

Key words: quantum machine learning; quantum computing; machine learning; quantum deep learning; quantum experiment

* 基金项目: 中央高校基本科研业务费专项 (2022YJS027); 国家自然科学基金 (61502016); 国家重点研发计划 (2020YFB2103800); 智能交通数据安全与隐私保护技术北京市重点实验室开放课题 (202209300499)

收稿时间: 2023-05-22; 修改时间: 2023-07-13; 采用时间: 2023-08-24; jos 在线出版时间: 2024-01-24

机器学习是人工智能的重要组成部分,它研究的是如何让计算机实现自我学习,从而拥有一定的“智能”。从20世纪50年代至21世纪初期,机器学习发展越来越快,应用越来越广泛,线性判别分析、人工神经网络、支持向量机等一个个优秀的算法被提出。机器学习被广泛应用于我们的生活中,可以说生活在信息化时代的我们,身边存在着大量的机器学习产品。

但是机器学习算法的训练复杂度通常都比较高。K近邻、支持向量机等经典机器学习算法的时间复杂度均在 $O(N)$ 以上(N 为样本数量),尤其是深度学习对算力要求极高,对于庞大的训练样本,需要花费大量的时间进行训练。随着大数据时代的到来,信息海量增长,仅依靠计算机带来的高速运算对如此庞大的数据进行处理已经越来越困难。提高算法的效率已经成为机器学习领域重要的研究课题。

量子计算由于叠加、并行等特性大大提升了算法效率,为解决一些计算困难问题提供了新思路。20世纪80年代,Feynman^[1]最早提出了量子计算的概念,Deutsch^[2]研究了图灵机的量子模型——量子图灵机。Shor^[3]在1994年提出了对大整数进行因式分解的Shor算法,相对于经典算法来说该算法能够实现指数级加速,Grover^[4]在1996年提出了能够在无序数据库中找到复合条件的元素的Grover搜索算法,相对于经典算法来说该算法能够实现平方级加速,这些算法充分体现了量子计算强大的能力。1995年,文献[5]提出了“Qubit(量子比特)”的概念,相对于经典的“0-1”比特,量子比特的存储性能达到了指数级的提升。之后一些基础的量子算法被提出,包括量子相位估计^[6]、交换测试^[7]、HHL算法^[8]等。这些算法为量子计算在各个方面的应用打下了基础,尤其是量子机器学习(quantum machine learning, QML)领域。QML是一个集量子力学和机器学习优势于一身的交叉领域^[9-12]。一些现有的QML算法可以解决当前信息社会中数据量大、训练过程慢的问题,在时间上提供指数级的加速。

由于量子机器学习算法是在机器学习的基础上形成的一个领域,因此,与机器学习算法类似,根据算法的训练方式和训练时输出的可用性,量子机器学习主要分为监督学习、无监督学习、半监督学习、强化学习和深度学习5种类型。监督学习算法中的训练数据带有标注,训练过程能够根据这些数据得到一个最优模型;无监督学习(也叫非监督学习)与监督学习不同之处在于数据都没有标注,需要直接对数据进行建模;半监督学习结合监督学习和无监督学习的优势,应用于只拥有少量有标注数据的情况;强化学习是不需要预先给定数据的第3种学习范式,它通过与环境的交互进行学习。深度学习是在上述4种机器学习算法的基础上发展起来的,其网络结构层次更深、更复杂。

量子计算和机器学习的结合最早出现在1995年,Kak^[13]考虑到生物信息处理中存在量子效应,理论上提出了量子神经网络(quantum neural network, QNN)的概念。此后QNN领域得到了关注。2000年,Ventura等人^[14]提出了基于Grover搜索算法和纠缠神经网络的量子联想神经网络模型,相对于经典算法来说,该算法达到了二次加速。参数化量子神经网络(parameterized QNN, PQNN)最初由Matsui等人^[15]在2000年提出,当时并没有得到重视。但是,参数化量子线路(parameterized quantum circuit, PQC)能够在含噪中等规模量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)设备上有效地实现。随着NISQ的大规模应用,基于PQC的量子神经网络成为近几年来被研究较多的量子神经网络算法。PQC的初始参数通常是随机生成的,有时会引起梯度消失。因此,2019年,Grant等人^[16]提出了一种可避免梯度消失的模型,进而可以有效地对量子神经网络进行训练。随后,量子生成对抗网络(quantum generative adversarial network, QGAN)、量子玻尔兹曼机等模型被提出。

除了神经网络,其他监督学习算法的量子版本也被提出。2014年Rebentrost等人^[17]提出量子支持向量机,与经典的最小二乘支持向量机相比,它表现出指数加速。Bishwas等人^[18]实现了量子多分类支持向量机。K近邻作为机器学习中一种常用的分类算法,在高维特征空间上进行计算需要花费大量的时间,2014年,Wiebe等人^[19]提出量子最近邻算法,相对于经典算法,该算法达到了二次加速。Chen等人^[20]利用Grover算法寻找最相似的 K 个样本,从而实现量子K近邻算法。除了上述分类算法之外,用于预测连续值的量子回归算法也被提出^[21-23]。

无监督算法方面,2007年,Aïmeur等人^[24]提出了量子分裂聚类算法和量子K中位数算法。Hou等人^[25]在2022年提出了K均值聚类算法,并将其应用于心脏病检测。同年,谱聚类算法被提出^[26]。此外,量子降维算法也是一类重要的无监督机器学习算法,目前已经提出的算法包括量子主成分分析(quantum principal component analysis,

QPCA)^[27,28]和量子奇异值阈值算法 (quantum singular value thresholding, QSVT)^[29]等。

除此之外,量子半监督支持向量机^[30]、量子一分类技术^[31]等量子半监督学习被提出,量子强化学习^[32-34]和量子深度学习算法^[35-37]也被提出。表1给出了量子机器学习算法的分类及其对应的主要参考文献。

表1 量子机器学习分类

类别	子类别	名称
量子监督学习	量子分类算法	量子神经网络 ^[16]
		量子支持向量机 ^[17]
		量子K近邻 ^[20]
量子无监督学习	量子回归算法	量子线性回归 ^[21]
		量子岭回归 ^[22]
		量子逻辑回归 ^[23]
量子无监督学习	量子聚类算法	量子K均值聚类 ^[25]
		量子层次聚类 ^[24]
		量子谱聚类 ^[26]
量子半监督学习	—	量子主成分分析 ^[27]
		量子奇异值阈值算法 ^[29]
量子半监督学习	—	量子半监督支持向量机 ^[30]
		量子一分类算法 ^[31]
量子强化学习	基于经典环境的量子强化学习	基于传统算法 ^[32]
	基于量子环境的量子强化学习 ^[34]	基于情景记忆 ^[33]
量子深度学习	—	—
	—	量子玻尔兹曼机 ^[35]
	—	量子生成对抗网络 ^[36]
—	—	量子深度强化学习 ^[37]

此外,能够运行量子算法的量子计算机硬件也处在快速发展过程中。2007年,加拿大的D-Wave公司研发出量子计算机猎户星座。该量子计算机仅能处理一些最优化问题,与通用计算机相距较远。尽管如此,猎户星座的诞生对量子计算机领域来说具有里程碑的意义。此后,IBM推出超导量子计算机Eagle;霍尼韦尔发布离子阱量子计算机H1;谷歌推出量子计算机Sycamore;本源量子推出超导量子计算机本源悟源。虽然目前已经有了很多版本的量子计算机,但是现在离通用的量子计算机还有一段距离,目前NISQ设备是主流的量子计算机。

本文主要综述量子机器学习算法,对量子算法和相应经典算法之间的复杂度进行对比,并对相同类型的量子算法进行分析比较。第1节对量子计算基础和量子基本算法进行介绍。第2-6节分别介绍量子监督学习算法、量子无监督学习算法、量子半监督学习算法、量子强化学习以及量子深度学习5类量子机器学习算法。第7节为量子机器学习算法的应用。第8节为实验。第9节为对该文的总结和对未来工作的展望。

1 量子基础

本节介绍量子机器学习的基础知识,包括量子计算基础知识^[6]和量子机器学习中常用的基础算法。

1.1 量子计算基础知识

比特是经典计算机的基本单元,相应的,量子计算机的基本单元为量子比特。一个经典比特的状态只能处于0和1中的一个,但是量子比特的状态可以是 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的线性组合,其中 $| \cdot \rangle$ 为右矢,是用于表示量子态的符号。数学上, $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 可以被看作两个基向量,即 $|0\rangle = (1 \ 0)^T$ 和 $|1\rangle = (0 \ 1)^T$ 。因此,任意的单量子比特态 $|\phi\rangle$ 可以表示成: $|\phi\rangle = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle = (\gamma \ \delta)^T$,其中系数 γ 和 δ 为复数,称为振幅,满足 $|\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$,这种被表示成线性组合的量子态也被称为叠加态。右矢 $|\phi\rangle$ 的共轭转置(用“+”表示)为左矢,即 $|\phi\rangle^+ = \langle\phi| = (\gamma^* \ \delta^*)$,其中 γ^* 和 δ^* 分别表示 γ 和 δ 的

复共轭. 多个量子比特通过张量积的形式复合为多量子比特系统. 例如由两个量子比特组成的系统的基向量为 $\{|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle\} = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, 式中, $|x\rangle \otimes |y\rangle$ ($x, y \in \{0, 1\}$) 为 $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$ 的张量, 还可以记为 $|xy\rangle$ 、 $|x\rangle|y\rangle$ 或者 $|x, y\rangle$. n 量子比特系统中的量子态是维度为 2^n 的列向量.

量子门 U (也被称作算子) 是作用于量子比特的酉矩阵, 即 U 是一个 $N \times N$ 复矩阵, 且满足 $U^+U = UU^+ = I_N$, 其中, U^+ 为 U 的共轭转置. 作用于 n 个量子比特上的量子门为 $2^n \times 2^n$ 的酉矩阵, 以改变量子态的振幅. 因此, 一个量子门作用于一个量子态可以看作一个 $2^n \times 2^n$ 矩阵乘以一个 $2^n \times 1$ 向量. 公式 (1) 列出了常用的量子门, 在公式 (1) 中 X 、 Y 和 Z 门通常被称为泡利算子; $R_x(\theta)$ 、 $R_y(\theta)$ 和 $R_z(\theta)$ 被称为旋转门. $CNOT$ 门作用在双量子比特上, 其余的量子门均作用在单量子比特上.

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, R_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix},$$

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{-i\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{i\theta}{2}\right) \end{pmatrix}, CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

量子门作用于量子比特最终得到的是一个量子态, 为了得到量子态中的信息, 必须对其进行测量. 因此, 测量在量子计算中起着至关重要的作用. 事实上, 测量算子是一个厄米矩阵, 即测量算子 M 是一个 $N \times N$ 的复矩阵, 且满足 $M^+ = M$. 厄米矩阵 M 可以被分解成 $M = \sum_m m |m\rangle \langle m|$ 的形式, 其中 m 为 M 的特征值, $|m\rangle$ 为相应的特征向量. 所有的特征向量组成一组正交完备基. 因此, 对量子态 $|\varphi\rangle$ 进行测量时, 得到 m 的概率为 $P(m) = |\langle m | \varphi \rangle|^2$, 对应的末态为 $\frac{\langle m | \varphi \rangle |\varphi\rangle}{P(m)}$. 可见, 量子计算中的测量会改变量子比特的状态, 由 $|\varphi\rangle$ 变为 $\frac{\langle m | \varphi \rangle |\varphi\rangle}{P(m)}$. 这种现象被称为量子态坍缩, 由测量引起, 这是与经典测量非常大的不同. 测量是量子计算中的一把双刃剑, 一方面它不但能得到末态, 还能同时进行一些操作, 可能会给算法设计带来一些便利; 另一方面, 一次测量, 只能得到多个特征向量中的一个, 到底能得到哪一个还是随机的, 而且原始状态 $|\varphi\rangle$ 也已经不复存在, 因此要想得到所有的特征向量和特征值, 就得一次次重复制备 $|\varphi\rangle$, 并重复测量, 这将会消耗大量的量子资源^[6].

1.2 量子基本算法

在量子机器学习算法中, 通常会用到一些量子基本算法作为程序模块. 它们在量子机器学习中起到了非常重要的作用, 其量子线路图如图 1 所示. 量子线路图是量子算法的一种描述方式, 其中每一条横线表示一个量子比特或者几个量子比特的集合, 用来存储某个变量, 称为一个寄存器^[6]. 量子线路图中的所有横线从上到下依次记为第 1 寄存器、第 2 寄存器、...、第 n 寄存器. 寄存器上的 H 、 X 、 QFT 、 U 等都是量子门或者由多个量子门组成的模块, 代表了某种操作.

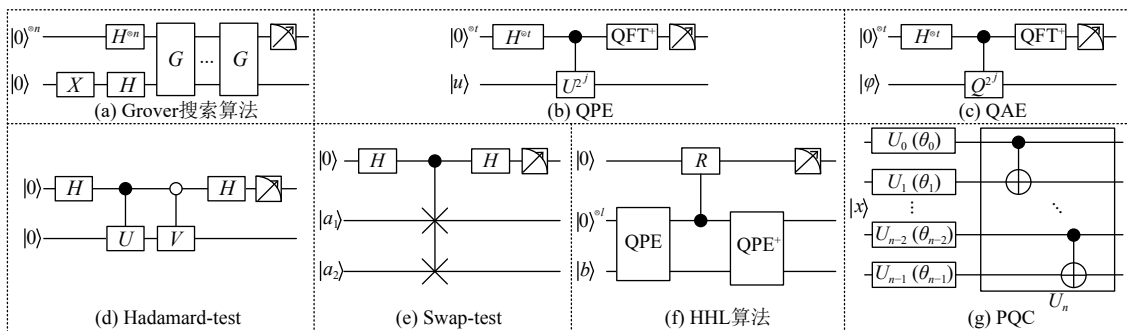


图 1 量子基本算法线路图

(1) Grover 搜索算法^[6]. 假设样本集中共有 N 个无序样本, 经典计算机搜索到符合条件的样本的复杂度为 $O(N)$. 量子搜索算法是由 Grover 在 1995 年提出的一种量子算法, 被称为 Grover 搜索算法, 其复杂度仅为 $O(\sqrt{N})$. Grover 搜索算法的量子线路图如图 1(a) 所示, 其输入为 $|0\rangle^{\otimes(n+1)}$. 首先使用 n 个 H 门作用于第 1 寄存器 $|0\rangle^{\otimes n}$ 演化出所有样本的下标, 并使用 X 门和 H 门作用于第 2 寄存器 $|0\rangle$ 演化出 $\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$, 则输入态演化为 $\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$; 然后重复执行振幅放大算子 G (能够将量子态的振幅放大的算子) 逐步提高符合条件的解的概率, 使得该概率最终能够接近或者达到 1, 以便测量时能够以接近 1 的概率将符合条件的解提取出来.

(2) 量子相位估计 (quantum phase estimation, QPE)^[6]. 假设酉矩阵 U 的特征值为 $e^{2\pi i\varphi}$, 相应的特征向量为 $|u\rangle$, QPE 利用 $U|u\rangle = e^{2\pi i\varphi}|u\rangle$ 和逆量子傅里叶变换 (inverse quantum Fourier transform, QFT⁺) 将特征值 $e^{2\pi i\varphi}$ 的相位 φ 存储在基态中, 进而通过测量得到 φ , 由于得到的是 φ 的近似值, 因此称为量子相位估计. 假设用 t 个量子比特表示 φ , 则 $\varphi \approx \frac{\varphi_1 \times 2^{t-1} + \dots + \varphi_t \times 2^0}{2^t}$. QPE 的量子线路图如图 1(b) 所示, 其输入为 $|0\rangle^{\otimes t}|u\rangle$. 首先使用 t 个 H 门作用于第 1 寄存器 $|0\rangle^{\otimes t}$ 得到叠加态 $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{k=0}^{2^t-1} |k\rangle|u\rangle$; 然后执行受控 U^{2^j} ($j=0, 1, \dots, t-1$) 得到 $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{k=0}^{2^t-1} |k\rangle (|0\rangle + e^{2\pi i\varphi 2^j} |1\rangle)$; 再对第 1 寄存器执行逆量子傅里叶变换得到 $|\varphi_1 \dots \varphi_t\rangle$; 最后通过测量得到 $\varphi_1, \dots, \varphi_t$, 进而得到 $\frac{\varphi_1 \times 2^{t-1} + \dots + \varphi_t \times 2^0}{2^t}$.

(3) 量子振幅估计 (quantum amplitude estimation, QAE)^[38]. 量子振幅估计是结合 Grover 搜索算法中的振幅放大算子和量子相位估计的一种算法. 给定一个酉变换 U , 作用于量子态 $|0\rangle^{\otimes n}$ 得到量子态 $|\varphi\rangle = U|0\rangle^{\otimes n} = |\varphi_0\rangle + |\varphi_1\rangle$, 则量子振幅估计算法可以估计出得到 $|\varphi_1\rangle$ 的概率 $a = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle$. QAE 的量子线路图如图 1(c) 所示, 其输入为 $|0\rangle^{\otimes t}|\varphi\rangle$. 首先对第 1 寄存器执行 t 个 H 门制备叠加态 $\frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{k=0}^{2^t-1} |k\rangle|\varphi\rangle$; 然后执行受控 Q^{2^j} ($j=0, 1, \dots, t-1$) 操作和逆量子傅里叶变换得到 $\frac{1}{\sqrt{2}} |2^t\theta_a/\pi\rangle e^{i\theta_a} |\varphi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |2^t(1-\theta_a/\pi)\rangle e^{-i\theta_a} |\varphi_-\rangle$, 其中 $a = \sin^2\theta_a$, $|\varphi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{1-a}} |\varphi_0\rangle \mp \frac{i}{\sqrt{a}} |\varphi_1\rangle \right)$; 最后进行测量得到 $|y_1\rangle = |2^t\theta_a/\pi\rangle$ 和 $|y_2\rangle = |2^t(1-\theta_a/\pi)\rangle$, 进而计算出 a 的近似值 $\tilde{a} = \sin^2(\pi y/2^t)$, 其中 $y = y_1$ 或 $y = y_2$.

(4) 哈达玛测试 (Hadamard-test)^[39]. 在经典计算中, 两个向量的内积在很多方面都有应用. 在量子计算中, 一个向量可以表示成一个量子态, 两个量子态的内积在量子计算中起着至关重要的作用. 令 $U|0\rangle = |a_1\rangle$, $V|0\rangle = |a_2\rangle$, 哈达玛测试可以用于计算两个量子态 $|a_1\rangle$ 和 $|a_2\rangle$ 的内积 $\langle a_1 | a_2 \rangle$, 由于量子态的振幅为复数, 因此内积也是复数, 包括实部 ($\text{Re}\langle a_1 | a_2 \rangle$) 和虚部 ($\text{Im}\langle a_1 | a_2 \rangle$) 两部分. 计算实部的量子线路图如图 1(d) 所示, 其输入为 $|0\rangle|0\rangle$. 首先使用 H 门作用于第 1 寄存器得到 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|0\rangle)$; 然后执行受控 U 操作和受控 V 操作得到 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|a_2\rangle + |1\rangle|a_1\rangle)$; 再使用 H 门作用于第 1 寄存器可得 $\frac{1}{2} (|0\rangle(|a_2\rangle + |a_1\rangle) + |1\rangle(|a_2\rangle - |a_1\rangle))$; 最后对第 1 寄存器进行测量得到 $|0\rangle$ 的概率为 $P(0) = \frac{1}{2} + \frac{\text{Re}\langle a_1 | a_2 \rangle}{2}$. 进而可计算出 $\text{Re}\langle a_1 | a_2 \rangle = 2P(0) - 1$. 由于 $\text{Im}\langle a_1 | a_2 \rangle = -\text{Re}\langle a_1 | i|a_2 \rangle$ 且算子 $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$, 因此只需在图 1(d) 第 1 个 H 门后增加一个算子 S 就可以得到 $\text{Im}\langle a_1 | a_2 \rangle$.

(5) 交换测试 (Swap-test)^[7]. 在量子计算中, 两个量子态 $|a_1\rangle$ 和 $|a_2\rangle$ 的保真度 $|\langle a_1 | a_2 \rangle|^2$ 是用于衡量两个量子态的相似程度的一种方法. 交换测试可以用来计算保真度, 即内积模的平方. 交换测试的量子线路图如图 1(e) 所示, 其输入为 $|0\rangle|a_1\rangle|a_2\rangle$. 首先使用 H 门作用于第 1 寄存器得到量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|a_1\rangle|a_2\rangle + |1\rangle|a_1\rangle|a_2\rangle)$; 然后使用受控交换门得到量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle|a_1\rangle|a_2\rangle + |1\rangle|a_2\rangle|a_1\rangle)$; 接着使用 H 门得到量子态 $\frac{1}{2} |0\rangle(|a_1\rangle|a_2\rangle + |a_2\rangle|a_1\rangle) + \frac{1}{2} |1\rangle(|a_1\rangle|a_2\rangle - |a_2\rangle|a_1\rangle)$; 最后对辅助量子比特进行测量, 得到 $|0\rangle$ 的概率为 $P(0) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} |\langle a_1 | a_2 \rangle|^2$, 进而可以计算出 $|\langle a_1 | a_2 \rangle|^2 = 2P(0) - 1$.

(6) HHL 算法^[8]. HHL 算法是由 Harrow 等人提出的, 他们利用量子特性来求解线性方程组. 给定一个 $N \times N$ 的可逆方阵 A 和一个 $N \times 1$ 的向量 \mathbf{b} , 要找到一个 $N \times 1$ 的向量 \mathbf{x} , 使其满足 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. 经典计算中求解线性方程组的复杂度为 $O(N^3)$, 而 HHL 算法的复杂度仅为 $O(\log(N))$. HHL 的量子线路图如图 1(f) 所示, 其输入为 $|0\rangle|0\rangle^{\otimes t}|\mathbf{b}\rangle$. 首先对第 2 和第 3 寄存器使用量子相位估计将特征值存储在基态中, 即: $|0\rangle \sum_{i=0}^{N-1} \beta_i |\tilde{\lambda}_i\rangle |u_i\rangle$, 其中 $|\mathbf{b}\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} \beta_i |u_i\rangle$, $\tilde{\lambda}_i$

是 A 的特征值 λ_i 的近似值, $|u_i\rangle$ ($i=0, 2, \dots, N-1$) 是相应的特征向量; 然后以 $|\tilde{\lambda}_i\rangle$ 作为控制比特, 对辅助量子比特进行旋转可得 $\sum_{i=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_i^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_i} |1\rangle \right) \beta_i |\tilde{\lambda}_i\rangle |u_i\rangle$; 接着执行逆量子相位估计 (QPE⁺) 解除第 2 寄存器与其余两个寄存器的纠缠, 可得 $\sum_{i=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_i^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_i} |1\rangle \right) \beta_i |0\rangle^{\otimes 2} |u_i\rangle$. 最后进行测量, 如果测量结果为 $|1\rangle$, 则得到量子态 $\sum_{i=0}^{N-1} C \frac{\beta_i}{\lambda_i} |u_i\rangle$.

由谱分解^[6]可知, 除去归一化因子 C , 该结果正是线性方程组的解 $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} = \left(\sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i^{-1} |u_i\rangle \langle u_i| \right) \left(\sum_{i=0}^{N-1} \beta_i |u_i\rangle \right) = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\beta_i}{\lambda_i} |u_i\rangle$.

(7) 参数化量子线路^[40]. 参数化量子线路通常包含两层量子门: 单量子比特旋转层和双量子比特纠缠层, 其中单量子比特旋转层通常由旋转门组成, 双量子比特纠缠层通常由受控非门和受控旋转门组成. 图 1(g) 为 PQC 的一种形式, 其输入为表示样本的量子态 $|x\rangle$, 含参量子线路可以表示为:

$$U_n U(\theta) |x\rangle = U_n (U_{n-1}(\theta_{n-1}) \otimes U_{n-2}(\theta_{n-2}) \otimes \dots \otimes U_1(\theta_1) \otimes U_0(\theta_0)) |x\rangle \quad (2)$$

其中, $U(\theta) = U_{n-1}(\theta_{n-1}) \otimes U_{n-2}(\theta_{n-2}) \otimes \dots \otimes U_1(\theta_1) \otimes U_0(\theta_0)$ 表示单量子比特旋转层, θ 包括参数化量子线路中的所有参数 θ_i ($i=0, 1, \dots, n-1$). U_n 表示双量子比特纠缠层, 其中不含参数. 参数化量子线路能够在 NISQ 设备上有效地实现, 因此成为量子神经网络中采用的主要方法.

Grover 搜索算法能够快速在非结构化无序数据库中找到符合条件的元素, 被应用于量子 K 近邻等聚类算法中; 用于估计特征值相位的 QPE 和用于估计量子态振幅的 QAE 都是量子估计算法, 被应用于量子支持向量机、量子主成分分析等算法中; Hadamard-test 和 Swap-test 能够分别以内积和内积模两种方式估计两个量子态之间的相似度, 是量子机器学习中常用的基本算法; HHL 算法利用量子特性求解线性方程组, 是量子支持向量机、量子线性回归等算法的核心; PQC 是量子神经网络的基础, 通过训练参数达到分类的目的. 表 2 总结了量子基本算法的功能及其在量子机器学习算法中的应用.

表 2 量子基本算法的功能及其应用总结

算法	功能	应用
Grover搜索算法	能够快速在非结构化无序数据库中找到符合条件的元素	量子支持向量机、量子K近邻、量子K均值、量子层次聚类、量子谱聚类、量子强化学习
QPE	用于估计算子 U 的特征值 $e^{2\pi i\varphi}$ 的相位 φ	量子支持向量机、量子回归、量子谱聚类、量子主成分分析、量子奇异值阈值算法、量子半监督支持向量机
QAE	用于估计包含解的概率	量子K近邻、量子回归
Hadamard-test	用于计算两个量子态的内积	量子支持向量机、量子回归
Swap-test	用于计算两个量子态的内积的模平方	量子支持向量机、量子K近邻、量子回归、量子奇异值阈值算法、量子半监督支持向量机
HHL算法	用于求解线性方程组	量子支持向量机、量子回归、量子半监督支持向量机
PQC	量子神经网络通过训练参数化量子线路中的参数达到对样本进行正确分类的目的	量子神经网络、量子支持向量机、量子生成对抗网络、量子强化学习

2 量子监督学习算法

监督学习针对的是有标签的数据集, 也就是需要根据训练数据集及其标签进行学习得到一个模型, 然后将此模型应用于对新数据进行预测. 根据预测结果是否为连续值, 将量子监督学习算法分为量子分类算法和量子回归算法. 量子分类算法包括量子神经网络、量子支持向量机以及量子 K 近邻等; 现有的量子回归主要包括 3 个算法: 量子线性回归、量子岭回归以及量子逻辑回归.

2.1 量子分类算法

量子分类算法能够提高分类学习算法的运行效率, 有效解决当前环境下数据量巨大以及维度高导致的计算困

难问题. 本节介绍以下 3 种量子分类算法: 量子神经网络、量子支持向量机以及量子 K 近邻.

2.1.1 量子神经网络

神经网络是应用广泛的分类模型^[41,42], 它通过对人脑神经元的建模来模拟人脑神经系统. M-P 神经元是比较简单、常用的神经元, Zhang 等人^[43]给出了 FT (flexible transmitter) 模型, 它是一种具备灵活可塑性的新型生物拟真神经元. 图 2(a) 给出了最简单的 M-P 神经元. 在该模型中, 输入信号有 M 个特征 x_0, x_1, \dots, x_{M-1} , 用于刺激该神经元, 各个输入的刺激程度不同, 权重系数 w_j ($j = 0, 1, \dots, M-1$) 用于表示信号 x_j 对神经元的刺激程度, w_M 表示偏置, 可以理解为哑元 $x_M = 1$ 所作贡献的大小. 因此, 所有输入信号对神经元的激活值为 $a = \sum_{j=0}^M w_j x_j$. a 经过一个非线性函数 φ 产生神经元的输出 y . 这里 φ 称为神经元的激活函数. 故一个神经元的输出为 $y = \varphi(a)$.

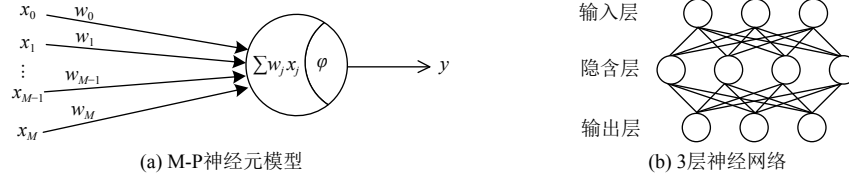


图 2 神经网络模型

符号函数是有代表性的不连续激活函数, 其定义为:

$$\varphi(a) = \text{sign}(a) = \begin{cases} +1, & a \geq 0 \\ -1, & a < 0 \end{cases} \quad (3)$$

这里假设公式 (3) 中 $+1$ 表示激活了神经元, -1 表示没有激活神经元. 神经网络的目标是找到合适的权重系数 w_0, w_1, \dots, w_{M-1} 和偏置 w_M 使得神经元能有正确的输出. 一个神经网络是由若干神经元按照一定的方式连接组成的网络, 图 2(b) 是一个 3 层神经网络.

相对于经典神经网络, QNN 在运行速度、资源消耗等方面具有很大的优势. 1995 年 Kak^[13]最先提出了基于测量的 QNN 模型. 他主要考虑到意识具有不可分割性, 而任何不可分割的现象都可以用波函数 (波函数是量子力学中描写系统状态的函数^[6]) 来描述, 那么就能够以量子力学的方式对其进行建模.

同年, 量子衍生神经网络被提出^[44], 该算法利用量子叠加性, 同时训练多个网络, 提升了训练效率. 与经典神经网络类似, 量子衍生神经网络的基本单元为量子衍生神经元. 在量子衍生神经元中, 第 i 个权重的量子比特为 $|\phi_i\rangle = a_i|0\rangle + b_i|1\rangle = \begin{pmatrix} a_i & b_i \end{pmatrix}^T$, 输入样本为 $x_j = \begin{pmatrix} x_{j0} & x_{j1} & \dots & x_{j(M-1)} \end{pmatrix}^T$, y 为输出, 量子衍生神经元的输入输出关系为^[44]: $y = B \cdot \sum_{i=0}^{M-1} x_{ji} R_i |\phi_i\rangle$, 其中 \cdot 是点积, $B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix}^T$, R_i 是用于更新 $|\phi_i\rangle$ 的旋转门. 进而给出了隐层神经元和多层神经网络的输出, 最后根据损失函数更新参数. 而时间累积效应能够将单个样本映射为一个矩阵^[45,46]. 此时神经网络的输入为一个序列, 简称序列输入. 文献^[47]提出基于序列输入的量子衍生神经网络, 该算法在预测数据集准确率时要优于相应的经典算法.

之后参数化量子神经网络^[16,40,48-53]、量子细胞神经网络^[54,55]等模型被提出. 下面介绍近几年比较流行的参数化量子神经网络 PQNN.

PQNN 最初由 Matsui 等人于 2000 年提出^[15]. 该量子神经网络在不同学习率的设置下都表现出非常高的收敛速度, 学习能力与传统网络相当. 近几年来, 由于通用量子计算机的研究方兴未艾, 将浅层参数化量子线路和简单非线性函数组合在一起, 适用于 NISQ 计算机的 PQNN 是被研究较多的量子神经网络模型.

与经典神经网络类似, PQNN 通过训练 PQC 中的参数达到对样本进行正确分类的目的. PQNN 的基础流程共分为 5 步.

第 1 步: 将经典数据编码为量子态 $|x\rangle$.

第 2 步: 将酉变换 $U(\theta)$ 作用于 $|x\rangle$ 得到 $U(\theta)|x\rangle$.

第 3 步: 使用测量算子 M 对 $U(\theta)|x\rangle$ 进行测量得到期望值 $\langle x|U(\theta)^\dagger M U(\theta)|x\rangle$.

第4步: 根据期望值定义目标函数, 并使用梯度下降法等优化方法调整参数.

第5步: 将新的参数设置到 PQC 中, 并重复第 2-5 步直至达到期望的结果.

从上述步骤可以看出除了 PQC 的设计之外, 最主要的就是如何对参数进行优化. 目前使用最多的优化方法为梯度下降法^[56-59]. 目标函数是与测量得到的期望值 $\langle x|U(\theta)^\dagger MU(\theta)|x\rangle$ 有关的函数, 假设目标函数为 $f(\theta)$, 文献^[56]给出当 PQC 的量子门可以表示成 $U(\theta) = e^{-ia\theta G}|x\rangle$ 的形式时, 梯度算子 $\frac{\partial f}{\partial \theta_i}$ 的表示方法为 $\frac{\partial f}{\partial \theta_i} = r\left(f\left(\theta_i + \frac{\pi}{4r}\right) - f\left(\theta_i - \frac{\pi}{4r}\right)\right)$, 其中 G 是参数化量子线路中用到的量子门, $r = \frac{a}{2}(e_1 - e_0)$, a 是一个实常数, e_1 和 e_0 是 G 的两个特征值.

McClean 等人^[51]的研究表明 PQNN 经过随机初始化参数的梯度可能会随量子比特数和线路深度的增加而消失, 这种现象也被称为梯度消失或贫瘠高原. Grant 等人^[16]设计了一种在含参量子门后添加伴随矩阵的优化策略, 可避免随机初始化 PQC 中的参数引起的梯度消失, 进而有效地对量子神经网络进行训练. Skolik 等人^[52]设计了一种分层训练策略, 即在训练 PQC 参数的过程中每次只更新其中的部分参数. 实验结果表明, 这种策略可以帮助参数化量子线路避免梯度消失问题, 这主要是因为分层训练需要训练的参数数量少, 每个参数能获得的梯度值更大. 但是, 以上针对参数化量子线路梯度消失现象的研究并没有考虑量子硬件上噪声对参数化量子线路模型训练优化的影响. Wang 等人^[53]的研究表明 NISQ 设备上的噪声也会造成 PQNN 的梯度消失, 而且由于 NISQ 设备上噪声导致的梯度消失问题难以通过上述的优化策略解决.

2.1.2 量子支持向量机

支持向量机主要是通过寻找最优超平面实现分类任务^[60,61]. 对于一个线性可分的数据集 $\{(x_i, y_i)|x_i \in \mathcal{R}^M, y_i \in \{1, -1\}\}_{i=0,1,\dots,N-1}$, 标准支持向量机的基本思想就是找到一个最优超平面 (图 3 中的粗实线) 使得两个类的支持向量 (图 3 中位于虚线上的样本) 到超平面的距离最大.

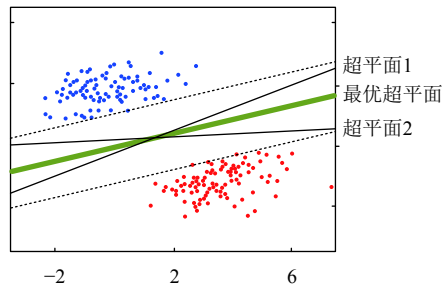


图 3 支持向量机原理示意图

最小二乘支持向量机可将寻找最优超平面的问题转化为求解下列线性方程组的问题:

$$F \begin{pmatrix} b \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{e}^T \\ \mathbf{e} & K + \gamma^{-1}I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中, b 是位移项, $\alpha = (\alpha_0 \ \alpha_1 \ \dots \ \alpha_{N-1})^T$ 是拉格朗日乘子, $\mathbf{e} = (1 \ 1 \ \dots \ 1)^T$, I 是单位矩阵, $\mathbf{y} = (y_0 \ y_1 \ \dots \ y_{N-1})^T$, K 中的元素 $K_{ij} = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ 为最简单的线性核, 此外还有高斯核、多项式核等形式.

通过求解公式 (4) 得到参数 b 和 α , 进而可以使用公式 (5) 完成对待分类样本 \mathbf{x} 的分类任务.

$$y(\mathbf{x}) = \text{sign} \left(\sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i \mathbf{x}_i^T \mathbf{x} + b \right) \quad (5)$$

2014 年, Rebentrost 等人^[17]给出了最小二乘支持向量机的量子版本——最小二乘量子支持向量机 (least-squares quantum support vector machine, LS-QSVM). 该算法使用 HHL 算法求解公式 (4) 中的线性方程组, 得到参数的量子形式 $|b, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{C}} \left(b|0\rangle + \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |i+1\rangle \right)$, 其中 C 是归一化因子. 然后根据超平面量子态 $|b, \alpha\rangle$ 和待分类样本 $|x\rangle$ 分别构造下述量子态:

$$|\bar{u}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\bar{u}}}} \left(b|0\rangle|0\rangle + \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |x_i\rangle|i+1\rangle|x_i\rangle \right), \quad |\bar{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\bar{x}}}} \left(|0\rangle|0\rangle + \sum_{i=0}^{N-1} |x_i\rangle|i+1\rangle|x_i\rangle \right) \quad (6)$$

其中, $N_{\bar{u}}=b^2 + \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i^2 |x_i|^2$, $N_{\bar{x}}=1+N|x|^2$ 为归一化因子. 使用交换测试可得 $\langle \bar{u} | \bar{x} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\bar{x}}N_{\bar{u}}}} \left(b + \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |x_i| |x_i| \langle x_i | x \rangle \right)$. 由于对辅助比特进行测量得到 $|1\rangle$ 的概率为 $P(1) = \frac{1}{2}(1 - \langle \bar{u} | \bar{x} \rangle)$, 因此当 $P(1) < \frac{1}{2}$ 时, 内积 $\langle \bar{u} | \bar{x} \rangle > 0$, 可将 x 分类为 $+1$; 否则, 分类为 -1 . 上述最小二乘量子支持向量机的复杂度为 $O(\log(MN))$, 与经典算法 $O(N^3)$ 的复杂度相比, 达到了指数加速.

事实上, 早在 2003 年, Anguita 等人^[62]提出了用 Grover 量子搜索算法加速支持向量机 (quantum support vector machine based on Grover, QQSVM) 的训练过程, 但是该算法仅达到了二次加速. LS-QSVM 的出现打破了量子支持向量机的研究僵局, 为后续量子支持向量机的研究提供了基础和思路.

LS-QSVM 算法仅适合于二分类问题, Bishwas 等人^[18]通过一对一技术实现量子多分类支持向量机, 并将其时间复杂度控制在对数时间. 之后 Li 等人^[63]在 4 核磁共振测试台上实现手写数字识别, 从实验上验证了量子支持向量机的可行性.

上述算法都是使用 HHL 算法训练量子支持向量机, 该算法的量子线路具有较高深度, 因此需要在容错性较好的量子计算机上实现. 但是现在的量子计算机都是 NISQ 设备. 而 PQC 能够在 NISQ 上有效地实现. 因此, Xu 等人^[64]在 2022 年提出了基于参数化量子线路的变分量子支持向量机 (parameterized LS-QSVM, LS-PQSVM). 将公式 (4) 中的 F 分解为 $F = \sum_{i=1}^m \delta_i P_i$, 其中 P_i 是由泡利算子张量得到的, 则训练最小二乘量子支持向量机可以通过最小化损失函数 L 来得到.

$$L = 1 - \frac{1}{\left| \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{y}^T \\ 0 & \mathbf{y}^T \end{pmatrix} \right| |\mathbf{F}\mathbf{d}|} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{y}^T \end{pmatrix}^T \mathbf{F}\mathbf{d} = 1 - \sum_{i=1}^m \frac{1}{|\mathbf{F}\mathbf{d}|} \delta_i \langle 0 \dots 0 | U_i P_i V(\theta) | 0 \dots 0 \rangle \quad (7)$$

其中, $\langle 0 \dots 0 | U_i | 0, \mathbf{y} \rangle = 1$, $\mathbf{d} = V(\theta) | 0 \dots 0 \rangle$. 这里 $V(\theta)$ 就是用于训练最小二乘支持向量机的参数化量子线路. 最后使用哈达玛测试得到最优参数和待分类样本的内积, 完成分类任务.

在经典算法中, 有些样本集在原始空间中不能进行线性分割, 核函数将样本从原始空间映射到高维空间, 从而使得样本能够在高维空间中线性可分. 在量子支持向量机中, 量子核函数同样有至关重要的作用. 多项式核 $K_{ij} = (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j)^d$ 的量子形式被提出^[17], 即:

$$K_{ij} = \varphi(\mathbf{x}_i) \cdot \varphi(\mathbf{x}_j) = \langle \varphi(\mathbf{x}_i) | \varphi(\mathbf{x}_j) \rangle = \langle x_i | x_j \rangle \otimes \dots \otimes \langle x_i | x_j \rangle = \langle x_i | x_j \rangle^d \quad (8)$$

其中, $|\varphi(\mathbf{x}_i)\rangle \equiv |x_i\rangle \otimes \dots \otimes |x_i\rangle$. 此时, 量子支持向量机演变为优化 d 次张量积空间中的线性超平面. 利用公式 (8) 的技巧可以构造任意多项式核. Chatterjee 等人^[65]用量子径向核替换多项式型核, 在对数时间复杂度内, 实现了量子支持向量机从简单的多项式型核向非线性核的扩展. 为了能够有效地在 NISQ 量子计算机上实现量子核函数, Havlíček 等人^[66]提出了基于 PQC 的量子核函数, 该算法利用参数化量子线路的特点实现特征映射, 进而得到核函数, 解决了经典算法中特征空间大导致的计算困难的问题.

此外, Li 等人^[67]提出任意非线性核的量子支持向量机, 并将其应用于脑电图信号特征提取和分类. Zhang 等人^[68]提出基于标准支持向量机的量子算法用于解决 LS-QSVM 缺乏稀疏性核鲁棒性的问题. Li 等人^[69]提出基于梯度下降法的量子支持向量机模型, 并完成了同时对多个样本将进行分类的任务.

2.1.3 量子 K 近邻

K 近邻是一种简单有效的有监督学习算法. 图 4 给出 K 近邻原理的示意图. 训练样本有两个类别, 分别用三角形和正方形表示. 对于新输入的待分类样本 (用圆形表示), 计算所有训练样本与待分类样本的距离, 找到与待分类样本最近的 K 个邻居. 当 $K=3$ 时, 邻居中包括 2 个三角形和 1 个正方形, 因此分类为三角形; 当 $K=5$ 时, 邻居中包括 2 个三角形和 3 个正方形, 因此分类为正方形. 总体来说, 与待分类样本最邻近的 K 个样本中, 多数属于哪一类, 就将待分类样本就划分到哪一类.

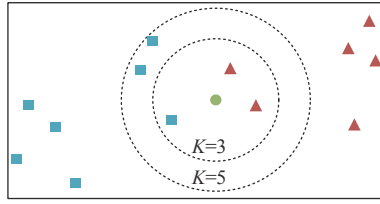


图4 K近邻示意图

与经典算法一样,量子K近邻的主要任务也分成两项:距离计算和确定最近的 K 个值.通常情况下使用Grover搜索算法寻找最近邻的 K 个值,能够达到二次加速.下面根据距离计算方式的不同,将量子K近邻算法分成3类.

(1) 基于欧氏距离的量子K近邻算法

假设两个样本的向量表示为 $\mathbf{x}_i = (x_{i0} \ x_{i1} \ \dots \ x_{i(M-1)})^T$ 和 $\mathbf{x}_j = (x_{j0} \ x_{j1} \ \dots \ x_{j(M-1)})^T$,其中 M 表示单个样本的 M 个特征,则它们的欧氏距离为 $d(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| = \sqrt{\sum_{k=0}^{M-1} (x_{ik} - x_{jk})^2}$.欧氏距离指的是绝对距离,也就是我们常说的点与点之间的直线距离.

基于欧氏距离的量子K近邻算法(quantum K-nearest neighbors based on Euclidean distance, Ed-QKNN)主要是使用量子算法计算向量之间的欧氏距离^[19,70].Wiebe等人^[19]提出的Ed-QKNN算法主要分为3步:首先使用量子随机存取存储器(quantum random access memory, QRAM)得到量子态 $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle (\sqrt{1 - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|} |0\rangle + \sqrt{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|} |1\rangle)$,然后使用振幅估计算法将 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$ 存储在量子态中,即 $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$,最后使用Dürr提出的最小值搜索算法^[71]搜索到最小的 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$.相对于经典算法来说,该算法达到了二次加速.由于该算法每次只找到最小的 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$,因此它实际上是一个量子最近邻算法.

(2) 基于汉明距离的量子K近邻算法

汉明距离指的是两个二进制字符串(或向量)之间对应位取值不同的个数.例如:0010和0001之间后两位不同,因此汉明距离为2;0110和1110之间只有第1位不同,因此汉明距离为1.

2017年,Ruan等人^[72]提出了计算测试样本与训练集中每个特征向量之间的汉明距离的量子方法.同时,利用这种距离计算方法实现了基于汉明距离的量子K近邻算法(quantum K-nearest neighbors based on Hamming distance, Hd-QKNN).不同于Ed-QKNN算法,Hd-QKNN的时间开销只与特征向量的维数 M 相关,与数据集大小 N 无关,其时间复杂度为 $O((\log M)^3)$,当数据集特别大而特征向量维数较小时,此算法优势显著.但是上述算法通过设置阈值 t 来选择 K 个最近邻的样本,因此该算法除了设置 K 之外,还需要设置参数 t ,增加了计算量.

(3) 基于保真度的量子K近邻算法

在量子计算中,保真度 $F(x_i, x_j) = \left| \langle x_i | x_j \rangle \right|^2$ 常被用于计算两个样本 $|x_i\rangle$ 和 $|x_j\rangle$ 之间的距离.2015年,Chen等人^[20]将Wiebe等人^[19]的量子最近邻算法扩展到量子K近邻算法,利用Dürr等人^[71]提出的求 K 个最小值的量子算法,找到 K 个与待分类样本最相似的样本,实现基于保真度的量子K近邻算法(quantum K-nearest neighbors based on fidelity similarity, Fs-QKNN).该算法时间复杂度较Wiebe等人的 $O(RK\sqrt{N})$ 降低至 $O(R\sqrt{KN})$,其中 R 为Oracle算子的执行次数.当数据很多而且 K 值很大时,Fs-QKNN的优化效果更加明显.

上述量子K近邻算法仅能达到二次加速, Ma等人^[73]提出基于分类张量网络态的量子K近邻算法,该算法基于图数据结构描述量子线路的量子态(被称为分类张量网络态),使用的距离度量也是保真度,使得该算法达到了指数加速.

2.2 量子回归算法

回归算法研究的是自变量和因变量的关系,属于预测性的算法.这种类型的算法主要包括线性回归、岭回归、逻辑回归等类别.相应的,本节首先介绍常用的量子线性回归算法,然后介绍量子岭回归和量子逻辑回归.

2.2.1 量子线性回归

线性回归要做的是找到最好的“一条直线”对数据集进行拟合,也就是利用数据集,训练一个线性回归函数.对于样本 $\mathbf{x}_i = (x_{i0} \ x_{i1} \ \dots \ x_{i(M-1)})^T$,令 $x_{iM} = 1$,则线性回归函数可以定义为, $\hat{y}(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j x_{ij} + w_M = \sum_{j=0}^M w_j x_{ij} = \mathbf{w}^T \bar{\mathbf{x}}_i$,其中 $\bar{\mathbf{x}}_i = (x_{i0} \ x_{i1} \ \dots \ x_{i(M-1)} \ 1)^T$, $\mathbf{w} = (w_0, w_1, \dots, w_M)^T$ 是需要从数据中学习的拟合参数.估计参数通常利用无偏估计去最小化模型预测值 $(\hat{y}(\mathbf{x}_0, \mathbf{w}), \hat{y}(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}), \dots, \hat{y}(\mathbf{x}_{N-1}, \mathbf{w}))$ 与真实值 $\mathbf{y} = (y_0, y_1, \dots, y_{N-1})$ 之间的最小二乘误差,也就是要求 \mathbf{w} 使得 $J(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\mathbf{w}\|_2^2$ 最小,其中 X 为:

$$X = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{x}}_0^T \\ \bar{\mathbf{x}}_1^T \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{x}}_{N-1}^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{00} & \dots & x_{0(M-1)} & 1 \\ x_{10} & \dots & x_{1(M-1)} & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{(N-1)0} & \dots & x_{(N-1)(M-1)} & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

为此,求 $J(\mathbf{w})$ 对 \mathbf{w} 的导数,并令其等于 0,得到:

$$X^T X \mathbf{w} = X^T \mathbf{y} \quad (10)$$

Dutta 等人^[21]提出量子线性回归 (quantum linear regression, QLR),令 $A = X^T X$, $\mathbf{b} = X^T \mathbf{y}$,则利用 HHL 算法可求得参数 $|\mathbf{w}\rangle$,进而得到经典形式的 \mathbf{w} ,最后预测新样本的值.但是要通过测量由量子态 $|\mathbf{w}\rangle$ 得到经典形式的 \mathbf{w} ,需要付出指数级的代价,因此相对经典算法来说,这种算法的优势并不明显.但是如果只考虑训练过程的复杂度,QLR 还是具有指数级优势.

Wiebe 等人^[74]指出要提取出使用 HHL 算法求得的拟合参数 $|\mathbf{w}\rangle$ 的信息需要付出很大的代价,因此他们的目的并不在于得到 $|\mathbf{w}\rangle$,而是利用该结果估计拟合质量,在经典计算中,通常使用预测值 $X\mathbf{w}$ 和真实值 \mathbf{y} 之间的距离 $\|X\mathbf{w} - \mathbf{y}\|_2^2$ 进行估计.相应的,在量子算法中,要看预测值 $\tilde{X}|\mathbf{w}\rangle$ 与真实值 $|\mathbf{y}\rangle$ 之间的距离 $\|\tilde{X}|\mathbf{w}\rangle - |\mathbf{y}\rangle\|_2^2 = 2 - 2\langle \mathbf{y} | \tilde{X} | \mathbf{w} \rangle = 2 - 2\langle \mathbf{y} | \tilde{X} \tilde{A}^{-1} | \mathbf{b} \rangle$ 是否足够小,其中 $\tilde{A} = \begin{pmatrix} X^T X & 0 \\ 0 & X X^T \end{pmatrix}$, $\tilde{X} = \begin{pmatrix} 0 & X \\ X^T & 0 \end{pmatrix}$,这里之所以用 \tilde{X} 和 \tilde{A} 而不直接用 X 和 A 是因为公式 (9) 中的 X 可能不是一个方阵,无法直接使用 HHL 算法计算 $X|\mathbf{y}\rangle$.

但是, HHL 算法要求矩阵 A 必须是低秩、良态矩阵,当 A 不满足这些要求时,上述算法将无法进行.因此, Wang 等人^[75]提出利用文献 [76] 的奇异值分解方法来求拟合参数 $|\mathbf{w}\rangle = X^T X X^T |\mathbf{y}\rangle$,并使用类似 Wiebe 等人^[74]提出的方法来估计拟合质量.除此之外, Wang 等人还提出可以创建拟合参数 $|\mathbf{w}\rangle$ 的副本并使用振幅估计方法将拟合参数以经典数据的形式输出,从而对新样本进行分类.统计抽样的方法得到经典数据需要 $O(1/\varepsilon^2)$ 个副本,而振幅估计的方法只需要 $O(1/\varepsilon)$ 个副本,因此大大减少了计算量.

2.2.2 量子岭回归

在线性回归算法中,要求解公式 (10) 中线性方程组 $X^T X \mathbf{w} = X^T \mathbf{y}$.但是,有时 $X^T X$ 不可逆,造成无法求解;或者有时 $X^T X$ 条件数较大,线性方程组解的稳定性不好,当计算精度受限时造成解的误差较大.这两个问题均可以通过添加正则化约束条件来解决,此时的线性回归就称为正则化线性回归或岭回归.相应地,量子岭回归 (quantum ridge regression, QRR) 被提出^[22,77].

对公式 (10) 添加岭参数 α 之后可得 $(X^T X + \alpha I) \mathbf{w} = X^T \mathbf{y}$,则岭回归模型中的参数矢量为 $\mathbf{w} = (X^T X + \alpha I)^{-1} X^T \mathbf{y}$. Yu 等人^[77]提出使用并行哈密顿模拟方法模拟矩阵 X ,并使用量子 K 折交叉验证求解出最优的 α .该算法能够有效地处理非稀疏矩阵,相对于经典算法来说, QRR 达到了指数加速.但是该算法主要是通过扩展矩阵的形式来处理非稀疏矩阵,即如果矩阵 X 是非稀疏的,则将其扩展为 $\tilde{X} = \begin{pmatrix} 0 & X \\ X^T & 0 \end{pmatrix}$.这样做会成倍地增加计算量. Chen 等人^[22]提出使用非稀疏矩阵的哈密顿模拟技术直接模拟矩阵 X ,并将整个训练过程并行处理,这样大大减少了时间复杂度.文献 [77] 的复杂度为 $\log(M+N)$,而文献 [22] 的复杂度仅为 $\log(N)$.

2.2.3 量子逻辑回归

逻辑回归尽管有“回归”一词,却是一种分类模型.该算法以线性回归为基础,使用逻辑函数的特性实现分类任

务. Liu 等人^[23]给出了量子逻辑回归 (quantum logistic regression, QLoR), 该算法主要是使用量子算法求解逻辑回归损失函数的偏导数 $\nabla w_j = \sum_{i=0}^{N-1} (P(y_i|\mathbf{w}) - y_i) x_{ij} = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{1}{1 + e^{-w^T \mathbf{x}_i}} - y_i \right) x_{ij}$, 其中 y_i 不再是实数, 而是属于 $\{0, 1\}$, 表示样本的类别. ∇w_j 可以被看成 $(P(y_0|\mathbf{w}) - y_0 \dots P(y_{N-1}|\mathbf{w}) - y_{N-1})$ 和 $(x_{0j} \dots x_{(N-1)j})$ 的内积. 因此该算法共分为 3 步: 第 1 步将 $(P(y_0|\mathbf{w}) \dots P(y_{N-1}|\mathbf{w}))$ 存储在量子态中, 即要得到中间量子态 $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle |P(y_i|\mathbf{w})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle \left| \frac{1}{1 + e^{-w^T \mathbf{x}_i}} \right\rangle$; 第 2 步使用受控旋转将 $(P(y_0|\mathbf{w}) - y_0 \dots P(y_{N-1}|\mathbf{w}) - y_{N-1})$ 存储在振幅中; 第 3 步使用哈达玛测试得到 ∇w_j .

上述量子逻辑回归算法只适用于线性分类, 很难处理非线性分类问题. 可以通过将核函数引入到逻辑回归中用于解决非线性分类问题, 被称为核逻辑回归. 2023 年, Ning 等人^[78]提出了量子核逻辑回归, 相对于经典算法来说, 该量子算法达到了指数加速.

2.3 量子监督学习算法总结和比较

量子监督学习算法主要分为量子分类和量子回归两类算法. 由表 3 可以看出相对于经典算法来说, 量子监督学习算法的复杂度达到了指数级降低或二次降低. 在这些算法中, 只有最小二乘量子支持向量机和量子回归算法为纯量子算法, 其他算法皆为量子-经典混合算法. 这里纯量子算法指的是只使用量子算法就可以得到最终的结果, 而量子-经典混合算法指的是在完整的算法中, 只有一部分使用量子算法, 其余部分仍需要借助经典算法来完成. 量子神经网络和基于参数化量子线路的变分子支持向量机使用了量子基本算法 PQC; 量子支持向量机和量子回归算法都将求解最优参数的问题转化为求解线性方程组 (或转化为矩阵向量相乘的形式), 进而使用 HHL 算法及其衍生算法进行求解. 而量子 K 近邻算法主要是使用 Grover 搜索寻找最近邻的 K 个样本. 此外, Swap-test 和 Hadamard-test 是监督学习算法中用到最多的量子基本算法, 主要用于监督学习算法的最后阶段, 即实现新样本的分类和预测.

表 3 量子监督学习算法对比

算法	参考文献	量子复杂度	经典复杂度	是否为混合算法	是否实现	量子基本算法
量子神经网络	PQNN [40]	$O(N \log(M))$	$O(M^2 N)$	是	是	PQC
量子支持向量机	LS-QSVM [17]	$O(\log(MN))$	$O(M^3 N)$	否	是	HHL、QPE、Swap-test
	GQSVM [62]	$O(M \log(N))$	$O(MN)$	是	否	Grover
	LS-PQSVM [64]	$O(N \log(M+1))$	$O(MN)$	是	是	PQC、Hadamard-test
量子K近邻	Ed-QKNN [19]	$O(\sqrt{MN} \log(N))$	$O(MN)$	是	否	QAE、Grover、Swap-test
	Hd-QKNN [72]	$O((\log(M))^3)$	$O(M^3)$	是	否	Swap-test
	Fs-QKNN [20]	$O(R \sqrt{KN})$	$O(N)$	是	否	QAE、Grover、Swap-test
量子回归	QLR [21]	$O(\log(N))$	$O(M^3 N)$	否	是	HHL、QPE、Swap-test
	QRR [22]	$O(\log(N))$	$O(N)$	否	否	QPE、Swap-test
	QLoR [23]	$O(\log(MN))$	$O(MN)$	否	否	QAE、QPE、Hadamard-test

表 3 对量子监督学习算法进行总结和比较, 给出各个量子算法的时间复杂度和其相对应的经典算法的时间复杂度, 并给出该算法是否为量子-经典混合算法, 是否存在对应的算法实现, 以及用到的量子基本算法.

3 量子无监督学习算法

根据无标注数据集进行学习的方法被称为无监督学习算法. 无监督学习学习的是特征之间的关系, 主要用于聚类和降维. 本节介绍相应的量子算法: 量子聚类和量子降维.

3.1 量子聚类

聚类算法的主要任务是将样本集划分为若干个不相交的子集, 每个子集称为一个“簇”. 划分依据为样本间的

相似度,将相似度高的样本划分到同一簇中,相似度低的样本划分到不同的簇中.在量子算法中,存储在量子态中的样本的相似度通常用保真度表示.本节介绍的量子聚类算法主要包括量子K均值聚类、量子层次聚类以及量子谱聚类.

3.1.1 量子K均值聚类

K均值聚类是最简单的聚类算法之一,它将样本集划分为K个簇.对于给定的K,首先从样本集 $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}\}$ 中随机选择K个样本点分别作为K个簇,这些样本点也被称为质心.然后计算剩余样本与K个质心的相似度,如果剩余样本中的 \mathbf{x}_i 和某个质心的相似度最大,则将该样本划分到该质心所代表的簇中.所有样本分配完成后,取各个簇中所有样本点的平均值作为新的质心,再次进行分配.依次更新迭代下去直到质心不再发生改变,或者达到指定的迭代次数,则算法结束.K均值聚类需要计算相似度,并找到相似度最大的值,当遇到海量样本数据时,需要消耗巨大的成本.

量子K均值聚类算法虽然在原理上与经典算法大致相同,要计算待聚类样本 \mathbf{v}_i 与簇 C_i 的质心的距离,但是可以利用量子特性降低复杂度.假设簇 C_i 中有L个样本 \mathbf{w}_l ($l=0, 1, \dots, L-1$),则样本 \mathbf{v}_i 与簇 C_i 质心的距离为 $\left| \mathbf{v}_i - \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \mathbf{w}_l \right|$. 2013年, Lloyd等人^[70]给出基于最近质心算法的量子K均值聚类算法(quantum K-means based on nearest-centroid, nc-QK-means),该算法首先使用辅助量子比特构建量子态:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle |\mathbf{v}_i\rangle + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=0}^{L-1} |l\rangle |\mathbf{w}_l\rangle \right) \quad (11)$$

然后使用交换测试,并对辅助量子比特进行测量,当辅助量子比特处于状态 $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\mathbf{v}_i\rangle |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{l=0}^{L-1} |\mathbf{w}_l\rangle |l\rangle \right)$ 时可以得到样本 \mathbf{v}_i 与簇 C_i 质心的距离 $\left| \mathbf{v}_i - \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{L-1} \mathbf{w}_l \right|^2 = Z |\langle \psi | \phi \rangle|^2$,其中 $Z = |\mathbf{v}_i|^2 + \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{L-1} |\mathbf{w}_l|^2$.该算法的复杂度为 $O(K \log KMN)$.

2014年Wiebe等人^[19]指出在很多实际问题中,最近质心法的分类准确率较低,因此给出了最近邻的量子K均值聚类算法(quantum K-means based on nearest-neighbor, nn-QK-means).该算法的复杂度为 $O(M\sqrt{K} \log K)$.但是,该算法只达到了二次加速.2018年,Kerenidis等人^[79]提出的量子均值算法(quantum means, q-means)能够达到对数的多项式加速.此外,Wu等人^[80]在2023年提出的基于曼哈顿距离的量子K均值聚类算法在路径规划中起着至关重要的作用.

3.1.2 量子层次聚类

层次聚类能产生高质量的分类效果,分为两种类型:凝聚层次聚类和分裂层次聚类.如果先将每一个样本都看作是一个簇,然后依次合并距离最近的簇,则称为凝聚层次聚类.如果先将所有样本看成一个簇,然后根据某种原则分成两个子簇,依次进行下去,则称为分裂层次聚类.无论凝聚层次聚类还是分裂层次聚类,其时间复杂度均高达 $O(N^3)$,量子层次聚类能够利用量子特性降低层次聚类的复杂度.相应地,量子层次聚类分为量子分裂层次聚类(quantum divisive hierarchical clustering, QDHC)和量子凝聚层次聚类.

Aïmeur等人^[24]在2007年提出的量子分裂聚类算法(QDHC1)与经典的分裂聚类算法的思想大致相同,首先将所有样本视为一类,然后选择相距最远的两个数据点作为子类代表,递归的采用这种划分技术不断分裂簇,直至包含在聚类内的所有样本足够相似.该算法的核心是构建用来寻找数据集中相距最远的两个样本点的子程序,受Dürr的量子最小值搜索算法^[71]启发,实现了在 $O(N)$ 时间找到N个数据点中最远的两个样本点,相对于经典搜索最远点算法 $O(N^2)$ 的时间复杂度来说,算法复杂度大大降低.

2023年,Patil等人^[81]提出总复杂度为 $O(KN \log N)$ 的量子分裂层次聚类算法(QDHC2).该算法首先找到距离最远的两个样本点 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j ,将距离记为 D_{\max} ,然后将用十进制表示的距离 D_{\max} 转化为二进制表示,这也是该量子算法的核心点,它根据二进制中最高位量子比特为 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 判断待聚类样本与 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 的距离:如果最高位量子比特为 $|1\rangle$,则表示距离大于 $\frac{D_{\max}}{2}$;如果最高位量子比特为 $|0\rangle$,则表示距离小于 $\frac{D_{\max}}{2}$.最后添加辅助量子比特,依次根据最高位,次高位等量子比特为 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$,设计酉算子,并多次执行该过程直到完成聚类任务.

3.1.3 量子谱聚类

谱聚类对样本分布具有很强的适应能力. 它通过连接的方式将样本集转化为带权图, 然后对图进行划分, 进而根据子图间的距离完成聚类. 谱聚类算法需要计算由样本集构造的拉普拉斯矩阵 L 的特征值, 取其前 K 个最小特征值对应的特征向量 $\mathbf{u}_0, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{K-1}$, 组成一个新的矩阵 A , 矩阵 A 的第 i 行代表第 i 个样本降维后的特征, 并标记 A 的每一行为 $\mathbf{y}_i \in \mathcal{R}^K$ ($i = 0, 1, \dots, N-1$). 此时, 使用简单的聚类算法 (如 K 均值聚类算法) 对 $\{\mathbf{y}_i\}_{i=0}^{N-1}$ 进行聚类就可以完成对所有样本的聚类.

2017年, Daskin^[82]提出基于量子相位估计和振幅放大算子的量子谱聚类算法. 但是, 该算法需要预先对聚类结果有一个猜测, 将其制备为量子态并输入到量子计算机中得到测量的期望值, 通过不断尝试以获得最大期望值, 当期期望值达到最大时对应的量子初态指示着聚类结果. 目前, 使用 QRAM 制备初始量子态的复杂度仍然非常高. 其次在量子计算机处理的过程中, 振幅放大算法需要不断测量以判断是否达到想要的结果, 因此整个算法效率并不高, 而且会消耗巨大的资源.

2022年, Li 等人^[26]提出一个可行的量子谱聚类算法 (quantum spectral cluster, QSC), 该算法不需要 QRAM 的辅助, 使用量子相位估计和 Grover 搜索算法中的振幅放大算子得到 L 的特征值 λ_i 和相应的特征向量 $|u_i\rangle$ ($i = 0, 1, \dots, N-1$). 与 HHL 算法类似, 令 $U = e^{2\pi i L}$, 则 U 的特征值和特征向量分别为 $e^{2\pi i \lambda_i}$ 和 $|u_i\rangle$, 因此使用相位估计算法可以得到 L 的特征值和相应的特征向量. 再使用 Grover 搜索算法找到小于阈值的特征值及其对应的特征向量. 量子线路图如图 5 所示. 最后, 采用近似算法或启发式算法得到聚类结果.

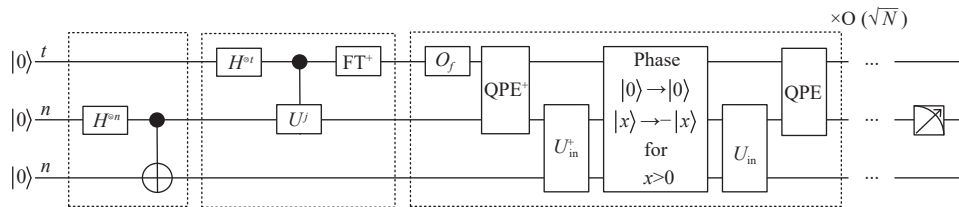


图 5 量子谱聚类的线路图

上述 QSC 算法都只适用于无向图, 无向图的相似度矩阵都是对称的, 其特征值都是实数. 但是对于有向图和混合图来说, 其相似度矩阵不再是对称的, 从而导致拉普拉斯矩阵的特征值可能是复数. 复数无法比较大小, 从而无法适用于谱聚类算法中找到 K 个最小的特征值这一目标. 因此 Volya 等人提出混合图的 QSC 算法^[83]. 该算法通过对称标准化拉普拉斯矩阵 $L_{\text{sym}} = D^{-1/2} L D^{-1/2} = I - D^{-1/2} W D^{-1/2}$ (W 为相似度, 矩阵元素为 w_{ij} , $i, j = 0, 1, \dots, N-1$; D 是一个对角矩阵, 矩阵元素为 $d_i = \sum_{j=0}^{N-1} w_{ij}$) 来解决矩阵非对称的问题.

3.1.4 其他量子聚类算法

除上述量子聚类算法之外, 量子 K 中值、量子支持向量聚类、基于薛定谔方程的聚类等聚类算法被提出.

K 中值算法类似于 K 均值算法, 只是在选取聚类中心时, 选取的是中值, 而不是均值. 量子 K 中值 (quantum K -medians, QK-medians) 算法是 Aimeur 等人^[24]在 2007 年提出的. 该算法首先选取 K 个样本点作为质心; 然后使用黑箱算子计算两个量子态之间的距离, 并使用 Grover 搜索算法找到最小的距离; 完成一轮聚类之后, 重新计算质心; 重复上述过程, 当质心稳定时, 算法停止. QK-medians 相比于经典算法在时间复杂度上获得了二次加速. 遗憾的是, 他并没有给出对应的量子线路模型以及如何设计 Grover 算法中的黑箱算子.

Bishwas 等人^[84]在 2020 年提出量子支持向量聚类算法 (quantum support vector clustering, QSVC), 它是基于量子支持向量机和量子核函数提出的. 首先使用量子支持向量机找到支持向量数据, 进而找到簇边界; 然后进行簇标定; 最后找到聚类数. 该算法复杂度为 $O(\sqrt{M^3} + \log MN)$, 而经典算法复杂度为 $O(M^2 N)$.

上述量子聚类算法都是针对数值型数据的, 可以计算数据间的距离. 但是, 在实际应用中很多聚类对象数据是分类属性数据, 如旅客性别分类数据 (男、女), 不能比较大小, 因此上述算法不能用于处理这类数据. 分类属性数

据分布不平衡、分布与空间距离无关的特性,与量子机制所描述的能量场中的特征相似:微观粒子能量决定其分布状态、不同粒子具有不同的能量、粒子间的分布具有不平衡性.因此,基于薛定谔方程的量子聚类算法被提出^[85],用于处理分类属性数据.

3.2 量子降维

在机器学习算法中,数据维数的增大会让学习过程变得困难.如果能够降低数据的维度,还几乎不影响训练效果,则可以提高机器学习的效率.对高维数据进行降维是机器学习中的一个基本的学习任务,但是经典算法的复杂度为超线性的.为了降低算法的复杂度,用于降维的量子主成分分析和量子奇异值阈值算法被提出.

3.2.1 量子主成分分析

主成分分析是将数据向低维投影,使投影尽可能分开,即投影后的样本点的方差和最大化.实现方法是通过对数据的协方差矩阵进行特征分解,求得该矩阵的特征值与特征向量,选取前 k 个最大的特征值,其对应的特征向量就是主成分,这样就可达到对数据降维的目的.2014年,文献^[86]提出了基于量子编码技术和 Grover 算法的用于人脸识别的 QPCA 算法,提高了主成分分析在相似性测度方面的效率,相对于经典算法来说,该算法达到了二次加速.随后,各种量子主成分分析算法被提出^[87,88].

Lloyd 等人^[27]在经典 PCA 算法思路的启发下,给出了针对低秩矩阵的 QPCA,使得在低秩矩阵的情况下实现了指数加速.该算法将协方差矩阵转化为密度算子 ρ ,则其谱分解为 $\rho = \sum_i \gamma_i |\sigma_i\rangle\langle\sigma_i|$,其中 γ_i 为 ρ 的特征值, $|\sigma_i\rangle$ 是相应的特征向量.与 HHL 算法一样,令 $U = e^{i\rho t}$,则相位估计算法可通过公式 $U|\sigma_i\rangle = e^{2\pi i \gamma_i} |\sigma_i\rangle$ 提取特征值 γ_i .算法输入为 $|\sigma\rangle$ 以及辅助量子比特 $|0\rangle^{\otimes l}$,其中 $|0\rangle^{\otimes l}$ 用于存储特征值 γ_i .执行量子相位估计算法之后,得到的量子态为 $\sum_i \phi_i |\gamma_i\rangle |\sigma_i\rangle$,其中 $\phi_i = \langle\sigma_i|\sigma\rangle$.如图 6 所示,当输入为密度算子 ρ 时,量子相位估计算法的输出为:

$$\sum_i \gamma_i |\gamma_i\rangle \langle\gamma_i| \otimes |\sigma_i\rangle \langle\sigma_i| \quad (12)$$

由公式 (12) 可以看出这种 QPCA 算法最后得到的是全部特征成分,通过采样可以得到最大的特征值,即主特征值.

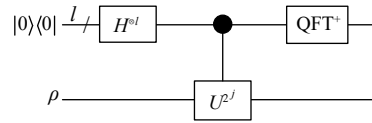


图 6 文献^[27]给出的量子主成分分析算法的线路图

QPCA 的一个关键步骤是根据 ρ 得到受控酉算子 $e^{-i\rho t}$,具体方法如下.

$$\text{tr}_\rho e^{-iS\Delta t} \rho \otimes \sigma e^{iS\Delta t} = (\cos^2 \Delta t) \sigma + (\sin^2 \Delta t) \rho - i \sin \Delta t \cos \Delta t [\rho, \sigma] = \sigma - i \Delta t [\rho, \sigma] + O(\Delta t^2) \quad (13)$$

实现公式 (13) 需要足够多的 ρ 的副本,需要大量辅助量子比特,使得相关的实验难以实现. Li 等人^[28]提出了共振 QPCA,该算法只需要 1 个辅助量子比特,使实验变得简单易操作.

3.2.2 量子奇异值阈值算法

矩阵的奇异值和特征值都是矩阵本身固有属性的表现,它们都可以用来描述矩阵的特征和信息.文献^[27]的 QPCA 算法最终将得到所有的特征值和特征向量,这些信息都存储在叠加态中,测量过程需要大量的资源才能提取到想要的主成分.为了避免该问题,奇异值阈值算法被提出.在奇异值阈值算法中需要计算奇异值和奇异向量,并将奇异值按重要性排列,舍弃不重要的特征值及其特征向量,达到降维的目的,从而避免了测量带来的资源消耗.

2019 年以来,各种 QSVT 被提出^[29,89,90].如图 7 所示, QSVT 与经典算法之间存在着对应关系,都是以奇异值分解为基础^[91].但是又有不同:经典奇异值阈值算法的输入是矩阵 $A = \sum_{r=0}^{R-1} \lambda_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T$,输出是低秩矩阵 $S = \sum_{r=0}^{R-1} (\lambda_r - \tau)_+ \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T$,其中 λ_r 是奇异值, \mathbf{u}_r 和 \mathbf{v}_r 分别是左奇异向量和右奇异向量, τ 为阈值, $(\lambda_r - \tau)_+ = \begin{cases} \lambda_r - \tau, & \text{如果 } \lambda_r - \tau > 0 \\ 0, & \text{如果 } \lambda_r - \tau \leq 0 \end{cases}$, $r = 0, 1, \dots, R-1$;而 Duan 等人^[29]提出的 QSVT (记为 QSVT1) 是将 $M \times N$ 的矩阵 A 转化为一个 $MN \times 1$ 的列向量,并

将该列向量以量子态 $|\varphi\rangle = \sum_{r=0}^{R-1} \lambda_r |u_r\rangle |v_r\rangle$ 的形式输入, 并最终演化为输出量子态 $|\phi\rangle = \sum_{r=0}^{R-1} (\lambda_r - \tau)_+ |u_r\rangle |v_r\rangle$. 该算法的复杂度为 $O(\log MN)$, 相对于经典算法来说, 达到了指数加速.

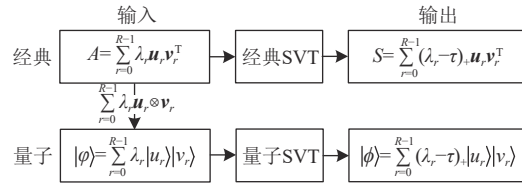


图7 SVT 和 QSVT 的对应图

Lin 等人^[90]提出的基于量子奇异值阈值算法的主成分分析算法 (improved QSVT, IQSVT) 使用哈达玛测试消除阈值 τ , 使得算法的输出为 $|\phi'\rangle = \sum_{r=0}^{R-1} \lambda_r |u_r\rangle |v_r\rangle$, 其中 R' 为主要特征的个数. 此时 $|\phi'\rangle$ 中的特征值就是 λ_r , 也就是主要的特征值, 而不是 $(\lambda_r - \tau)_+$. 该算法的复杂度为 $O(R' \log N)$. IQSVT 算法一共需要使用 5 次相位估计算法, 这将消耗大量的量子资源, 因此 He 等人^[92]提出使用受控非门代替受控旋转门, 仅使用 3 次相位估计算法就达到目的, 将复杂度降低至 IQSVT 算法的 $\frac{3}{5}$.

3.3 量子无监督学习算法总结和比较

量子无监督学习算法主要分为量子聚类和量子降维两种算法. 由表 4 可以看出相对于经典算法来说, 量子无监督学习算法的复杂度达到了指数级降低或二次降低. 量子聚类算法皆为量子-经典混合算法, 而量子降维算法皆为纯量子算法. 量子聚类算法主要是将 Swap-test 用于求两个样本之间的相似度, Grover 算法用于搜索最近或最远的距离. 而量子降维算法都是使用 QPE 提取特征值.

表 4 量子无监督学习算法对比

算法	参考文献	量子复杂度	经典复杂度	是否为混合算法	是否实现	量子基本算法
量子 K 均值	nc-QK-means [70]	$O(K \log(KMN))$	$O(KMN)$	是	否	Swap-test
	nn-QK-means [19]	$O(N \sqrt{K} \log(K))$	$O(KMN)$	是	否	Swap-test、Grover
量子层次聚类	QDHC1 [24]	$O(N)$	$O(N^2)$	是	否	Grover
	QDHC2 [81]	$O(KN \log(N))$	$O(2^N)$	是	否	
量子谱聚类	QSC [26]	$O(N^{\frac{5}{2}} \sqrt{K} \log(N))$	$O(N^3 K)$	是	否	Grover、QPE
其他量子聚类	QK-medians [24]	$O\left(\frac{N \sqrt{N}}{\sqrt{K}}\right)$	$O\left(\frac{N^2}{K}\right)$	是	否	Grover
	QSVC [84]	$O(\sqrt{N^3 \log N} + \log(MN))$	$O(N^2 M)$	是	否	Swap-test、Grover、QPE、HHL
量子主成分分析	QPCA [27]	$O(\log(M))$	$O(M^2)$	否	否	QPE
量子奇异值阈值	QSVT1 [29]	$O(\log(MN))$	$O(N^2 M)$	否	是	QPE
	IQSVT [90]	$O(R' \log N)$	$O(N^2 M)$	否	是	Swap-test、QPE

表 4 对量子无监督学习算法进行总结和比较, 给出算法的时间复杂度和其相对应的经典算法的时间复杂度, 并给出该算法是否为量子-经典混合算法, 是否存在对应的算法实现, 以及用到的量子基本算法.

4 量子半监督学习算法

在经典算法中, 半监督机器学习算法可以有效解决对不完全标记样本进行有效分类的问题. 量子半监督机器

学习算法不仅能解决不完全标记的问题,还能降低算法复杂度.目前关于量子半监督机器学习算法的研究较少,本节首先介绍量子半监督支持向量机,然后介绍其他量子半监督机器学习算法.

量子半监督学习算法针对的是不完全标记的样本集.本节假设样本集中共有 $N+L$ 个样本 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=0,1,\dots,N+L-1}$ ($\mathbf{x}_i \in \mathcal{R}^M$ 表示数据集的维数为 M 维),其中前 N 个样本 $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}\}$ 有标签,其对应的标签为 $\{y_0, y_1, \dots, y_{N-1}\}$;后 L 个样本 $\{\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_{N+1}, \dots, \mathbf{x}_{N+L-1}\}$ 没有标签.

4.1 量子半监督支持向量机

量子半监督支持向量机是被研究最多的量子半监督机器学习算法. Sacedi 等人^[30]提出了基于半监督核支持向量机的量子版本 (semi-quantum support vector machine based on kernel, KS-QSVM),该算法主要是基于经典的拉普拉斯支持向量机^[93]提出的.拉普拉斯支持向量机的训练过程可以被转化为求解下述线性方程组的问题:

$$\left(\frac{1}{\gamma}K + KK + \frac{1}{\gamma}K L K\right)\alpha = K\mathbf{y} \quad (14)$$

其中, γ 是正则化参数, K 是核矩阵, L 是拉普拉斯矩阵, $\alpha = (\alpha_0 \ \alpha_1 \ \dots \ \alpha_{N-1})^T$ 是待确定的参数,这里无标签样本的标签记为 0,即: $\{y_i = 0\}_{i=N}^{N+L-1}$,因此 $\mathbf{y} = (y_0 \ y_1 \ \dots \ y_{N-1} \ 0 \ 0 \ \dots \ 0)^T$.

该算法与第 2.1.2 节的支持向量机^[17]最大的不同在于该算法多了由图关联矩阵 G ^[93]得到的拉普拉斯矩阵 $L = GG^T$,其中图关联矩阵是由 Q 个边连接 N 个样本得到的 $N \times Q$ 矩阵,矩阵元素记为 g_{ie} .该算法首先使用黑箱制备量子态:

$$|G\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle |v_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{e=0}^{Q-1} |g_{ie}\rangle |i\rangle |e\rangle \quad (15)$$

其中, $|v_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{d_i}} \sum_{e=0}^{Q-1} |g_{ie}\rangle |e\rangle$, d_i 指的是有 d_i 个样本与第 i 个样本有边连接.最后通过对 $|G\rangle\langle G|$ 的第 2 个寄存器求偏迹得到 L 的量子表示,即:

$$L = \text{tr}_2(|G\rangle\langle G|) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=0}^{N-1} |i\rangle\langle j| \otimes \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \langle v_i | v_j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,j=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{d_i d_j}} \langle v_i | v_j \rangle |i\rangle\langle j| \quad (16)$$

该算法的复杂度为 $O(\log(MN))$.

一类支持向量机通常用于异常检测^[94],在该算法中,它的训练集只包含 N 个正常的样本,然后将新的样本与正常样本进行比较,以判断其是否为异常值.这种训练集只包含正常样本不包含异常样本的学习方法也被称为半监督机器学习算法.

Liu 等人^[95]提出量子一类支持向量机 (quantum one class support vector machine, QOCSVM).对于正常的 N 个量子态 $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle, \dots, |\varphi_{N-1}\rangle$,其训练过程可以被转化为求解下述线性方程组的问题:

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{e}^T \\ \mathbf{e} & K + P_T N I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (17)$$

其中, P_T 是接受概率阈值, $K = \sum_{i,j=0}^{N-1} |\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle| |i\rangle\langle j|$ 为核矩阵.该算法假设 $b=1$,则公式 (17) 可简化为 $(K + P_T N I)\alpha = \mathbf{e}$.

QOCSVM 使用 HHL 算法求得 $|\alpha\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle$.对于要检测的量子态 $|\varphi_0\rangle$,需要构建量子态:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |\varphi_i\rangle |i\rangle |\varphi_0\rangle, |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N} \sqrt{\sum_{i=0}^{N-1} |\alpha_i|^2}} |\varphi_0\rangle \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |i\rangle |\varphi_i\rangle \quad (18)$$

并使用哈达玛测试得到 $f(\varphi_0) = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = \left| \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |\langle \varphi_i | \varphi_0 \rangle|^2 - 1 \right|$,进而根据 $f(\varphi_0)$ 的值判断 $|\varphi_0\rangle$ 是否异常.该算法指出当 $f(\varphi_0)$ 的值非常大时,代表 $|\varphi_0\rangle$ 异常,但是未给出“非常大”的判断标准.

4.2 其他量子半监督学习算法

Park 等人^[31]提出基于 PQC 的一分类器 (variational quantum one-class classifier, VQOCC),以 6 量子比特为例,

其量子线路图如图 8 所示. 该量子线路中量子比特被分成两种类型: 垃圾量子比特和隐藏量子比特, 其中垃圾比特用于完成分类任务, 隐藏量子比特为辅助量子比特. VQOCC 模型主要分为 3 步.

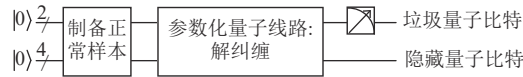


图 8 基于参数化量子线路的一分类器的量子线路图

第 1 步: 将正常的样本存储在量子态 $|\varphi\rangle$ 中.

第 2 步: 执行 PQC.

第 3 步: 对垃圾量子比特进行测量得到损失函数 $loss = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_i} (1 - \langle Z_j \rangle)$, 其中 n_i 为垃圾比特数量, $\langle Z_j \rangle$ 为对第 j 个垃圾比特使用泡利算子 Z 进行测量得到的期望.

VQOCC 的目标就是通过参数化量子线路将垃圾量子比特和隐藏量子比特进行解纠缠, 也就是通过参数化量子线路之后, 使得垃圾量子比特的状态都处于 $|0\rangle$. 这里使用梯度下降法对 PQC 进行训练. 当损失函数为 0 时, 得到最优参数. 对于新输入的异常样本, 其损失函数会远大于 0. 该算法复杂度为 $O(\log M)$.

上述量子半监督学习算法皆为归纳式半监督学习, 也就是说要进行预测的样本为新样本. 另一类半监督学习算法要进行预测的样本为训练样本中未标记标签的样本, 称为传递式半监督学习. Zhou^[96]提出两个量子传递式半监督学习算法: 量子传递最近邻分类和量子半监督 K 均值. 两种量子算法都是以经典算法为基础, 从理论上给出了算法框架, 但是没有给出具体的做法. 这里对第 1 种量子算法做简单介绍. 量子传递最近邻分类器 (quantum propagating nearest-neighbor classifier, QPNNC) 首先使用 QRAM 将 N 个有标签样本和 L 个无标签样本分别存储在量子态中, 记有标签样本集合为 $P = \{|x_i\rangle|y_i\rangle\}_{i=0}^{N-1}$, 无标签样本集合为 $Q = \{|x_j\rangle\}_{j=N}^{N+L-1}$; 然后使用量子算法计算 P 中元素和 Q 中元素的距离 $d^2(x_i, x_j)$, 即 $|x_i\rangle|i\rangle|x_j\rangle|j\rangle|0\rangle \rightarrow |x_i\rangle|i\rangle|x_j\rangle|j\rangle|d^2(x_i, x_j)\rangle$, 并找到最小的距离 $d^2(x_i, x_j)$, 则 $|y_j\rangle = |y_i\rangle$, 然后将 $|x_j\rangle$ 从集合 Q 移到集合 P . 重复上述距离计算至样本移动的步骤, 直到无标签样本集合为空.

4.3 量子半监督学习算法总结和比较

量子半监督学习算法主要分为量子半监督支持向量机和其他一些量子半监督学习算法. 由表 5 可以看出, 除 QPNNC 之外, 相对于经典算法来说, 其他算法的复杂度都达到了指数级降低. 量子半监督支持向量机是基于最小二乘量子支持向量机实现的, 使用的量子基本算法包括 HHL、QPE 和 Swap-test. VQOCC 算法以 QPC 算法为基础, 能够有效地实现. 而 QPNNC 只是一个框架, 并没有给出具体的做法.

表 5 量子半监督学习算法对比

算法	参考文献	量子复杂度	经典复杂度	是否为混合算法	是否实现	量子基本算法
量子半监督支持向量机	KS-QSVM [30]	$O(\log(MN))$	$O(MN)$	是	否	HHL、QPE、Swap-test
	QOCSVM [95]	$O(N^2 \log(M))$	$O(N^3)$	否	否	HHL、QPE、Swap-test
其他量子半监督	VQOCC [31]	$O(\log(M))$	$O(M)$	是	是	PQC
	QPNNC [96]	$O(LN)$	$O(LNM)$	是	否	Swap-test

表 5 对量子半监督学习算法进行总结和比较, 给出各个量子算法的时间复杂度和其相对应的经典算法的时间复杂度, 并给出该算法是否为量子-经典混合算法, 是否存在对应的算法实现, 以及用到的量子基本算法.

5 量子强化学习

强化学习 (reinforcement learning, RL) 是一种机器学习方法, 它研究的是如何使得智能体基于对环境的认知做出使奖励最大化的动作.

如图 9 所示, 智能体通过与环境的交互, 感知当前环境的状态并获得当前环境的奖励, 决策要采取的动作, 以

达到最大化长期收益的预期目标^[97]. 将智能体从开始到结束的过程称为一次试验, 一次试验可以由 T 步完成, 被称为一幕. 假设 t 时刻, 智能体感知到当前的环境状态为 S_t . RL 的目标是为智能体学习一个策略 Π , 由其确定智能体在当前状态下要选择动作 A_t , 完成 A_t 后, 状态转移概率函数 P 使得环境从当前状态按照某种概率转移到状态 S_{t+1} ; 此时, 环境给智能体反馈一个奖励 R_{t+1} . 若从 $t=0$ 开始记录, 则得到一个“状态、动作、奖励”的序列, 即:

$$\{S_0, A_0, R_1, S_1, A_1, R_2, \dots, S_T, A_T, R_{T+1}, S_{T+1}, A_{T+1}, \dots, S_{T-1}, A_{T-1}, R_T, S_T\} \quad (19)$$

其中, S_T 为终止状态, T 为终止时刻.

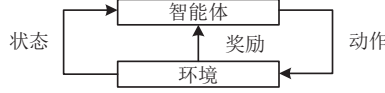


图9 强化学习的基本结构模型

在 RL 的交互过程中, 要尽最大努力平衡好利用当前经验和探索未知状态, 以防利用 (探索) 不足或过度, 这个平衡被称为探索与利用.

量子强化学习 (quantum RL, QRL) 是量子计算和 RL 的交叉领域, 主要被分成两类: 一类是将智能体量子化, 利用量子特性对传统 RL 的智能体的效率进行改进, 称为基于经典环境的量子强化学习; 另一类将环境量子化, 使得智能体以量子化的形式同环境进行交互, 称为基于量子环境的量子强化学习. 本节的内容分为两部分: 基于经典环境的量子强化学习和基于量子环境的量子强化学习.

5.1 基于经典环境的量子强化学习

基于经典环境的 QRL 算法中智能体是量子的, 而环境是经典的. 本节分为基于传统算法的量子强化学习算法和基于情景记忆的量子强化学习算法.

5.1.1 基于传统算法的量子强化学习算法

2008 年, Dong 等人^[32]最先使用量子叠加性和并行性提出了 QRL 的概念. 在该算法中, 将动作集合中的所有动作和状态集合中的所有状态都存储在叠加态中, 并利用量子特性提升算法的效率. 主要体现在两个方面.

一方面通过量子并行性提高效率. 将所有的状态 $s_0, s_1, \dots, s_{2^m-1}$ 表示成希尔伯特空间的一组基, 其量子形式记为特征状态 $|s_0\rangle, |s_1\rangle, \dots, |s_{2^m-1}\rangle$. 因此在 QRL 算法中, 任意的状态 $|s\rangle$ 都可以表示为特征状态的线性组合, 即

$$|s\rangle = \sum_{u=0}^{2^m-1} \alpha_u |s_u\rangle, \text{ 其中系数满足 } \sum_{u=0}^{2^m-1} |\alpha_u|^2 = 1. \text{ 该算法基于时序差分方法更新值函数, 即:}$$

$$V(s) \leftarrow V(s) + \alpha(R + \gamma V(s') - V(s)) \quad (20)$$

其中, α 是学习率. 这里, 状态 $|s\rangle$ 为叠加态形式, 由量子并行性可知, 单个酉算子作用于公式 (20) 可以同时更新所有特征状态的值函数.

另一方面使用振幅放大算子提高效率. 所有的动作 $a_0, a_1, \dots, a_{2^n-1}$ 表示成希尔伯特空间的一组基, 其量子形式记为特征动作 $|a_0\rangle, |a_1\rangle, \dots, |a_{2^n-1}\rangle$. 因此在 QRL 算法中, 任意的动作 $|a\rangle$ 都可以表示为特征动作的线性组合, 即

$$|a\rangle = \sum_{v=0}^{2^n-1} \beta_v |a_v\rangle, \text{ 其中系数满足 } \sum_{v=0}^{2^n-1} |\beta_v|^2 = 1. \text{ 但是, 智能体在给定状态下的动作只能通过测量来决定, 这导致它根据}$$

相关的振幅只能塌缩到 $|a\rangle$ 的一个特征动作, 此时以概率 $|\beta_v|^2$ 塌缩到动作 $|a_v\rangle$. 在动作 $|a_v\rangle$ 执行之后, QRL 算法使用 Grover 搜索算法中的幅度放大算子来增加获得更高奖励的动作的概率.

传统 RL 中的智能体主动地选择动作, 而该 QRL 中的智能体利用量子塌缩特性, 因此是以概率的形式达到探索与利用之间的平衡.

上述算法使用 Grover 搜索算法中的振幅放大算子 $U_2 U_1$ 来增加获得更高奖励的动作的概率, 其中 $U_1 = I - 2|a_v\rangle\langle a_v|$, $U_2 = 2|a\rangle\langle a| - I$. Li 等人^[98]提出将 QRL 应用于人类决策, 他们提出算子 $U_2 U_1$ 限制了振幅放大的连续性, 将算子 U_1 和 U_2 修改为 $U'_1 = I - (1 - e^{i\phi_1})|a_v\rangle\langle a_v|$ 和 $U'_2 = (1 - e^{i\phi_2})|a\rangle\langle a| - I$. 事实上, 当 $\phi_1 = \phi_2 = \pi$ 时, 有 $U'_1 = U_1$ 和 $U'_2 = U_2$, 因此具有连续性的振幅放大算子被称为广义的振幅放大算子. U'_1 和 U'_2 的设计不仅增加了振幅放大的

连续性, 而且使得不好的动作得到了惩罚, 例如当动作不好时, 智能体得到的奖励应该为 -1 . $U_2 U_1$ 只能增加好的动作的概率, 使好动作增加奖励; 而 $U_2' U_1'$ 可以使算法不仅能使好动作增加奖励, 还能使不好的动作得到惩罚^[99].

除此之外, Li 等人^[100]提出了基于广义振幅放大算子的 RL 方法, 并将其应用于无人机的传输. 相对于上述量子算法而言, 该算法利用量子特性使所有可能的动作按照概率大小逐步更新学习, 从本质上平衡了探索与利用, 从而免去了超参数的学习.

5.1.2 基于情景记忆的量子强化学习算法

基于传统 RL 算法的 QRL 需要和环境进行交互从而学习到好的策略, 当交互次数非常多时, 测量会使算法付出沉重的代价. 因此, 基于情景记忆的 QRL 算法被提出^[33,101,102].

2012 年, Brieqel 等人^[33]提出了基于投影模拟的 QRL 算法, 投影模拟的核心为智能体的经验组合记忆. 如图 10 所示, 经验组合记忆可以被看成一个由 clip 组成的随机网络. 如果将所有的状态集合和动作集合分别记作 S 和 A , 第 i 个 clip 被标记为 c_i , 则 $c_i \in S \cup A$. 在真实的环境中执行动作之前, 智能体根据之前的记忆对动作进行模拟, 由模拟结果可知哪个动作使智能体获得的奖励最大, 将该动作作为在真实的环境中要执行的动作. 基于投影模拟的 QRL 算法使用量子随机游走找到最优的动作. 虽然 Brieqel 等人将算法扩展到了量子领域, 但是该量子算法并没有展现出相对于经典算法的优势.

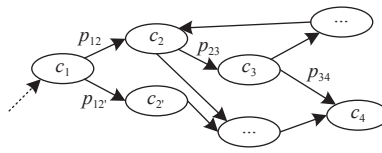


图 10 经验组合记忆模型

Paparo 等人^[101]给投影模拟的经验组合记忆网络增加情感标记, 当动作 clip 遇到负奖励时, 随机游走过程将会被迭代, 该过程被称为反射, 因此这种类型的强化学习模型被称为基于反射投影模拟的强化学习. 在此基础上提出了基于反射投影模拟的量子强化学习. 并且指出经典算法的思考时间与 $\frac{1}{\delta}$ 和 $\frac{1}{\varepsilon}$ 成正比, 其中 δ 是马尔可夫链的谱隙, ε 表示采取动作的概率, 而量子算法的思考时间为 $\frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}}$.

5.2 基于量子环境的量子强化学习

基于量子环境的 QRL 是将量子智能体在与量子环境进行交互的过程中进行学习. 2015 年, 量子智能体在量子环境中学习的框架被提出^[103], 其核心是构建和经典环境交互等价的量子式交互. 图 11 给出了经典交互和量子交互的对应, 图 11(a) 为经典智能体和经典环境的交互过程. 图 11(b) 和 (c) 是量子智能体和量子环境的交互过程. 图 11(b) 中, 智能体和环境共用一个通信寄存器 R_C , 又有各自的寄存器 R_A 和 R_E . 智能体和环境交互作用在通信寄存器 R_C 和私有寄存器上, 得到算子序列 $\{M_1^A, M_2^A, \dots, M_t^A\}$ 和 $\{M_1^E, M_2^E, \dots, M_t^E\}$, 其中 $\{M_i^A\}$ ($i = 1, 2, \dots, t$) 为作用在通信寄存器 R_C 和智能体寄存器 R_A 上的酉变换, 改变智能体的动作, 使得新动作存储在通讯寄存器 R_C 上; $\{M_i^E\}$ 为作用在通信寄存器 R_C 和环境寄存器 R_E 上的酉变换, 改变环境状态, 使得新状态存储在通讯寄存器 R_C 上. 这样一来, 每次新的动作和状态都会覆盖之前的量子态, 由于量子叠加性和测量后的坍缩性, 不能直接对通讯寄存器 R_C 进行操作, 这样就无法知道中间过程的动作和状态.

如图 11(c) 所示, Dunjko 等人^[34]进一步提出通过增加测试寄存器 R_T 来记录中间的动作和状态, 将测试算子 U_i^T 定义为:

$$U_i^T(|x\rangle_{R_C}|\varphi\rangle_{R_T}) = |x\rangle_{R_C}U_i^x|\varphi\rangle_{R_T} \quad (21)$$

其中, $x \in S \cup A$, U_i^x 为作用于测试寄存器 R_T 上的算子. 对于一个严格周期性、单一奖励的环境, 该环境可以量子化为一个相位翻转黑箱, 利用此黑箱, 结合 Grover 搜索算法给出 QRL 算法, 该量子算法在理论上对学习效率具有二次加速. 但是, 该算法仅适用于一些简单的棋类游戏. 并且没有给出可行的实验方案.

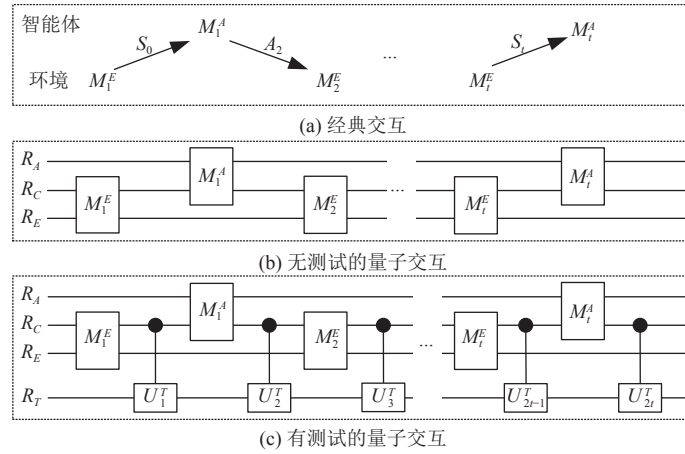


图 11 经典交互和量子交互的对应

此外,对于交互式的 RL 来说,智能体的学习效率不仅和交互效率有关,还取决于它自身的参数.能够自动调整参数的强化学习称为元强化学习.2017年,元强化学习的量子版本,即量子元学习被提出^[104].量子元学习将交互过程看作一个系统,利用量子离散优化技术找到该系统的最优状态,进而实现量子元学习.2022年Wan等人^[105]提出了更复杂的强化学习的量子版本:量子多臂老虎机和量子随机线性老虎机,该量子算法达到了二次加速.

5.3 量子强化学习算法总结

不管是基于经典环境的量子强化学习算法还是基于量子环境的量子强化学习算法,使用的量子基本算法都是 Grover 搜索算法中振幅放大算子,因此相对于经典算法来说,这些算法皆达到了二次加速.这些算法不能单次在量子计算机完成完整的算法,因此都属于量子-经典混合算法.此外,Saggio等人^[106]和 Sriarunothai等人^[102]从实验上验证了量子强化学习的优越性.

6 量子深度学习

深度学习是机器学习中非常火热且实用的研究方向^[107,108].2006年,Hinton等人^[109]提出了深度学习的概念,开启了深度学习的研究潮.2016年,Wiebe等人^[35]最先提出了基于深度玻尔兹曼机的量子算法.近两年比较流行的是基于参数化量子线路的量子生成对抗网络和量子深度强化学习等算法.本节分别对这些算法进行介绍.

6.1 量子玻尔兹曼机

玻尔兹曼机是一种“基于能量”的神经网络模型,能量最小时网络达到理想状态.常见结构如图 12 所示,其神经元分为两层:显层和隐层.其中显层 h_i ($i = 1, 2, \dots, q$) 用于表示数据的输入和输出;隐层 x_j ($j = 1, 2, \dots, p$) 则被理解为数据的内在表达;显层和隐层通过权重来连接.

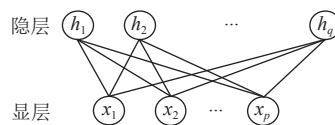


图 12 玻尔兹曼机

网络的训练目标是 minimized Boltzmann machine energy function $E_z = -z^T W z - a^T z = -\sum_{k,l} w_{kl} z_k z_l - \sum_k a_k z_k$, 其中 $z = (z_1 \ z_2 \ \dots \ z_N)^T$ ($N = p + q$) 为包含 $\{h_i\}_{i=1}^q$ 和 $\{x_j\}_{j=1}^p$ 的向量, $W = \{w_{kl}\}_{k,l=1}^N$ 和 $a = \{a_k\}_{k=1}^N$ 为要训练的参数矩阵和向量.利用该能量函数可以给出状态 (h, x) 的联合概率分布,进而得到边缘分布,然后由边缘分布得到似然函数,最

后使用优化方法求似然函数的最值.

通常情况下,经典的玻尔兹曼机模型复杂,包含大量的变量,使用优化方法求最值时难以计算出梯度值.量子深度玻尔兹曼机最早由 Wiebe 等人^[35]提出,他们使用量子采样和量子概率幅估计两种方法来更新梯度,能够有效解决计算量大的问题,对于具有多层或使用大量训练集的玻尔兹曼机在训练效率和模型质量方面都优于经典的深度学习算法.

Amin 等人^[110]提出了一种基于量子哈密顿量的量子玻尔兹曼机.该算法使用哈密顿量 H 代替能量函数 E_z . 定义 $H = -\sum_{k,l} w_{kl} \sigma_k^- \sigma_l^- - \sum_k a_k \sigma_k^-$, 其中 $\sigma_k^- = \overbrace{I \otimes \dots \otimes I}^{k-1} \otimes \sigma_z \otimes \overbrace{I \otimes \dots \otimes I}^{N-1}$, 从而得到对应于经典模型中的似然函数,利用精确对角化的方法,通过最大化对数似然及其下界来训练具有横场哈密顿量(对哈密顿量 H 增加横场项^[110])的量子玻尔兹曼机,最后求得最优参数.

尽管 Amin 等人^[110]提出的模型是可训练的,但是该模型中的横场项并不能从量子数据中学习,而要通过蛮力技术找到,这使得找到完整的哈密顿量非常困难,因此该算法并没有明显的量子优势.此外,该算法需要复制量子态,因此无法在当前流行的 NISQ 设备上实现.因此,Shingu 等人^[111]提出基于参数化量子线路的玻尔兹曼机.2023年,Coopmans 等人^[112]指出量子玻尔兹曼机的一个重要步骤是估计吉布斯态的期望,他们提出了结合热化纯态^[113]和经典的阴影层析成像^[114]的算法,和变分量子算法相比,该算法减少了测量次数,从而将量子态的制备次数从 M 减少到了 $\log M$. 此外,该算法使用热化纯态的方法,将需要的量子比特的数量减少了一半.

6.2 量子生成对抗网络

2014年,Goodfellow 等人^[115]提出生成对抗网络,该模型由两部分构成:生成器和判别器.生成器(generator network, G)的输入是一个随机向量 z ,输出为合成样本;判别器(discriminator network, D)的输入为一个样本(真实的或合成的),输出为对该样本的判断:是合成样本还是真实样本.随着训练的进行,生成器能够逐渐生成越来越逼真的样本,以至于判别器无法区分.与此同时,判别器的鉴别能力也在逐渐提高.QGAN 最早在2018年由Lloyd 等人^[36]提出.但是并没有给出具体的算法.目前被广泛研究的主要有两种类型的 QGAN:数据、生成器和判别器都是量子的;数据和判别器是经典的而生成器是量子的.

6.2.1 数据、生成器和判别器都是量子的

这种类型的 QGAN 算法被称为全 QGAN (full QGAN, FQGAN) 算法.如图 13(a)所示,FQGAN 算法生成器和判别器都是由参数化量子线路组成,这里数据以量子形式存储,也可以将经典数据制备到量子态中,进而使用该算法处理经典数据.由随机向量 z 组成的空间称为隐空间.在图 13(a)中,隐空间使得量子系统处于状态 $|z\rangle$,通过量子生成器 $G(\theta_G)$ 之后,演化为 $|\varphi\rangle$,此时将真实数据 $|x\rangle$ 和生成数据 $|\varphi\rangle$ 同时输入量子判别器 $D(\theta_D)$,根据判别器的输出 $|y\rangle$ 定义损失函数,进而更新 $G(\theta_G)$ 和 $D(\theta_D)$ 的参数.

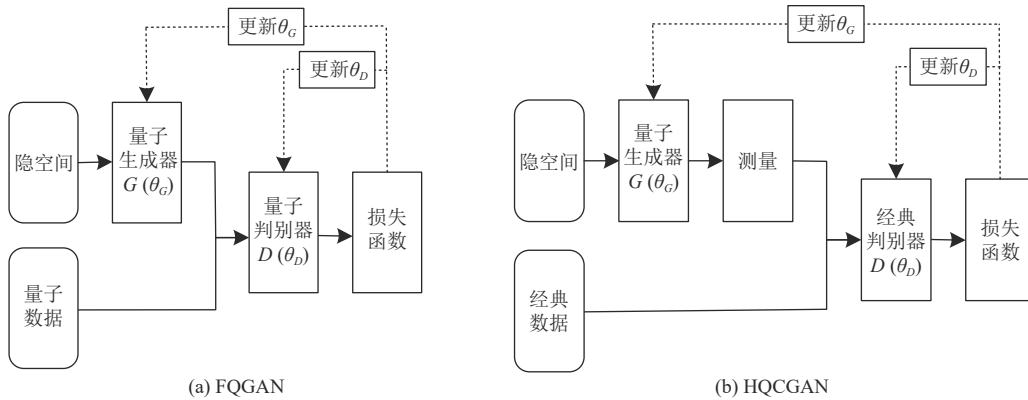


图 13 量子生成对抗网络框架

2018年, Dallaire-Demers 等人^[116]提出了基于条件分布的 FQGAN, 该算法利用量子线路构建量子生成对抗网络和计算模型的梯度. 但是, 由于通过量子电路估计参数梯度的方法需要执行复杂的受控操作和误差纠错, 因此很难在 NISQ 设备上实现. 2019年, 清华大学孙麓岩团队^[117]提出在超导量子电路中实现 FQGAN, 其生成量子态的保真度为 98.8%. 该团队还通过实验证明了 FQGAN 比经典 GAN 存在的指数优势. 此外, Niu 等人^[118]提出了一种纠缠量子生成对抗网络算法, 利用量子电路的纠缠能力, 通过在生成器的输出和真实量子数据之间执行纠缠操作, 可以保证模型在判别器和生成器电路的极小极大优化下收敛到纳什均衡点. 上述算法都是基于参数化量子线路实现判别器和生成器, 但是参数化量子线路容易出现贫瘠高原问题, 也就是随着电路量子比特数的增加或电路深度的增加, 梯度的期望值趋于零. 为此, Liu 等人^[119]在 2022 年提出了基于瑞丽散度的 FQGAN 算法, 该算法避免了训练过程出现的贫瘠高原问题. 此外基于 Wasserstein 距离 (也被称为推土机距离) 的 FQGAN 算法被提出^[120,121], 该算法提高了模型在 NISQ 设备上生成量子数据的鲁棒性和可扩展性.

6.2.2 数据和判别器是经典的而生成器是量子的

这种类型的 QGAN 通常被称为混合量子-经典 GAN (hybrid quantum-classical GAN, HQCGAN), 如图 13(b) 所示. 由于判别器是经典的网络, 因此经过量子生成器 $G(\theta_G)$ 之后需要通过测量得到相应的经典信息 v , 此时将真实数据 x 和生成数据 v 同时输入经典判别器 $D(\theta_D)$, 根据判别器的输出 y 定义损失函数, 进而更新 $G(\theta_G)$ 和 $D(\theta_D)$ 的参数.

Zoufal 等人^[122]提出了一个 HQCGAN 算法, 该算法使用相对熵和 Kolmogorov-Smirnov 统计量计算生成器生成的数据与真实数据之间的距离, 该算法将 n 量子比特的随机分布加载到量子态上仅需要 $O(\text{poly}(n))$ 个量子门, 相对于之前算法需要 $O(2^n)$ 个量子门来说, 极大地减少了需要的量子门的数量, 提高了量子态制备效率. 2023 年, Zhou 等人^[123]给出了能够产生高分辨率图像的 HQCGAN, 由于 n 个量子比特可以存储 2^n 个离散值, 因此该算法中分辨率的高低受量子比特数量的影响.

6.3 量子深度强化学习

在强化学习算法中, 需要计算所有状态 (或状态-动作组合) 值函数的方法被称为表格方法. 但是当状态或动作空间数据量巨大甚至连续时, 表格方法将不再适用. 因此深度强化学习被提出^[124], 该算法将强化学习与深度学习相结合, 用深度神经网络逼近值函数或者策略函数.

2020 年, Chen 等人^[137]提出基于 Q-学习的量子深度强化学习算法, 该算法遵循经典深度强化学习的基本规则, 使用参数化量子线路代替经典算法中的网络, 与经典算法相比, 该量子算法减少了需要学习的参数. 如图 14 所示, 智能体观察环境当前的状态 S_t , 对其进行预处理, 使用算子 $U_{\phi(S_t)}$ 将其存储在量子态中. 然后使用参数化量子线路 $U(\theta)$, 并对其进行测量, 得到期望值 $\langle O \rangle_{S_t, \theta}$. 对 $\langle O \rangle_{S_t, \theta}$ 进行后处理用于表示值函数 $V_{\Pi}(s)$ 或者策略 $\Pi(a|s)$, 据此, 智能体选择一个动作作用于环境. 为了对模型参数进行更新, 参数位移规则被提出用于计算梯度信息^[56,125]. 此外, 文献 [126] 研究量子算法在具有连续动作空间的强化学习问题中的应用, 提出了一种基于量子神经网络的深度确定性策略梯度方法的量子版本, 该方法将状态信息编码为量子状态幅度以解决维度灾难问题.

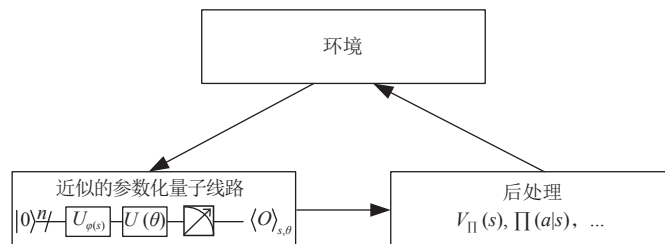


图 14 量子深度强化学习框架图

6.4 其他量子深度学习算法

卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 是一种自带特征提取和分类功能的深度学习模型. CNN 尤

其适用于处理具有网格结构的数据,量子卷积神经网络 (quantum CNN, QCNN) 结合量子计算的优势和神经网络强大的特征提取能力完成分类任务. 2019 年, Cong 等人^[127]提出基于参数化量子线路的 QCNN 模型, 类似于经典的卷积神经网络结构, 量子卷积神经网络由量子卷积层、量子池化层和量子全连接层组成, 每一层都是由参数化量子线路组成. 该量子算法能够被用于量子纠错. 2020 年, Li 等人^[128]采用更加精细的量子线路计算量子内积以及近似激活函数, 从而实现 QCNN 算法. 2022 年, Hur 等人^[129]将 QCNN 应用于二分类任务. 但是量子卷积神经网络在处理高维、多分类任务时仍然面临着很大的挑战.

自编码器是一种由编码器和解码器组成的无监督学习算法, 其中编码器用于学习输入数据的隐含特征, 解码器用学习到的特征重构出输入数据. 因此, 自编码器常用于数据压缩. 2017 年, Romero 等人^[130]针对量子数据提出基于参数化量子线路的量子自编码器, 该算法主要是为了使用自编码器压缩量子态. 此外, Zhang 等人^[131]将量子自编码器应用于隐形传态, 他们使用量子自编码器将高维量子态进行压缩, 然后进行传输, 为高维量子计算提供了新思路.

此外, 量子图神经网络^[132]和量子循环神经网络^[133]也被提出, 这些算法也是在不改变经典算法结构的基础上, 利用量子特性对其进行改进.

6.5 量子深度学习算法总结

量子深度学习算法主要是将经典深度学习中的神经网络组件用 PQC 代替, 通过训练 PQC 中的参数, 完成任务. 本节介绍了量子玻尔兹曼机、量子生成对抗网络、量子卷积神经网络等量子深度学习模型. 这些算法使用的量子基本算法为参数化量子线路, 因此可以在 NISQ 设备上有效实现. 此外, 这些算法需要在量子设备和经典设备之间转换得到最优参数, 因此都属于量子-经典混合算法.

7 量子机器学习算法的应用

量子机器学习算法已经得到了广泛研究, 从理论和实验验证了算法的可行性和优越性. 现在量子机器学习算法也已经被应用于图像处理、疾病诊断、金融等领域. 本节对量子机器学习的应用进行讨论.

7.1 图像处理

Ruan 等人^[86]根据经典主成分分析算法提出了应用于人脸识别的量子主成分分析算法. 该算法首先设计了一种人脸特征编码方案, 并使用阈值判定两幅人脸的相似性. 然后根据所设计的特征脸的量子表示, 将数据库中的 n 张人脸构成一个数据库, 应用 Grover 算法进行搜索识别, 使得算法的时间效率有了显著提高. 但该算法只在搜索识别阶段使用了量子算法, 这部分是该算法获取加速的来源.

Li 等人^[63]在核磁共振设备上实现使用量子支持向量机进行手写数字识别的实验. 该模型使用二维向量表示手写数字图像 6 和 9, 将其制备在量子态中. 最终使用 4 个量子比特以 100% 的准确率完成了分类任务. Wang 等人^[134]使用量子 K 近邻算法实现了该类算法的手写数字识别. Zhang 等人^[135]提出不需要迭代的量子支持向量机模型, 并在量子计算机上完成了手写数字的识别任务.

Dang 等人^[136]使用量子 K 近邻算法, 在自然图像数据集进行了图像分类. 首先在经典计算机上提取图像的特征向量; 然后将特征向量输入到一个量子叠加态中, 实现相似度的并行计算; 再采用 Dürr 的量子最小值搜索算法加速相似性的搜索过程. 最后对图像进行量子测量分类. 该算法较经典算法, 在提高算法效率的前提下, 保证了准确性.

7.2 疾病诊断

生物标志物是指能被客观测量和评价, 反映生理或病理过程, 以及对暴露或治疗干预措施产生生物学效应的指标. 2020 年, Dwivedi 等人^[137]提出在量子计算机模型上实现深层玻尔兹曼机很容易, 因此提供了一种量子玻尔兹曼机模型, 该模型能够识别疾病相关的生物标志物并对新样本进行预测. 2023 年, Dong 等人^[138]提出将量子卷积层作为预处理来提取浅层特征, 并利用经典算法完成分类, 该算法对脑部肿瘤进行分类, 使用参数化量子线路使得四分类的准确率达到了 97.85%.

7.3 金融

近年来,随着金融领域向数字化转型,金融系统对算力的要求也越来越高.量子机器学习凭借其强大的计算能力被应用于金融领域的各个分支.欺诈检测是金融领域一个重要技术,它的主要任务是快速适应变化的欺诈模式,并且及时发现新的欺诈方法.Zoufal 等人^[139]给出量子玻尔兹曼机算法,并将其应用于欺诈检测,实验结果表明量子算法在准确率、召回率等方面都要优于经典算法.期权定价通过考虑股价的波动给出未来股价的分布,进而估计出未来股价的各种可能性.Stamatopoulos 等人^[140]利用量子振幅估计算法实现了对经典蒙特卡洛算法的二次加速,并在 IBM 量子设备上完成了期权定价的实验.

7.4 其他应用

2014 年,量子 BP 神经网络被 Li 等人应用于发动机故障诊断^[141].该算法首先将实数值训练样本转换为量子态训练样本,然后计算量子态权值并更新网络参数,使得参数达到最优.最后,利用最优模型对故障进行诊断.实验结果表明,与经典 BP 神经网络相比,量子 BP 神经网络算法为发动机故障诊断提供了一种更为快速、有效的分析方法.

此外,Batra 等人^[142]将量子支持向量机算法用于药物研发.勃林格殷格翰与谷歌量子人工智能实验室将量子算法用于药物设计^[143].2023 年 3 月世界顶级医疗机构克利夫兰医学中心和 IBM 正式公布了第 1 台专门用于医疗机构的量子计算机 IBM Quantum System One,主要用于帮助克利夫兰医学中心加速生物医药发现^[144].Nicesio 等人^[145]将量子神经网络应用于网络入侵检测.Li 等人^[146]将量子神经网络应用于语音增强.

8 实验

本节给出 4 个量子机器学习相关实验.通过这 4 个例子,介绍量子机器学习相关的实验方法和实验进展.4 个实验共分为两部分:前两个为量子基本算法实验;后两个为量子机器学习中的分类实验.实验在 IBM 量子云平台上进行.

8.1 量子基本算法相关实验

(1) Swap-test 算法实验

Swap-test 用于计算两个量子态的相似度,也就是两个量子态内积模的平方.本实验计算的是量子态 $|a\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ 和 $|b\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$ 的内积模的平方 $|\langle a | b \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \times 0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \times 1 \right|^2 = 0.5$,以反映它们的相似度.

实现的量子线路图如图 15(a) 所示.由于实验环境中所有量子比特的初始态都是 $|0\rangle$,因此第 1 步使用 H 门和 X 门分别在 q_1 和 q_2 上制备量子态 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$.第 2 步为交换测试,最后对 q_0 进行测量.测量结果如图 15(b) 所示.图中横坐标的 3 个量子比特,从上到下分别对应 $q_0 \sim q_2$,由于未对 q_1 和 q_2 进行测量,因此它们的状态均为 0.对于 q_0 ,测量为 $|0\rangle$ 的概率是 $0.746 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}|\langle a | b \rangle|^2$,测量为 $|1\rangle$ 的概率是 $0.254 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}|\langle a | b \rangle|^2$,因此可得 $|\langle a | b \rangle|^2 = 2P(0) - 1 = 1 - 2P(1) = 0.492$.

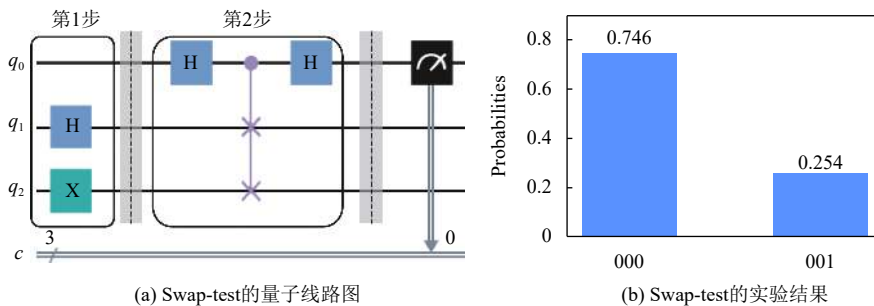


图 15 Swap-test 量子线路图及实验结果

需要注意的是, 实验给出的 0.746、0.254 等实际上是多次测量得到的频率, 而非真实概率. 因此计算出的实验值 0.492 与理论值 0.5 有一定的误差. 几乎所有的量子机器学习算法的实验最终都是通过频率给出实验结果, 因此误差在所难免, 可以通过增加实验次数减小误差. 而且一般来讲, 不严格区分概率和频率两个概念, 统称为概率.

(2) HHL 算法实验

HHL 算法用于求解线性方程组, 但是实际上 HHL 得到的是各个解之间的比. 本节以求解二维线性方程组 $\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 为例进行实验, 其中 $A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. 量子线路图如图 16 所示, 其中 q_0 是受控旋转的辅助量子比特, q_1 和 q_2 存储矩阵 A 的特征值, q_3 存储 b . 第 1 步在 q_3 上制备 b ; 第 2 步为量子相位估计; 第 3 步为受控旋转; 第 4 步为逆量子相位估计; 最后是测量.

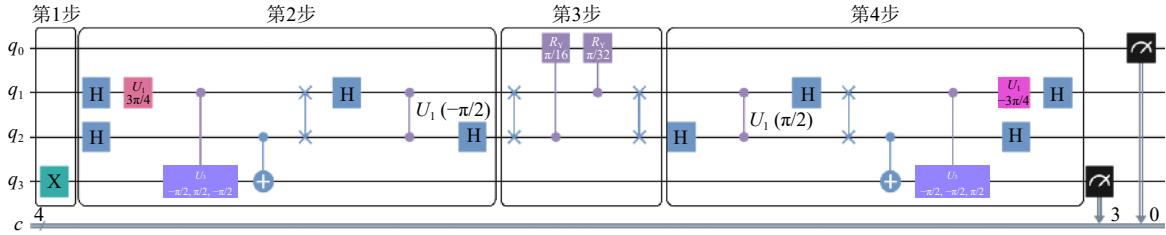


图 16 求解线性方程组的量子线路图

为了更好地分析结果, 本实验输出 200 000 次测量的结果统计:

$$\{ '0000' : 0, '1001' : 271, '0001' : 30, '1000' : 199699 \} \quad (22)$$

这说明, 200 000 次实验中, 0001 与 1001 分别被测得 30 次和 271 次. 因此解的平方的比为 $\left| \frac{x_1}{x_2} \right|^2 = \frac{30}{271}$. 理论结果为 $\left| \frac{x_1}{x_2} \right|^2 = \frac{1}{9}$, 实验结果与理论结果基本吻合, 这主要是由量子测量结果的概率性引起的.

8.2 量子机器学习算法实验

本节使用量子机器学习算法分别对二维和四维数据进行分类, 其中用量子支持向量机对二维数据进行分类, 用量子神经网络对四维数据进行分类.

(1) 量子支持向量机算法实验

本实验利用量子支持向量机对手写数字 6 和 9 进行分类. 训练集为一个 6 和一个 9, 它们对应的二维特征向量分别为 $x_1 = (0.987 \ 0.159)$ 和 $x_2 = (0.354 \ 0.935)$, 标签分别为 $y_1 = +1$ 和 $y_2 = -1$. 测试集 6 和 9 的特征向量分别为 $x_3 = (0.987 \ 0.160)$ 和 $x_4 = (0.352 \ 0.936)$. 考虑公式 (4) 中 $b = 0$ 的情况, 令 $\gamma = 2$, 则公式 (4) 退化为 $(K + 2^{-1}I)\alpha = y$. 量子线路图如图 17(a) 所示, 其中 X_gate 门 (图 17(b)) 用于构造待分类样本, U_gate 门 (图 17(c)) 实现了 HHL 算法以及训练样本的构造, 最后通过 Swap-test 对数据进行分类. 分类结果如图 18(a) 和图 18(b) 所示. 当输入待测数据为 6 时, 由图 18(a) 可知, 测量 q_0 得到 $|1\rangle$ 的概率为 0.475; 当输入待测数据为 9 时, 由图 18(b) 可知, 测量 q_0 得到 $|1\rangle$ 的概率为 0.524. 根据第 2.1.3 节对量子支持向量机的分析可得分类结果正确.

(2) 量子神经网络算法实验

本实验旨在使用量子神经网络对有标签的数据进行训练得到合适的参数, 进而对输入样本进行分类. 输入样本的特征向量组成的矩阵 X 如公式 (23) 所示, X 的每一行为一个样本的特征向量, 其对应的标签为 y 的元素.

$$X = \begin{pmatrix} 0.80377 & 0.55161 & 0.22064 & 0.03152 \\ 0.71414 & 0.26647 & 0.61821 & 0.19186 \\ 0.77611 & 0.54975 & 0.30721 & 0.03234 \\ 0.86094 & 0.44004 & 0.24872 & 0.05740 \\ 0.69053 & 0.32145 & 0.60719 & 0.22621 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (23)$$

量子神经网络的量子线路图共分成两部分: 参数化量子线路图 (图 19(a)) 和用于求解参数梯度的量子线路图

(图 19(b)). 图 19(a) 中第 1 步是为了制备特征向量; 第 2 步为参数化量子线路, 其中 10 个参数的初始值随机生成. 图 19(b) 为使用 Hadamard-test 计算目标函数的量子线路图.

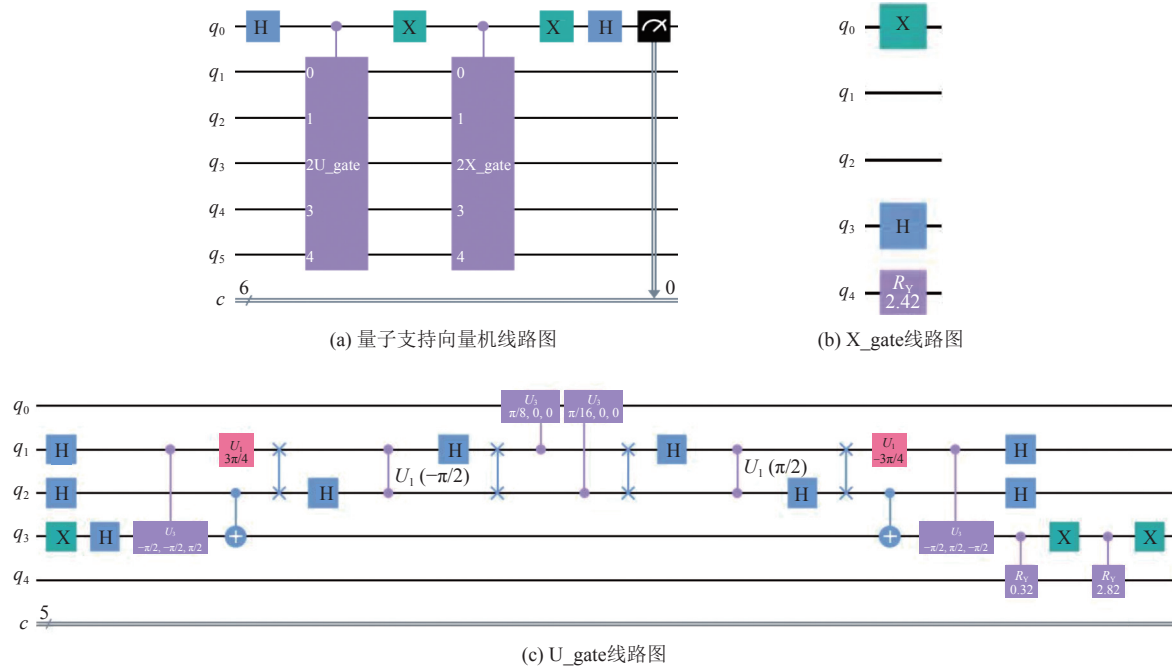


图 17 量子支持向量机线路图

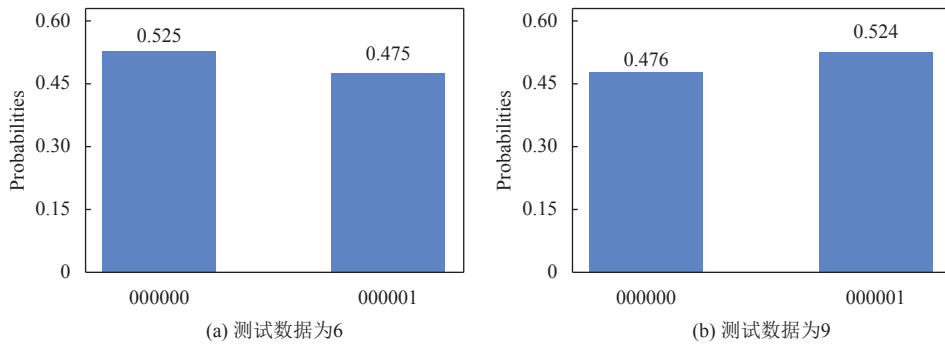


图 18 量子支持向量机实验结果

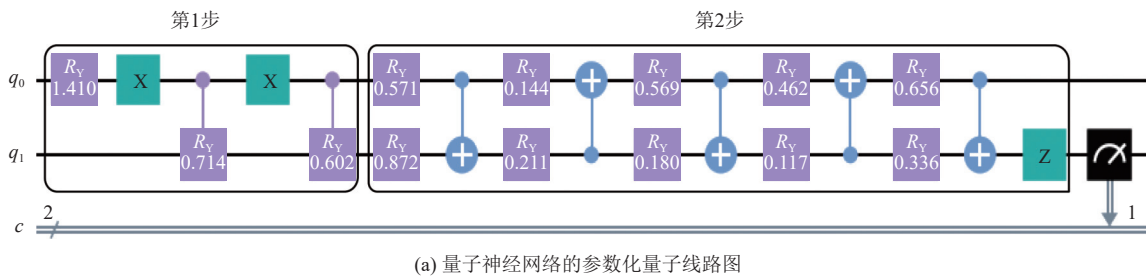
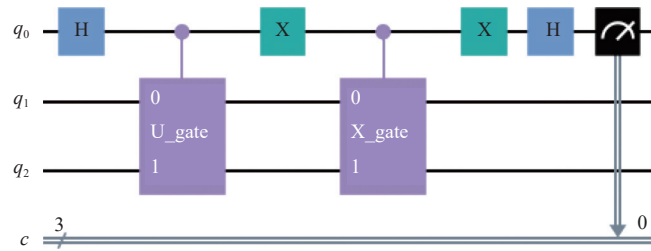


图 19 量子神经网络线路图



(b) 求解参数梯度的量子线路图

图 19 量子神经网络线路图(续)

由梯度下降法可得最优参数 0.5348、0.8358、0.1080、0.1751、0.5336、0.1429、0.4261、0.0811、0.6199、0.3004 和偏置项 $b=0.0712$ 。将矩阵 X 内的数据分别输入到神经网络中再加上偏置项得到预测值 0.1972、0.6522、0.2772、0.2432、0.6352。当预测值小于 0.5 时, 预测结果为 0; 当预测值大于等于 0.5 时, 预测结果为 1。因此对样本的预测值结果分别为 0、1、0、0、1, 与真实标签一致。

9 结论和展望

量子机器学习是一个交叉领域, 推动这一领域出现有两方面的原因。一方面是因为面对越来越庞大的数据, 机器学习算法的训练时间变得越来越长, 仅依靠传统计算机带来的高运算速度已经无法对其进行处理, 提高机器学习算法的效率迫在眉睫。另一方面则是量子计算展现的强大运算能力, 同时 Swap-test、量子相位估计、Grover 搜索算法和 HHL 算法等量子基本算法的发展为量子机器学习提供了工具。两方面共同推动了量子计算和机器学习的结合, 促进了量子机器学习这一个交叉领域的诞生, 为提高算法效率提供了一条新思路。

量子机器学习的概念虽然从 1995 年就被提出, 但它仍然稚嫩, 还有大片空白等着学者们研究填补。一方面, 经典机器学习算法还未全部实现量子迁移; 另一方面, 当前的量子算法还有进步的空间。下面对量子机器学习算法的发展前景及发展方向进行展望。

(1) HHL 算法是量子支持向量机、量子线性回归以及量子聚类算法的核心, 用于求解这些量子机器学习算法转化的线性方程组。但是, 使用 HHL 算法求解方程组 $Ax = b$ 时, 需要执行量子相位估计。在现有的量子设备上实现这个任务并不是一件容易的事情, 这主要是因为需要模拟 e^{iAt} 。但是, 文献 [76] 提出了一种新的模拟 e^{iAt} 的技术, 用于 HHL 时可以提升它的性能。将新的 HHL 算法应用于量子支持向量机等量子机器学习算法是一个研究方向。此外, 目前比较流行的参数化量子线路能够在 NISQ 设备上有效地实现, 因此实现基于参数化量子线路的量子支持向量机、量子线性回归以及量子聚类等量子算法是一个重要研究方向。

(2) 量子深度强化学习主要是以参数化量子线路为基础逼近值函数或者策略函数, 将量子算法和经典算法相结合使得智能体基于对环境的认知做出使奖励最大化的动作。但是, 在当现有量子深度强化学习和相应地经典算法相比较时, 量子算法的优势并不明显^[10]。因此, 如何有效地利用参数化量子线路部署量子强化学习算法是一个值得思考的问题。

(3) 参数化量子神经网络是目前比较流行的量子神经网络。但是, 和经典神经网络一样, 这种类型的算法需要重复量子-经典算法直到得到能够正确分类的参数, 每一次训练的每一个参数都会影响到整个模型。因此, 参数化量子线路也依赖于大量的数值研究, 这将会和经典深度学习一样, 陷入巨大的计算量的漩涡中^[40]。因此, 探索更加合理的方式连接量子-经典算法是一个值得研究的方向。

(4) 当前的绝大多数量子机器学习算法虽然能够实现量子加速, 但是, 这些加速大部分是由于使用量子算法替换了经典算法的子程序达到的。这说明, 量子机器学习算法仍然受到传统机器学习算法的约束, 其真正潜力可能仍然没有得到充分开发。利用量子计算特点, 从完全不同于传统机器学习方法的全新角度解决经典机器学习悬而未决的问题, 充分挖掘量子算法的潜能, 实现量子加速的同时带来新的解决方法或许是研究者们更期待的。

(5) 智能时代的到来对学习效率、计算资源等都有了更高的要求,但是,传统的机器学习方法对大规模的数据处理和复杂环境的快速适应方面,还面临着学习效率低、计算资源不足等问题.量子计算和机器学习的结合发展,将在这些方面产生重大影响,带来高效地大规模数据处理能力以及极低延迟的实时智能交互.尽管目前只有少部分量子机器学习算法被应用于现实生活.但是,随着该领域研究的不断深入,将对包括物联网、智能控制、智慧城市、产业升级等众多领域产生重大影响,促进智能时代的到来.

虽然,当前的量子机器学习算法大多还在理论研究阶段,也没有完善的理论框架进行指导,如何优化算法的输入与输出、量子态的使用、算法的稳定性等等问题还都需要进一步地优化和加强.挑战虽在,但时间会给研究者们机会来解决这些问题,当量子硬件和量子计算机研制成熟时,量子机器学习算法必定会展现其应有的力量.

References:

- [1] Feynman RP. Simulating physics with computers. *Int'l Journal of Theoretical Physics*, 1982, 21(6-7): 467-488. [doi: [10.1007/BF02650179](https://doi.org/10.1007/BF02650179)]
- [2] Deutsch D. Quantum theory, the church-turing principle and the universal quantum computer. *Proc. of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1985, 400(1818): 97-117. [doi: [10.1098/rspa.1985.0070](https://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070)]
- [3] Shor PW. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. In: *Proc. of the 35th Annual Symp. on Foundations of Computer Science*. Santa Fe: IEEE, 1994. 124-134. [doi: [10.1109/SFCS.1994.365700](https://doi.org/10.1109/SFCS.1994.365700)]
- [4] Grover LK. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: *Proc. of the 28th Annual ACM Symp. on the Theory of Computing*. Philadelphia: ACM, 1996. 212-219. [doi: [10.1145/237814.237866](https://doi.org/10.1145/237814.237866)]
- [5] Schumacher B. Quantum coding. *Physical Review A*, 1995, 51(4): 2738-2747. [doi: [10.1103/PhysRevA.51.2738](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.51.2738)]
- [6] Nielsen MA, Chuang IL. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000. 1-352.
- [7] Buhrman H, Cleve R, Watrous J, De Wolf R. Quantum fingerprinting. *Physical Review Letters*, 2001, 87(16): 167902. [doi: [10.1103/PhysRevLett.87.167902](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.167902)]
- [8] Harrow AW, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, 2009, 103(15): 150502. [doi: [10.1103/PhysRevLett.103.150502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.150502)]
- [9] Cerezo M, Verdon G, Huang HY, Cincio L, Coles PJ. Challenges and opportunities in quantum machine learning. *Nature Computational Science*, 2022, 2(9): 567-576. [doi: [10.1038/s43588-022-00311-3](https://doi.org/10.1038/s43588-022-00311-3)]
- [10] Meyer N, Uffrecht C, Periyasamy M, Scherer DD, Plinge A, Mutschler C. A survey on quantum reinforcement learning. *arXiv:2211.03464*, 2022.
- [11] Šćekić M, Šćepanović S, Mitrović S. Implementation of quantum machine learning algorithms: A literature review. In: *Proc. of the 11th Mediterranean Conf. on Embedded Computing (MECO)*. Budva: IEEE, 2022. 1-4. [doi: [10.1109/MECO55406.2022.9797184](https://doi.org/10.1109/MECO55406.2022.9797184)]
- [12] Li WK, Deng DL. Recent advances for quantum classifiers. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2022, 65(2): 220301. [doi: [10.1007/s11433-021-1793-6](https://doi.org/10.1007/s11433-021-1793-6)]
- [13] Kak SC. Quantum neural computing. *Advances in Imaging and Electron Physics*, 1995, 94: 259-313. [doi: [10.1016/S1076-5670\(08\)70147-2](https://doi.org/10.1016/S1076-5670(08)70147-2)]
- [14] Ventura D, Martinez T. Quantum associative memory. *Information Sciences*, 2000, 124(1-4): 273-296. [doi: [10.1016/S0020-0255\(99\)00101-2](https://doi.org/10.1016/S0020-0255(99)00101-2)]
- [15] Matsui N, Takai M, Nishimura H. A network model based on qubitlike neuron corresponding to quantum circuit. *Electronics and Communications in Japan (Part III Fundamental Electronic Science)*, 2000, 83(10): 67-73. [doi: [10.1002/\(SICI\)1520-6440\(200010\)83:10<67::AID-ECJC8>3.0.CO;2-H](https://doi.org/10.1002/(SICI)1520-6440(200010)83:10<67::AID-ECJC8>3.0.CO;2-H)]
- [16] Grant E, Wossnig L, Ostaszewski M, Benedetti M. An initialization strategy for addressing barren plateaus in parametrized quantum circuits. *Quantum*, 2019, 3: 214. [doi: [10.22331/q-2019-12-09-214](https://doi.org/10.22331/q-2019-12-09-214)]
- [17] Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. Quantum support vector machine for big data classification. *Physical Review Letters*, 2014, 113(13): 130503. [doi: [10.1103/PhysRevLett.113.130503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.130503)]
- [18] Bishwas AK, Mani A, Palade V. An all-pair quantum SVM approach for big data multiclass classification. *Quantum Information Processing*, 2018, 17(10): 282. [doi: [10.1007/s11128-018-2046-z](https://doi.org/10.1007/s11128-018-2046-z)]
- [19] Wiebe N, Kapoor A, Svore KM. Quantum algorithms for nearest-neighbor methods for supervised and unsupervised learning. *Quantum Information & Computation*, 2015, 15(3-4): 316-356.
- [20] Chen HW, Gao Y, Zhang J. Quantum K-nearest neighbor algorithm. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2015,

- 45(4): 647–651 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.3969/j.issn.1001-0505.2015.04.006](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-0505.2015.04.006)]
- [21] Dutta S, Suau A, Dutta S, Roy S, Behera BK, Panigrahi PK. Quantum circuit design methodology for multiple linear regression. *IET Quantum Communication*, 2020, 1(2): 55–61. [doi: [10.1049/iet-qtc.2020.0013](https://doi.org/10.1049/iet-qtc.2020.0013)]
- [22] Chen MH, Yu CH, Guo GD, Lin S. Faster quantum ridge regression algorithm for prediction. *Int'l Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 2023, 14(1): 117–124. [doi: [10.1007/s13042-022-01526-6](https://doi.org/10.1007/s13042-022-01526-6)]
- [23] Liu HL, Yu CH, Wu YS, Pan SJ, Qin SJ, Gao F, Wen QY. Quantum algorithm for logistic regression. arXiv:1906.03834, 2019.
- [24] Imeur E, Brassard G, Gambs S. Quantum clustering algorithms. In: Proc. of the 24th Int'l Conf. on Machine Learning. Corvallis: ACM, 2007. 1–8. [doi: [10.1145/1273496.1273497](https://doi.org/10.1145/1273496.1273497)]
- [25] Hou M, Zhang SB, Xia JY. Quantum fuzzy K-means algorithm based on fuzzy theory. In: Proc. of the 8th Int'l Conf. on Artificial Intelligence and Security (ICAIS). Qinghai: Springer, 2022. 348–356. [doi: [10.1007/978-3-031-06794-5_28](https://doi.org/10.1007/978-3-031-06794-5_28)]
- [26] Li QY, Huang YH, Jin S, Hou XK, Wang XT. Quantum spectral clustering algorithm for unsupervised learning. *Science China Information Sciences*, 2022, 65(10): 200504. [doi: [10.1007/s11432-022-3492-x](https://doi.org/10.1007/s11432-022-3492-x)]
- [27] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum principal component analysis. *Nature Physics*, 2014, 10(9): 631–633. [doi: [10.1038/nphys3029](https://doi.org/10.1038/nphys3029)]
- [28] Li ZK, Chai ZH, Guo YH, Ji WT, Wang MQ, Shi FZ, Wang Y, Lloyd S, Du JF. Resonant quantum principal component analysis. *Science Advances*, 2021, 7(34): eabg2589. [doi: [10.1126/sciadv.abg2589](https://doi.org/10.1126/sciadv.abg2589)]
- [29] Duan BJ, Yuan JB, Liu Y, Li D. Efficient quantum circuit for singular-value thresholding. *Physical Review A*, 2018, 98(1): 012308. [doi: [10.1103/PhysRevA.98.012308](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.012308)]
- [30] Saeedi S, Panahi A, Arodz T. Quantum semi-supervised kernel learning. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3(2): 24. [doi: [10.1007/s42484-021-00053-x](https://doi.org/10.1007/s42484-021-00053-x)]
- [31] Park G, Huh J, Park DK. Variational quantum one-class classifier. *Machine Learning: Science and Technology*, 2023, 4(1): 015006. [doi: [10.1088/2632-2153/acaf45](https://doi.org/10.1088/2632-2153/acaf45)]
- [32] Dong DY, Chen CL, Li HX, Tarn TJ. Quantum reinforcement learning. *IEEE Trans. on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics*, 2008, 38(5): 1207–1220. [doi: [10.1109/TSMCB.2008.925743](https://doi.org/10.1109/TSMCB.2008.925743)]
- [33] Briegel HJ, De Las Cuevas G. Projective simulation for artificial intelligence. *Scientific Reports*, 2012, 2(1): 400. [doi: [10.1038/srep00400](https://doi.org/10.1038/srep00400)]
- [34] Dunjko V, Taylor JM, Briegel HJ. Quantum-enhanced machine learning. *Physical Review Letters*, 2016, 117(13): 130501. [doi: [10.1103/PhysRevLett.117.130501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.130501)]
- [35] Wiebe N, Kapoor A, Svore KM. Quantum deep learning. *Quantum Information & Computation*, 2016, 16(7–8): 541–587.
- [36] Lloyd S, Weedbrook C. Quantum generative adversarial learning. *Physical Review Letters*, 2018, 121(4): 040502. [doi: [10.1103/PhysRevLett.121.040502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.040502)]
- [37] Chen SYC, Yang CHH, Qi J, Chen PY, Ma XL, Goan HS. Variational quantum circuits for deep reinforcement learning. *IEEE Access*, 2020, 8: 141007–141024. [doi: [10.1109/ACCESS.2020.3010470](https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.3010470)]
- [38] Brassard G, Høyer P, Mosca M, Tapp A. Quantum amplitude amplification and estimation. *AMS Contemporary Mathematics*. 2002, 305: 53–74. [doi: [10.1090/conm/305/05215](https://doi.org/10.1090/conm/305/05215)]
- [39] Wu BJ, Ray M, Zhao LM, Sun XM, Rebentrost P. Quantum-classical algorithms for skewed linear systems with an optimized Hadamard test. *Physical Review A*, 2021, 103(4): 042422. [doi: [10.1103/PhysRevA.103.042422](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.042422)]
- [40] Benedetti M, Lloyd E, Sack S, Fiorentini M. Parameterized quantum circuits as machine learning models. *Quantum Science and Technology*, 2019, 4(4): 043001. [doi: [10.1088/2058-9565/ab4eb5](https://doi.org/10.1088/2058-9565/ab4eb5)]
- [41] Kocer E, Ko TW, Behler J. Neural network potentials: A concise overview of methods. *Annual Review of Physical Chemistry*, 2022, 73(1): 163–186. [doi: [10.1146/annurev-physchem-082720-034254](https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-082720-034254)]
- [42] Ren YM, Alhajeri MS, Luo JW, Chen S, Abdullah F, Wu Z, Christofides PD. A tutorial review of neural network modeling approaches for model predictive control. *Computers and Chemical Engineering*, 2022, 165: 107956. [doi: [10.1016/j.compchemeng.2022.107956](https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.107956)]
- [43] Zhang SQ, Zhou ZH. Flexible transmitter network. *Neural Computation*, 2021, 33(11): 2951–2970. [doi: [10.1162/neco_a_01431](https://doi.org/10.1162/neco_a_01431)]
- [44] Menneer T, Narayanan A. Quantum-inspired neural networks. Technical Report, Department of Computer Science, University of Exeter, Exeter, 1995. 329. <https://core.ac.uk/display/24310760>
- [45] Li PC, Xiao H, Shang FH, Tong XF, Li X, Cao MJ. A hybrid quantum-inspired neural networks with sequence inputs. *Neurocomputing*, 2013, 117: 81–90. [doi: [10.1016/j.neucom.2013.01.029](https://doi.org/10.1016/j.neucom.2013.01.029)]
- [46] Li ZY, Li PC. Quantum-inspired neural network with sequence input. *Open Journal of Applied Sciences*, 2015, 5(6): 259–269. [doi: [10.4236/ojapps.2015.56027](https://doi.org/10.4236/ojapps.2015.56027)]

- [47] Li PC, Xiao H. Model and algorithm of quantum-inspired neural network with sequence input based on controlled rotation gates. *Applied Intelligence*, 2014, 40(1): 107–126. [doi: [10.1007/s10489-013-0447-3](https://doi.org/10.1007/s10489-013-0447-3)]
- [48] Nguyen T, Paik I, Watanobe Y, Thang TC. An evaluation of hardware-efficient quantum neural networks for image data classification. *Electronics*, 2022, 11(3): 437. [doi: [10.3390/electronics11030437](https://doi.org/10.3390/electronics11030437)]
- [49] Zeng Y, Wang H, He J, Huang QJ, Chang S. A multi-classification hybrid quantum neural network using an all-qubit multi-observable measurement strategy. *Entropy*, 2022, 24(3): 394. [doi: [10.3390/e24030394](https://doi.org/10.3390/e24030394)]
- [50] Huang FY, Tan XQ, Huang R, Xu QS. Variational convolutional neural networks classifiers. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2022, 605: 128067. [doi: [10.1016/j.physa.2022.128067](https://doi.org/10.1016/j.physa.2022.128067)]
- [51] McClean JR, Boixo S, Smelyanskiy VN, Babbush R, Neven H. Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 4812. [doi: [10.1038/s41467-018-07090-4](https://doi.org/10.1038/s41467-018-07090-4)]
- [52] Skolik A, McClean JR, Mohseni M, van der Smagt P, Leib M. Layerwise learning for quantum neural networks. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3(1): 5. [doi: [10.1007/s42484-020-00036-4](https://doi.org/10.1007/s42484-020-00036-4)]
- [53] Wang S, Fontana E, Cerezo M, Sharma K, Sone A, Cincio L, Coles PJ. Noise-induced barren plateaus in variational quantum algorithms. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 6961. [doi: [10.1038/s41467-021-27045-6](https://doi.org/10.1038/s41467-021-27045-6)]
- [54] Toth G, Lent CS, Tougaw PD, Brazhnik Y, Weng WW, Porod W, Liu RW, Huang YF. Quantum cellular neural networks. *Superlattices and Microstructures*, 1996, 20(4): 473–478. [doi: [10.1006/spmi.1996.0104](https://doi.org/10.1006/spmi.1996.0104)]
- [55] Chua LO, Yang L. Cellular neural networks: Applications. *IEEE Trans. on Circuits and Systems*, 1988, 35(10): 1273–1290. [doi: [10.1109/31.7601](https://doi.org/10.1109/31.7601)]
- [56] Crooks GE. Gradients of parameterized quantum gates using the parameter-shift rule and gate decomposition. arXiv:1905.13311, 2019.
- [57] Mitarai K, Negoro M, Kitagawa M, Fujii K. Quantum circuit learning. *Physical Review A*, 2018, 98(3): 032309. [doi: [10.1103/PhysRevA.98.032309](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.032309)]
- [58] Li J, Yang XD, Peng XH, Sun CP. Hybrid quantum-classical approach to quantum optimal control. *Physical Review Letters*, 2017, 118(15): 150503. [doi: [10.1103/PhysRevLett.118.150503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.150503)]
- [59] Sweke R, Wilde F, Meyer J, Schuld M, Faehrmann PK, Meynard-Piganeau B, Eisert J. Stochastic gradient descent for hybrid quantum-classical optimization. *Quantum*, 2020, 4: 314. [doi: [10.22331/q-2020-08-31-314](https://doi.org/10.22331/q-2020-08-31-314)]
- [60] Cortes C, Vapnik V. Support-vector networks. *Machine Learning*, 1995, 20(3): 273–297. [doi: [10.1023/A:1022627411411](https://doi.org/10.1023/A:1022627411411)]
- [61] Yao HM. Research on parallel support vector machine based on spark big data platform. *Scientific Programming*, 2021, 2021: 7998417. [doi: [10.1155/2021/7998417](https://doi.org/10.1155/2021/7998417)]
- [62] Anguita D, Ridella S, Rivieccio F, Zunino R. Quantum optimization for training support vector machines. *Neural Networks*, 2003, 16(5–6): 763–770. [doi: [10.1016/S0893-6080\(03\)00087-X](https://doi.org/10.1016/S0893-6080(03)00087-X)]
- [63] Li ZK, Liu XM, Xu NY, Du JF. Experimental realization of a quantum support vector machine. *Physical Review Letters*, 2015, 114(14): 140504. [doi: [10.1103/PhysRevLett.114.140504](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.140504)]
- [64] Xu L, Zhang XY, Liang JM, Wang J, Li M, Jian L, Shen SQ. Variational quantum support vector machine based on Hadamard test. *Communications in Theoretical Physics*, 2022, 74(5): 055106. [doi: [10.1088/1572-9494/ac6358](https://doi.org/10.1088/1572-9494/ac6358)]
- [65] Chatterjee R, Yu T. Generalized coherent states, reproducing kernels, and quantum support vector machines. *Quantum Information & Computation*, 2017, 17(15–16): 1292–1306.
- [66] Havlíček V, Córcoles AD, Temme K, Harrow AW, Kandala A, Chow JM, Gambetta JM. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature*, 2019, 567(7747): 209–212. [doi: [10.1038/s41586-019-0980-2](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0980-2)]
- [67] Li YC, Zhou RG, Xu RQ, Luo J, Jiang SX. A quantum mechanics-based framework for EEG signal feature extraction and classification. *IEEE Trans. on Emerging Topics in Computing*, 2022, 10(1): 211–222. [doi: [10.1109/TETC.2020.3000734](https://doi.org/10.1109/TETC.2020.3000734)]
- [68] Zhang R, Wang J, Jiang N, Li H, Wang ZC. Quantum support vector machine based on regularized Newton method. *Neural Networks*, 2022, 151: 376–384. [doi: [10.1016/j.neunet.2022.03.043](https://doi.org/10.1016/j.neunet.2022.03.043)]
- [69] Li H, Jiang N, Zhang R, Wang ZC, Wang HL. Quantum support vector machine based on gradient descent. *Int'l Journal of Theoretical Physics*, 2022, 61(3): 92. [doi: [10.1007/s10773-022-05040-x](https://doi.org/10.1007/s10773-022-05040-x)]
- [70] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning. arXiv:1307.0411, 2013.
- [71] Dürr C, Hoyer P. A quantum algorithm for finding the minimum. arXiv:quant-ph/9607014v2, 1999.
- [72] Ruan Y, Xue XL, Liu H, Tan JN, Li X. Quantum algorithm for K-nearest neighbors classification based on the metric of hamming distance. *Int'l Journal of Theoretical Physics*, 2017, 56(11): 3496–3507. [doi: [10.1007/s10773-017-3514-4](https://doi.org/10.1007/s10773-017-3514-4)]
- [73] Ma YZ, Song HF, Zhang J. Quantum algorithm for K-nearest neighbors classification based on the categorical tensor network states. *Int'l Journal of Theoretical Physics*, 2021, 60(3): 1164–1174. [doi: [10.1007/s10773-021-04742-y](https://doi.org/10.1007/s10773-021-04742-y)]

- [74] Wiebe N, Braun D, Lloyd S. Quantum algorithm for data fitting. *Physical Review Letters*, 2012, 109(5): 050505. [doi: [10.1103/PhysRevLett.109.050505](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.050505)]
- [75] Wang GM. Quantum algorithm for linear regression. *Physical Review A*, 2017, 96(1): 012335. [doi: [10.1103/PhysRevA.96.012335](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.012335)]
- [76] Childs AM, Kothari R, Somma RD. Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision. *SIAM Journal on Computing*, 2017, 46(6): 1920–1950. [doi: [10.1137/16M1087072](https://doi.org/10.1137/16M1087072)]
- [77] Yu CH, Gao F, Wen QY. An improved quantum algorithm for ridge regression. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 33(3): 858–866. [doi: [10.1109/TKDE.2019.2937491](https://doi.org/10.1109/TKDE.2019.2937491)]
- [78] Ning T, Yang YL, Du ZY. Quantum kernel logistic regression based Newton method. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2023, 611: 128454. [doi: [10.1016/j.physa.2023.128454](https://doi.org/10.1016/j.physa.2023.128454)]
- [79] Kerenidis I, Landman J, Luongo A, Prakash A. q-means: A quantum algorithm for unsupervised machine learning. In: Proc. of the 33rd Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 4134–4144.
- [80] Wu ZH, Song TT, Zhang YB. Quantum K-means algorithm based on Manhattan distance. *Quantum Information Processing*, 2022, 21(1): 19. [doi: [10.1007/s11128-021-03384-7](https://doi.org/10.1007/s11128-021-03384-7)]
- [81] Patil S, Banerjee S, Panigrahi PK. Measurement-based quantum clustering algorithms. arXiv:2302.00566, 2023.
- [82] Daskin A. Quantum spectral clustering through a biased phase estimation algorithm. arXiv:1703.05568, 2017.
- [83] Volya D, Mishra P. Quantum spectral clustering of mixed graphs. In: Proc. of the 58th ACM/IEEE Design Automation Conf. (DAC). San Francisco: IEEE, 2021. 463–468. [doi: [10.1109/DAC18074.2021.9586308](https://doi.org/10.1109/DAC18074.2021.9586308)]
- [84] Bishwas AK, Mani A, Palade V. An investigation on support vector clustering for big data in quantum paradigm. *Quantum Information Processing*, 2020, 19(4): 108. [doi: [10.1007/s11128-020-2606-x](https://doi.org/10.1007/s11128-020-2606-x)]
- [85] Casaña-Eslava RV, Lisboa PJG, Ortega-Martorell S, Jarman IH, Martín-Guerrero JD. Probabilistic quantum clustering. *Knowledge-based Systems*, 2020, 194: 105567. [doi: [10.1016/j.knosys.2020.105567](https://doi.org/10.1016/j.knosys.2020.105567)]
- [86] Ruan Y, Chen HW, Liu ZH, Zhang J, Zhu WN. Quantum principal component analysis algorithm. *Chinese Journal of Computers*, 2014, 37(3): 666–676 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.3724/SP.J.1016.2014.00666](https://doi.org/10.3724/SP.J.1016.2014.00666)]
- [87] Soni B, Khare N. Quantum principal component analysis based on the dynamic selection of eigenstates. *Europhysics Letters*, 2022, 139(4): 48002. [doi: [10.1209/0295-5075/ac5647](https://doi.org/10.1209/0295-5075/ac5647)]
- [88] Xin T, Che LY, Xi C, Singh A, Nie XF, Li J, Dong Y, Lu DW. Experimental quantum principal component analysis via parametrized quantum circuits. *Physical Review Letters*, 2021, 126(11): 110502. [doi: [10.1103/PhysRevLett.126.110502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.110502)]
- [89] Ge YY, Wang ZM, Zheng W, Zhang Y, Yu XM, Kang RJ, Xin W, Lan D, Zhao J, Tan XS, Li SX, Yu Y. Optimized quantum singular value thresholding algorithm based on a hybrid quantum computer. *Chinese Physics B*, 2022, 31(4): 048704. [doi: [10.1088/1674-1056/ac40fb](https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac40fb)]
- [90] Lin J, Bao WS, Zhang S, Li T, Wang X. An improved quantum principal component analysis algorithm based on the quantum singular threshold method. *Physics Letters A*, 2019, 383(24): 2862–2868. [doi: [10.1016/j.physleta.2019.06.026](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.06.026)]
- [91] Duan BJ. Research on big data classification and dimension reduction algorithms based on quantum machine learning [Ph.D. Thesis]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2020 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.27239/d.cnki.gnhhu.2020.002626](https://doi.org/10.27239/d.cnki.gnhhu.2020.002626)]
- [92] He C, Li JZ, Liu WQ, Peng JY, Wang ZJ. A low-complexity quantum principal component analysis algorithm. *IEEE Trans. on Quantum Engineering*, 2022, 3: 100713. [doi: [10.1109/TQE.2021.3140152](https://doi.org/10.1109/TQE.2021.3140152)]
- [93] Melacci S, Belkin M. Laplacian support vector machines trained in the primal. *The Journal of Machine Learning Research*, 2011, 12: 1149–1184.
- [94] Ma JS, Perkins S. Time-series novelty detection using one-class support vector machines. In: Proc. of the 2003 Int'l Joint Conf. on Neural Networks. Portland: IEEE, 2003. 1741–1745. [doi: [10.1109/IJCNN.2003.1223670](https://doi.org/10.1109/IJCNN.2003.1223670)]
- [95] Liu NN, Rebentrost P. Quantum machine learning for quantum anomaly detection. *Physical Review A*, 2018, 97(4): 042315. [doi: [10.1103/PhysRevA.97.042315](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.042315)]
- [96] Zhou SN. Quantum semi-supervised learning with quantum supremacy. arXiv:2110.02343, 2022.
- [97] Schmidt LM, Brosig J, Plinge A, Eskofier BM, Mutschler C. An introduction to multi-agent reinforcement learning and review of its application to autonomous mobility. In: Proc. of the 25th IEEE Int'l Conf. on Intelligent Transportation Systems (ITSC). Macao: IEEE, 2022. 1342–1349. [doi: [10.1109/ITSC55140.2022.9922205](https://doi.org/10.1109/ITSC55140.2022.9922205)]
- [98] Li JA, Dong DY, Wei ZD, Liu Y, Pan Y, Nori F, Zhang XC. Quantum reinforcement learning during human decision-making. *Nature Human Behaviour*, 2020, 4(3): 294–307. [doi: [10.1038/s41562-019-0804-2](https://doi.org/10.1038/s41562-019-0804-2)]
- [99] Fakhari P, Rajagopal K, Balakrishnan SN, Busemeyer JR. Quantum inspired reinforcement learning in changing environment. *New*

- Mathematics and Natural Computation, 2013, 9(3): 273–294. [doi: [10.1142/S1793005713400073](https://doi.org/10.1142/S1793005713400073)]
- [100] Li YJ, Aghvami AH, Dong DY. Intelligent trajectory planning in UAV-mounted wireless networks: A quantum-inspired reinforcement learning perspective. *IEEE Wireless Communications Letters*, 2021, 10(9): 1994–1998. [doi: [10.1109/LWC.2021.3089876](https://doi.org/10.1109/LWC.2021.3089876)]
- [101] Paparo GD, Dunjko V, Makmal A, Martin-Delgado MA, Briegel HJ. Quantum speedup for active learning agents. *Physical Review X*, 2014, 4(3): 031002. [doi: [10.1103/PhysRevX.4.031002](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.4.031002)]
- [102] Sriarunothai T, Wölk S, Giri GS, Friis N, Dunjko V, Briegel HJ, Wunderlich C. Speeding-up the decision making of a learning agent using an ion trap quantum processor. *Quantum Science and Technology*, 2019, 4(1): 015014. [doi: [10.1088/2058-9565/aaef5e](https://doi.org/10.1088/2058-9565/aaef5e)]
- [103] Dunjko V, Taylor JM, Briegel HJ. Framework for learning agents in quantum environments. arXiv:1507.08482, 2015.
- [104] Dunjko V, Taylor JM, Briegel HJ. Advances in quantum reinforcement learning. In: Proc. of the 2017 IEEE Int'l Conf. on Systems, Man, and Cybernetics (SMC). Banff: IEEE, 2017. 282–287. [doi: [10.1109/SMC.2017.8122616](https://doi.org/10.1109/SMC.2017.8122616)]
- [105] Wan ZQ, Zhang ZJ, Li TY, Zhang JL, Sun XM. Quantum multi-armed bandits and stochastic linear bandits enjoy logarithmic regrets. *Proc. of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2023, 37(8): 10087–10094. [doi: [10.1609/aaai.v37i8.26202](https://doi.org/10.1609/aaai.v37i8.26202)]
- [106] Saggio V, Asenbeck BE, Hamann A, Strömberg T, Schiainsky P, Dunjko V, Friis N, Harris NC, Hochberg M, Englund D, Wölk S, Briegel HJ, Walther P. Experimental quantum speed-up in reinforcement learning agents. *Nature*, 2021, 591(7849): 229–233. [doi: [10.1038/s41586-021-03242-7](https://doi.org/10.1038/s41586-021-03242-7)]
- [107] Shafay M, Ahmad RW, Salah K, Yaqoob I, Jayaraman R, Omar M. Blockchain for deep learning: Review and open challenges. *Cluster Computing*, 2023, 26(1): 197–221. [doi: [10.1007/S10586-022-03582-7](https://doi.org/10.1007/S10586-022-03582-7)]
- [108] Chakraborty C, Bhattacharya M, Dhama K, Roy SS, Sharma AR, Mohapatra RK, Lee SS. Deep learning research should be encouraged more and more in different domains of surgery: An open call—Correspondence. *Int'l Journal of Surgery*, 2022, 104: 106749. [doi: [10.1016/j.ijssu.2022.106749](https://doi.org/10.1016/j.ijssu.2022.106749)]
- [109] Hinton GE, Salakhutdinov RR. Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science*, 2006, 313(5786): 504–507. [doi: [10.1126/science.1127647](https://doi.org/10.1126/science.1127647)]
- [110] Amin MH, Andriyash E, Rolfe J, Kulchytskyy B, Melko R. Quantum Boltzmann machine. *Physical Review X*, 2018, 8(2): 021050. [doi: [10.1103/PhysRevX.8.021050](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.021050)]
- [111] Shingu Y, Seki Y, Watabe S, Endo S, Matsuzaki Y, Kawabata S, Nikuni T, Hakoshima H. Boltzmann machine learning with a variational quantum algorithm. *Physical Review A*, 2021, 104(3): 032413. [doi: [10.1103/PhysRevA.104.032413](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.032413)]
- [112] Coopmans L, Kikuchi Y, Benedetti M. Predicting gibbs-state expectation values with pure thermal shadows. *PRX Quantum*, 2023, 4(1): 010305. [doi: [10.1103/PRXQuantum.4.010305](https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.4.010305)]
- [113] Iwaki A, Shimizu A, Hotta C. Thermal pure quantum matrix product states recovering a volume law entanglement. *Physical Review Research*, 2021, 3(2): L022015. [doi: [10.1103/PhysRevResearch.3.L022015](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.L022015)]
- [114] Ohliger M, Nesme V, Eisert J. Efficient and feasible state tomography of quantum many-body systems. *New Journal of Physics*, 2013, 15(1): 015024. [doi: [10.1088/1367-2630/15/1/015024](https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/1/015024)]
- [115] Goodfellow I, Pouget-Abadie J, Mirza M, Xu B, Warde-Farley D, Ozair S, Courville A, Bengio Y. Generative adversarial nets. In: Proc. of the 27th Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Cambridge: MIT Press. 2014. 2672–2680.
- [116] Dallaire-Demers PL, Killoran N. Quantum generative adversarial networks. *Physical Review A*, 2018, 98(1): 012324. [doi: [10.1103/PhysRevA.98.012324](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.012324)]
- [117] Hu L, Wu SH, Cai WZ, Ma YW, Mu XH, Xu Y, Wang HY, Song YP, Deng DL, Zou CL, Sun LY. Quantum generative adversarial learning in a superconducting quantum circuit. *Science Advances*, 2019, 5(1): eaav2761. [doi: [10.1126/sciadv.aav2761](https://doi.org/10.1126/sciadv.aav2761)]
- [118] Niu MY, Zlokapa A, Broughton M, Boixo S, Mohseni M, Smelyanskiy V, Neven H. Entangling quantum generative adversarial networks. *Physical Review Letters*, 2022, 128(22): 220505. [doi: [10.1103/PhysRevLett.128.220505](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.220505)]
- [119] Liu L, Song TT, Sun ZW, Lei JC. Quantum generative adversarial networks based on Rényi divergences. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2022, 607: 128169. [doi: [10.1016/j.physa.2022.128169](https://doi.org/10.1016/j.physa.2022.128169)]
- [120] Chakrabarti S, Huang YM, Li TY, Feizi S, Wu XD. Quantum Wasserstein GANs. In: Proc. of the 33rd Int'l Conf. on Neural Information Processing Systems. Vancouver: Curran Associates Inc., 2019. 6781–6792.
- [121] Kiani BT, De Palma G, Marvian M, Liu ZW, Lloyd S. Learning quantum data with the quantum earth mover's distance. *Quantum Science and Technology*, 2022, 7(4): 045002. [doi: [10.1088/2058-9565/ac79e9](https://doi.org/10.1088/2058-9565/ac79e9)]
- [122] Zoufal C, Lucchi A, Woerner S. Quantum generative adversarial networks for learning and loading random distributions. *npj Quantum Information*, 2019, 5(1): 103. [doi: [10.1038/s41534-019-0223-2](https://doi.org/10.1038/s41534-019-0223-2)]
- [123] Zhou NR, Zhang TF, Xie XW, Wu JY. Hybrid quantum-classical generative adversarial networks for image generation via learning discrete distribution. *Signal Processing: Image Communication*, 2023, 110: 116891. [doi: [10.1016/j.image.2022.116891](https://doi.org/10.1016/j.image.2022.116891)]

- [124] Mnih V, Kavukcuoglu K, Silver D, *et al.* Human-level control through deep reinforcement learning. *Nature*, 2015, 518(7540): 529–533. [doi: [10.1038/nature14236](https://doi.org/10.1038/nature14236)]
- [125] Wierichs D, Izaac J, Wang C, Lin CYY. General parameter-shift rules for quantum gradients. *Quantum*, 2022, 6: 677. [doi: [10.22331/q-2022-03-30-677](https://doi.org/10.22331/q-2022-03-30-677)]
- [126] Wu SJ, Jin S, Wen DD, Han DH, Wang XT. Quantum reinforcement learning in continuous action space. arXiv:2012.10711v3, 2023.
- [127] Cong I, Choi S, Lukin MD. Quantum convolutional neural networks. *Nature Physics*, 2019, 15(12): 1273–1278. [doi: [10.1038/s41567-019-0648-8](https://doi.org/10.1038/s41567-019-0648-8)]
- [128] Li YC, Zhou RG, Xu RQ, Luo J, Hu WW. A quantum deep convolutional neural network for image recognition. *Quantum Science and Technology*, 2020, 5(4): 044003. [doi: [10.1088/2058-9565/ab9f93](https://doi.org/10.1088/2058-9565/ab9f93)]
- [129] Hur T, Kim L, Park DK. Quantum convolutional neural network for classical data classification. *Quantum Machine Intelligence*, 2022, 4(1): 3. [doi: [10.1007/s42484-021-00061-x](https://doi.org/10.1007/s42484-021-00061-x)]
- [130] Romero J, Olson JP, Aspuru-Guzik A. Quantum autoencoders for efficient compression of quantum data. *Quantum Science and Technology*, 2017, 2(4): 045001. [doi: [10.1088/2058-9565/aa8072](https://doi.org/10.1088/2058-9565/aa8072)]
- [131] Zhang H, Wan LX, Haug T, *et al.* Resource-efficient high-dimensional subspace teleportation with a quantum autoencoder. *Science Advances*, 2022, 8(40): eabn9783. [doi: [10.1126/sciadv.abn9783](https://doi.org/10.1126/sciadv.abn9783)]
- [132] Qu ZG, Liu XZ, Zheng M. Temporal-spatial quantum graph convolutional neural network based on schrödinger approach for traffic congestion prediction. *IEEE Trans. on Intelligent Transportation Systems*, 2023, 24(8): 8677–8686. [doi: [10.1109/TITS.2022.3203791](https://doi.org/10.1109/TITS.2022.3203791)]
- [133] Choi J, Oh S, Kim J. A tutorial on quantum graph recurrent neural network (QGRNN). In: Proc. of the 2021 Int'l Conf. on Information Networking (ICOIN). Jeju Island: IEEE, 2021. 46–49. [doi: [10.1109/ICOIN50884.2021.9333917](https://doi.org/10.1109/ICOIN50884.2021.9333917)]
- [134] Wang YX, Wang RJ, Li DF, Adu-Gyamfi D, Tian KB, Zhu YX. Improved handwritten digit recognition using quantum K-nearest neighbor algorithm. *Int'l Journal of Theoretical Physics*, 2019, 58(7): 2331–2340. [doi: [10.1007/s10773-019-04124-5](https://doi.org/10.1007/s10773-019-04124-5)]
- [135] Zhang R, Wang J, Jiang N, Wang ZC. Quantum support vector machine without iteration. *Information Sciences*, 2023, 635: 25–41. [doi: [10.1016/j.ins.2023.03.106](https://doi.org/10.1016/j.ins.2023.03.106)]
- [136] Dang YJ, Jiang N, Hu H, Ji ZX, Zhang WY. Image classification based on quantum K-nearest-neighbor algorithm. *Quantum Information Processing*, 2018, 17(9): 239. [doi: [10.1007/s11128-018-2004-9](https://doi.org/10.1007/s11128-018-2004-9)]
- [137] Dwivedi K, Nigam A. Quantum deep learning for phoniatics biomarker based disease detection—Deep learning model for disease detection by phoniatics biomarkers using quantum computation. In: Proc. of the 2nd Int'l Conf. on Data, Engineering and Applications. Bhopal: IEEE, 2020. 1–8. [doi: [10.1109/IDEA49133.2020.9170711](https://doi.org/10.1109/IDEA49133.2020.9170711)]
- [138] Dong YM, Fu YY, Liu HR, Che XX, Sun LN, Luo Y. An improved hybrid quantum-classical convolutional neural network for multi-class brain tumor MRI classification. *Journal of Applied Physics*, 2023, 133(6): 064401. [doi: [10.1063/5.0138021](https://doi.org/10.1063/5.0138021)]
- [139] Zoufal C, Lucchi A, Woerner S. Variational quantum Boltzmann machines. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3(1): 7. [doi: [10.1007/s42484-020-00033-7](https://doi.org/10.1007/s42484-020-00033-7)]
- [140] Stamatopoulos N, Egger DJ, Sun Y, Zoufal C, Iten R, Shen N, Woerner S. Option pricing using quantum computers. arXiv:1905.02666, 2020.
- [141] Li S, Zhang PL, Li B, Li S. Applications of quantum BP neural network in engine fault diagnosis. *China Mechanical Engineering*, 2014, 25(16): 2159–2163 (in Chinese with English abstract). [doi: [10.3969/j.issn.1004-132X.2014.16.005](https://doi.org/10.3969/j.issn.1004-132X.2014.16.005)]
- [142] Batra K, Zorn KM, Foil DH, Minerali E, Gawriljuk VO, Lane TR, Ekins S. Quantum machine learning algorithms for drug discovery applications. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2021, 61(6): 2641–2647. [doi: [10.1021/acs.jcim.1c00166](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00166)]
- [143] Santagati R, Aspuru-Guzik A, Babbush R, *et al.* Drug design on quantum computers. arXiv:2301.04114v1, 2023.
- [144] Cleveland clinic and IBM unveil first quantum computer dedicated to healthcare research. 2023. <https://www.prnewswire.com/news-releases/cleveland-clinic-and-ibm-unveil-first-quantum-computer-dedicated-to-healthcare-research-301776754.html>
- [145] Nicesio OK, Leal AG, Gava VL. Quantum machine learning for network intrusion detection systems, a systematic literature review. In: Proc. of the 2nd IEEE Int'l Conf. on AI in Cybersecurity (ICAIC). Houston: IEEE, 2023. 1–6. [doi: [10.1109/ICAIC57335.2023.10044125](https://doi.org/10.1109/ICAIC57335.2023.10044125)]
- [146] Li F, Xu GB. Quantum BP neural network for speech enhancement. In: Proc. of the 2009 Asia-Pacific Conf. on Computational Intelligence and Industrial Applications (PACIIA). Wuhan: IEEE, 2009. 389–392. [doi: [10.1109/PACIIA.2009.5406577](https://doi.org/10.1109/PACIIA.2009.5406577)]

附中文参考文献:

- [20] 陈汉武, 高越, 张军. 量子 K-近邻算法. *东南大学学报 (自然科学版)*, 2015, 45(4): 647–651. [doi: [10.3969/j.issn.1001-0505.2015](https://doi.org/10.3969/j.issn.1001-0505.2015)].

04.006]

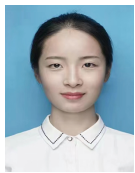
- [86] 阮越, 陈汉武, 刘志昊, 张俊, 朱皖宁. 量子主成分分析算法. 计算机学报, 2014, 37(3): 666–676. [doi: [10.3724/SP.J.1016.2014.00666](https://doi.org/10.3724/SP.J.1016.2014.00666)]
- [91] 段博佳. 基于量子机器学习的大数据分类与降维算法研究 [博士学位论文]. 南京: 南京航空航天大学, 2020. [doi: [10.27239/d.cnki.gnhhu.2020.002626](https://doi.org/10.27239/d.cnki.gnhhu.2020.002626)]
- [141] 李胜, 张培林, 李兵, 李琛. 量子 BP 神经网络在发动机故障诊断中的应用. 中国机械工程, 2014, 25(16): 2159–2163. [doi: [10.3969/j.issn.1004-132X.2014.16.005](https://doi.org/10.3969/j.issn.1004-132X.2014.16.005)]



王健(1975—), 男, 博士, 副教授, 博士生导师, 主要研究领域为量子机器学习, 数据安全, 隐私计算, 密码应用, 区块链.



姜楠(1977—), 女, 博士, 教授, 博士生导师, CCF 专业会员, 主要研究领域为量子机器学习, 计算智能, 内容安全.



张蕊(1994—), 女, 博士生, 主要研究领域为量子机器学习, 量子信号处理.