北京郵電大學

第3讲-2 部分量子机器学习算法

高 飞

网络空间安全学院

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

最近邻相关算法

- （二分类）问题：已知N维的训练数据点$v_i(i=1,\cdots,M)$分为$\{A\}$和$\{B\}$两类，给定测试数据点u，判定其所属类别
- 最近邻算法：计算u与所有v_i的距离，以最近者的类别作为判定结果

对于适当的距离度量，若 $\min_{v_i\in\{A\}}|u-v_i|\leq\min_{v_j\in\{B\}}|u-v_j|$，则将$u$归为类别$\{A\}$，反之则将其归为类别$\{B\}$

- 最近质心算法：计算$\{A\}$和$\{B\}$里数据点的均值作为其质心

如果u与$\{A\}$的质心$\mathrm{mean}(\{A\})$更近，即 $|u-\mathrm{mean}(\{A\})|\leq|u-\mathrm{mean}(\{B\})|$，则将$u$归为类别$\{A\}$，反之则将其归为类别$\{B\}$

- 优势：对于稀疏[非零元的个数为$O(\mathrm{polylog}N)$]且元素不太大的数据点
  - 与直接计算的经典算法相比：量子算法[1]关于维度参数N具有指数级加速效果，对于训练数据的个数M有接近平方级加速效果
  - 与基于采样的经典算法相比：量子算法[1]关于训练数据的个数M以及精度参数ϵ都有接近平方级加速效果

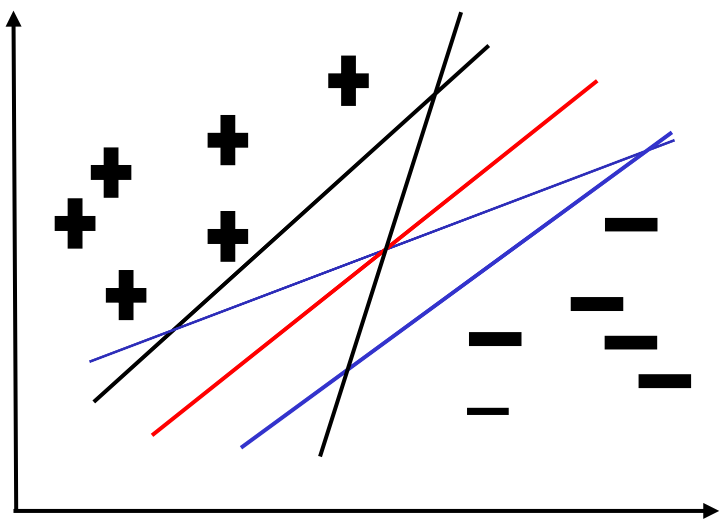
[1] Wiebe N , Kapoor A , Svore K . Quantum Algorithms for Nearest-Neighbor Methods for Supervised and Unsupervised Learning. Quantum Information & Computation, 2014, 15(3):318-358.

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

支持向量机

- **问题：** 给定已分类好的训练样本$D = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), \cdots, (\boldsymbol{x}_m, y_m)\}, \boldsymbol{x}_i \in R^n$, $y_i \in \{-1, +1\}$表示负类和正类, 基于训练集在样本空间中找到一个划分超平面，将不同类别的样本分开

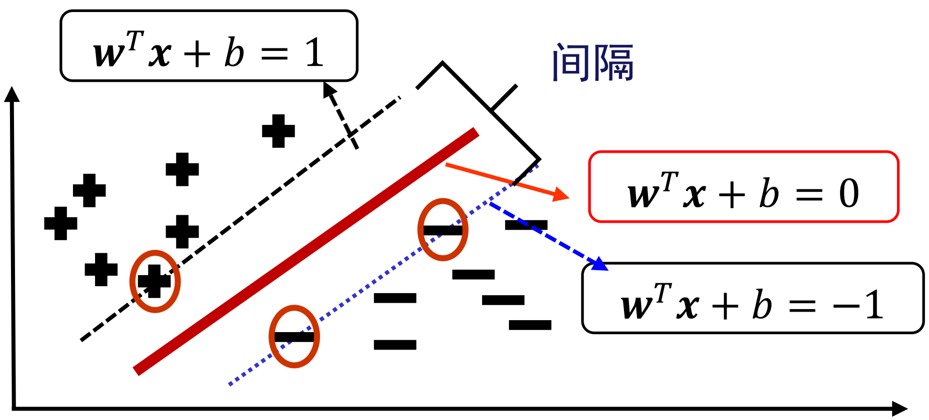


超平面方程： $\boldsymbol{w}^T * \boldsymbol{x} + b = 0$

点$\boldsymbol{x}$到超平面的距离： $r = \frac{|\boldsymbol{w}^T * \boldsymbol{x} + b|}{\|\boldsymbol{w}\|}$

支持向量机

- 超平面取法：两类数据点中，与超平面距离的最小值相同（取中间）
  - 支持向量：与超平面距离最小的点
  - 间隔：两个不同类的支持向量到超平面的距离之和 $r=\frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}$



假设超平面$(\boldsymbol{w},b)$能将训练样本正确分类，即对训练样本点$(\boldsymbol{x}_i,y_i)$，若$y_i=1$，则$\boldsymbol{w}^T*\boldsymbol{x}_i+b\geq+c$; 若$y_i=-1$，则$\boldsymbol{w}^T*\boldsymbol{x}_i+b\leq-c$（一般取$c=1$）；

使等号成立的训练样本点为“支持向量”

- 目标：找“最大间隔”的超平面（鲁棒性高，可调整$\boldsymbol{w},b$来求解）

$$\max_{\boldsymbol{w},b}\frac{2}{\|\boldsymbol{w}\|}\quad \text{s.t.}\quad y_i(\boldsymbol{w}^T*\boldsymbol{x}_i+b)\geq 1, i=1,2,\cdots,m$$

- 新数据分类：若$\text{sgn}(\boldsymbol{w}^T*\boldsymbol{x}_0+b)>0$为正类；反之为负类

- **优势：**2014年Rebentrost P等人[2]针对一类特殊的支持向量机——最小二乘支持向量机设计了量子算法，当数据矩阵的条件数κ与其维数N满足$\kappa = O(\text{polylog}N)$时，该算法相比经典算法关于$N$和$M$（训练数据的个数）均具有指数加速效果

[2] Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. Quantum support vector machine for big data classification. Physical Review Letters, 2014, 113(13): 130503.

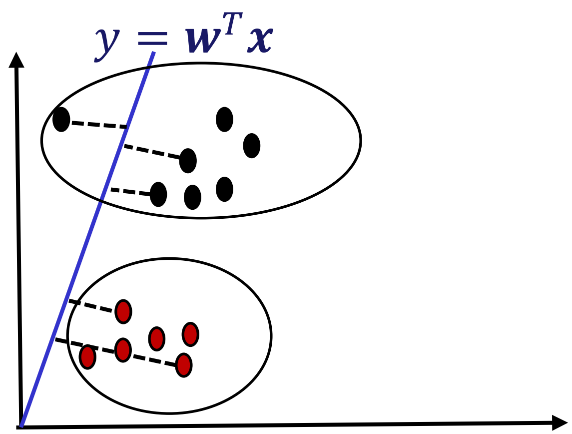
提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

线性判别分析

- 方法：将数据点投影到直线上，按投影点的位置来分类
  - 训练：将训练样本点投影到一条直线上，使得同类样本的投影点尽可能接近、异类样本的投影点尽可能远离
  - 分类：将新样本点投影到同一条直线上，再根据投影点的位置来判定类别

二维情形的例子



- 优势：2016年Cong等人[3]设计了量子算法，在某些合理假设下相比于经典算法关于数据维数N和训练数据的个数M均具有指数加速效果

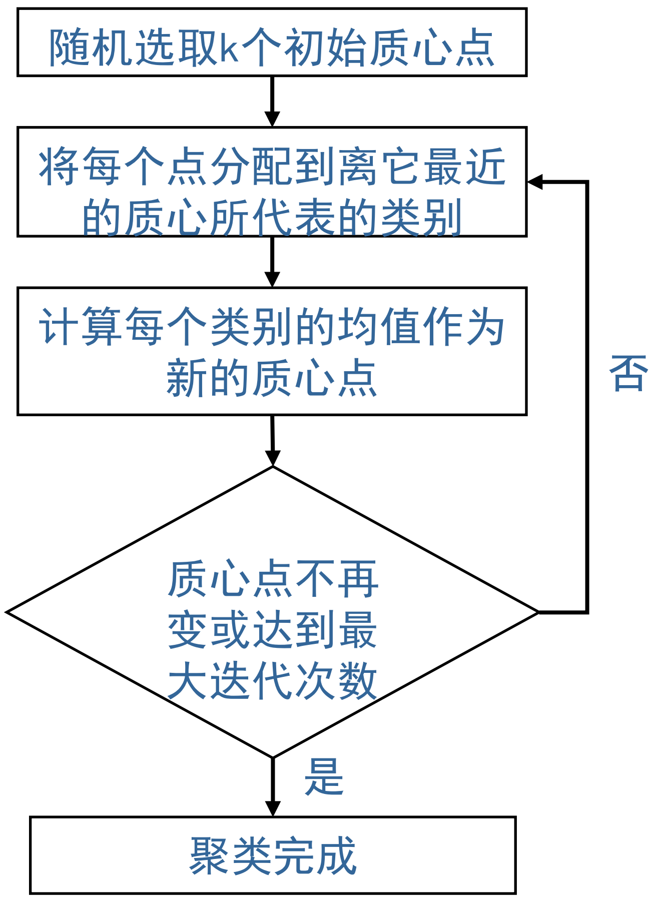
[3]Cong I, Duan L. New Journal of Physics, 2016, 18(7): 073011

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

K-means算法

- **聚类问题：**将一堆没有标签的数据点按照某个距离度量划分成几类
- *k*-means 算法（分为*k*类）



- 优势：对于稀疏且元素不太大的数据点，每次迭代，量子算法[1]关于维度参数*N*具有指数级加速效果，关于类别个数*k*有接近平方级的加速效果

[1] Wiebe N , Kapoor A , Svore K . Quantum Algorithms for Nearest-Neighbor Methods for Supervised and Unsupervised Learning. Quantum Information & Computation, 2014, 15(3):318-358.

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

推荐系统

- 目的：利用用户的购买记录（或调查问卷）为用户提供商品推荐
- 基于矩阵重构算法的推荐系统
  - 偏好矩阵

每个元素表示偏好程度，为了简单，1表示喜欢，0表示不喜欢

	商品1	商品2	商品3	商品4
用户1	1	0	0	1
用户2	1	1	0	1
用户3	1	1	0	0
用户4	0	0	1	1
用户5	0	1	0	1

通常假设偏好矩阵近似于低秩矩阵（用户可以根据偏好分为少数几类）

推荐系统

- **目的**：利用用户的购买记录（或调查问卷）为用户**提供商品推荐**
- 基于矩阵重构算法的推荐系统
  - 偏好矩阵
  - 采样：偏好矩阵T一般可看作是一个隐藏（hidden）矩阵，可通过采样（如调查问卷或者购买记录）得到部分信息，即采样矩阵$\hat{T}$
  - 重构：根据**采样矩阵$\hat{T}$**，利用低秩要求，重构接近T的低秩矩阵$\hat{T}_{(k)}$，k是秩
  - 推荐：根据从$\hat{T}_{(k)}$采样的数据为用户提供商品推荐
- **优势**
  - 经典算法复杂度：$\mathrm{poly}(MN)$，其中M, N为偏好矩阵的维度
  - 量子算法[4]：关于矩阵规模MN有**指数加速**
  - 量子启发式经典算法[5]：相对之前的经典算法关于矩阵规模有**指数加速**（但量子算法相比启发算法有多项式加速）

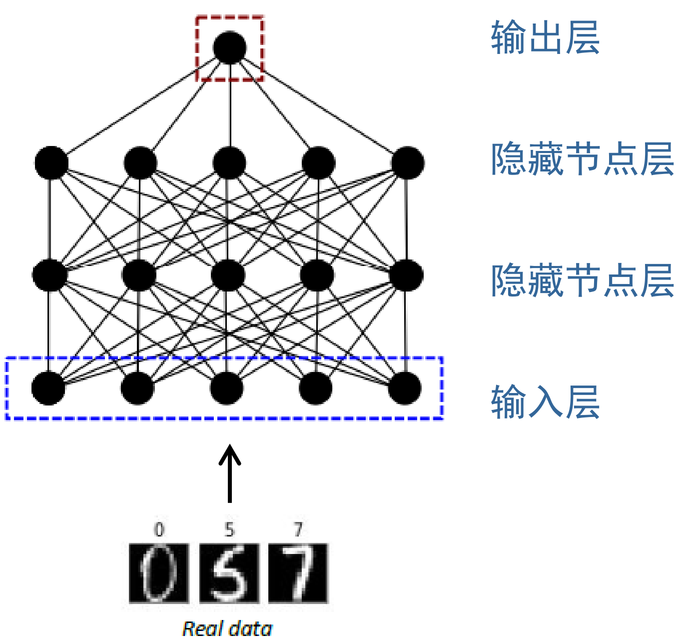
[4] I. Kerenidis, A. Prakash. Quantum Recommendation Systems. *ITCS 2017*, volume 67, pages 49.
[5] Tang E . A quantum-inspired classical algorithm for recommendation systems, STOC 2019.

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

神经网络

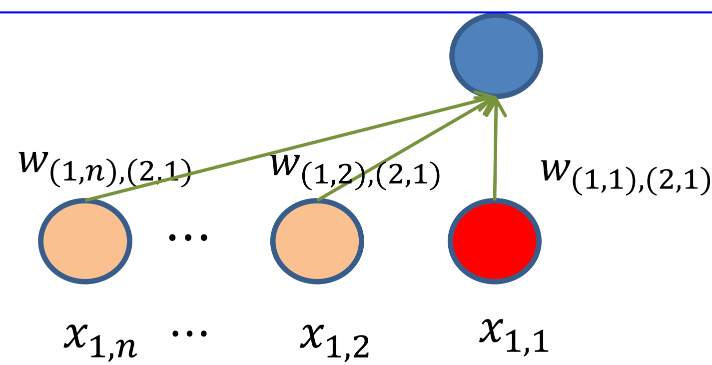
- 人工神经网络（ANN）：由相互连接的节点（神经元）构成
  - 每条线代表输入/输出（下层输入到上层，底层以训练数据为输入）
  - 每条连线的输入有一个权重w（人工神经网络的记忆），是要训练的参数
  - 节点的输出是（加权后）输入的一种特定函数，称为激励（activation）函数
  - 训练：利用数值优化方法（如梯度下降法、牛顿法等），通过不断调整w，最小化代价函数$L(w, D)$，即输出与标签的距离，其中D为训练数据集



红点：输入为$x_{1,1}$，输出为$f_{1,1}(x_{1,1})$

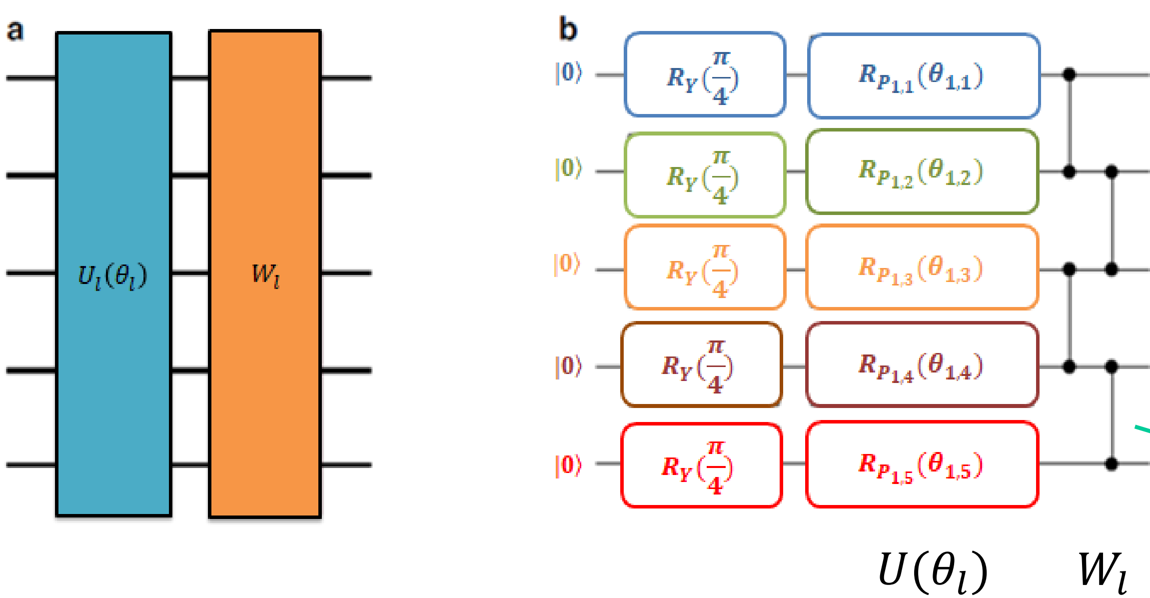
蓝点：输入为$x_{2,1}$，输出为$f_{2,1}(x_{2,1})$

$$x_{2,1} = w_{(1,1),(2,1)} f_{1,1}(x_{1,1}) + \ldots + w_{(1,n),(2,1)} f_{1,n}(x_{1,n})$$

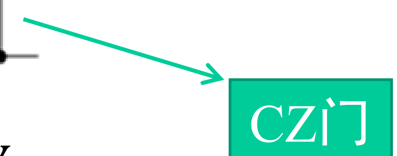


量子神经网络

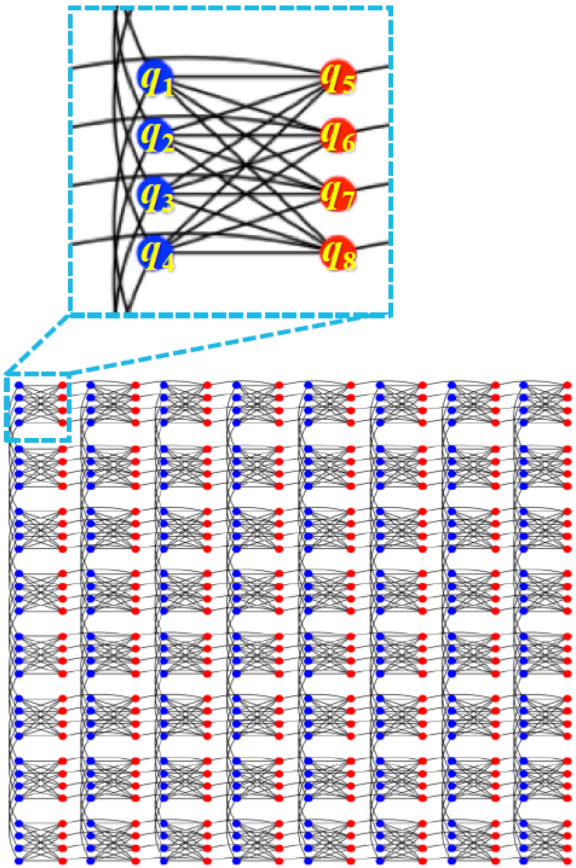
- 量子神经网络：用量子门（通常为单比特门或两比特门）作为节点
  - 每一层包括两个操作：旋转角度为θ_l的旋转门$U(\theta_l)$和与角度无关的操作W_l（通常为引入纠缠的算子如Cnot）
  - L层网络的一般形式：$U(\theta)=\prod_{l=1}^{L}U(\theta_l)W_l$
  - 训练：不同于经典神经网络调整节点间的权重w，量子神经网络则通过调整旋转角度为θ_l来最小化代价函数$L(\theta,D)$



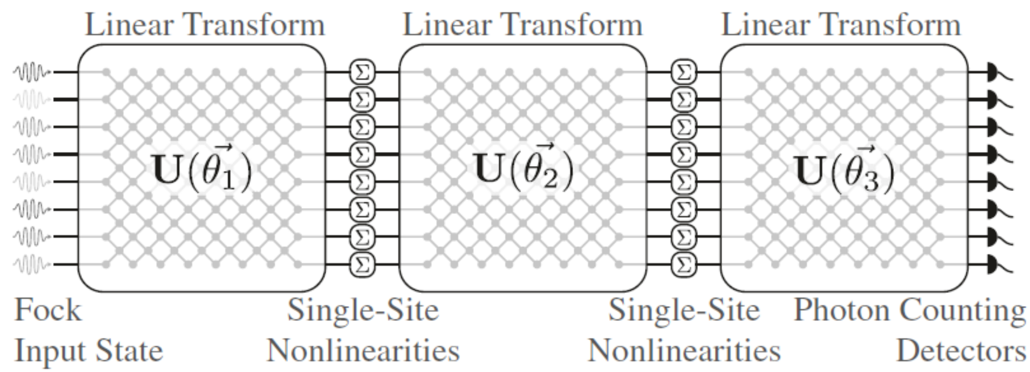
量子旋转门一般可以选为$R_x(\theta_j)$，$R_y(\theta_j)$或$R_z(\theta_j)$，旋转角度θ_j为待训练参数



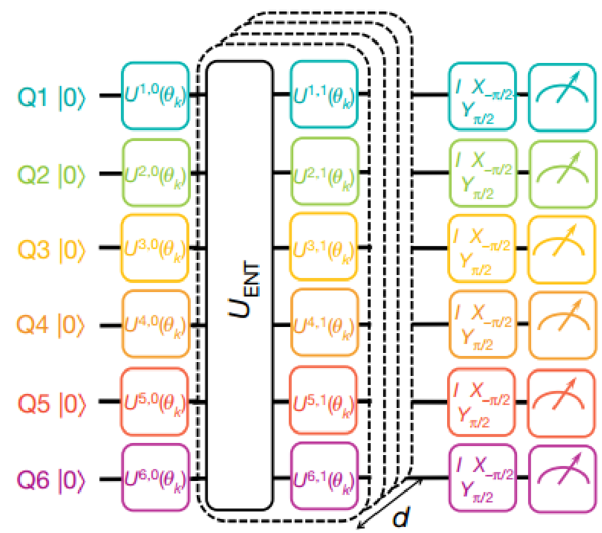
几种常见量子神经网络



基于量子退火机的神经网络[6，7]，常用来求解多体系统的物理问题



基于光量子计算机的神经网络[8]，常用来区分量子态



基于超导量子计算机的神经网络[9]，常用来计算分子的基态和激发态

[6] Mohammad H. et al., Quantum Boltzmann Machine. Phy. Rev. X (2016).
[7] M. W. Johnson et al., Quantum annealing with manufactured spins. Nature (2016)
[8] Gregory R. et al., Quantum optical neural networks. npj (2019).
[9] Kandala, A. et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. Nature （2017）

神经网络模拟波函数

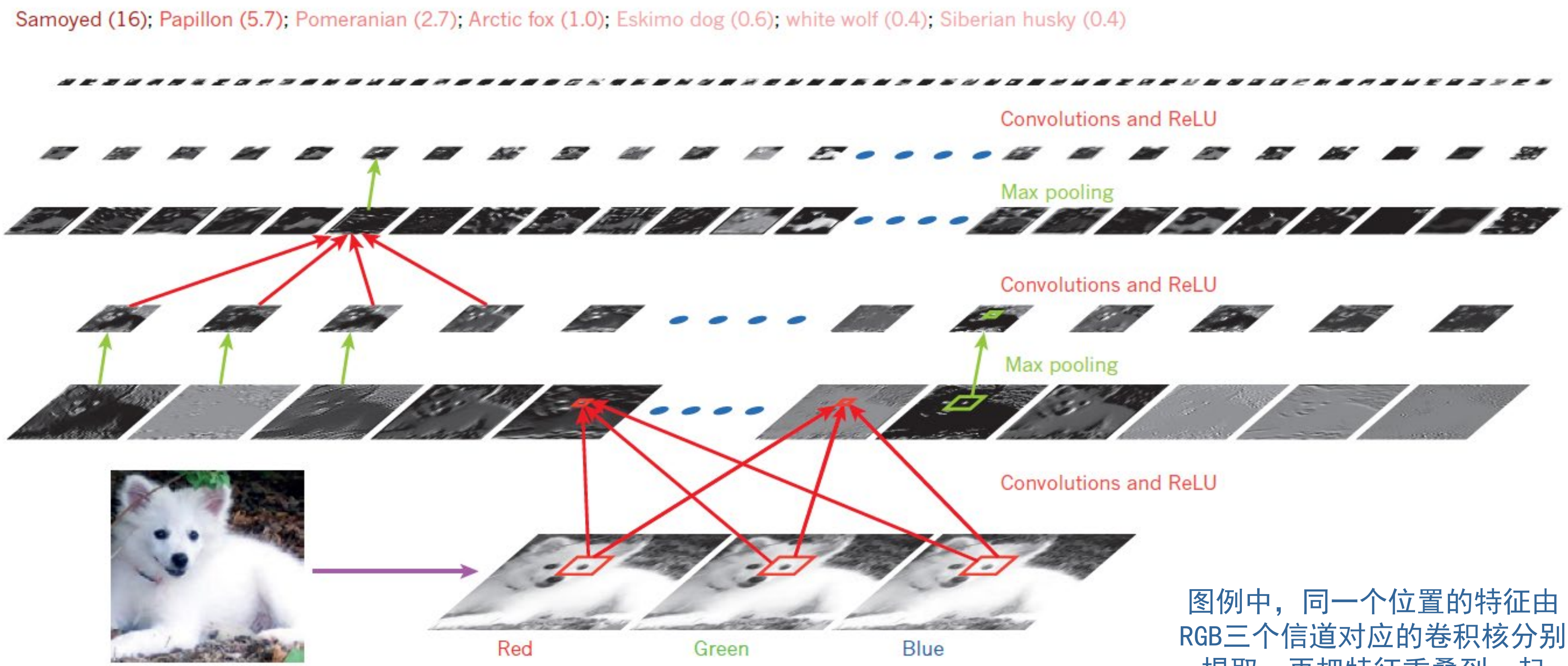
- 目的：对于任意一个n-qubit的波函数Ψ，是否存在一个神经网络，使得波函数Ψ可以被表示为：$\Psi = \sum_s \Psi(s, W)|s\rangle$，其中$s \in \{0,1\}^n$，$\Psi(s, W)$表示权重为$W$的神经网络在输入为$s$时的输出结果。
- 经典神经网络：
  - 2017[10]：单层，可计算1维Ising模型、1维海森堡模型和2维海森堡模型的基态波函数
  - 2017[11]：单层，无法描述包括Projected entangled pair 态，量子增强特征态，以及有能隙哈密顿量的基态等波函数（即：表示能力有限）
  - 2017[11]：多层，当网络深度为$\mathcal{O}(\frac{1}{\Delta}(n+\log(\frac{1}{\epsilon}))m^2)$时可以计算任意哈密顿量的基态波函数（$\Delta$为哈密顿量H的能隙，$\epsilon$为误差，$m$为H的耦合数量）——超过一定层数才行
- 量子神经网络：
  - 2018[12]与2019年[13]：单层，可高精度且有效地模拟氢分子、水分子以及锂化氢分子的基态（即有能隙哈密顿量的基态）波函数
  - 2020[14]：多层，可以在给定精度下实现通用量子计算任务
  - 2020[15]：（含有特殊结构的）单层，可以在给定精度下实现通用量子计算任务

[10] Carleo, G. and Troyer, M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. Science 355, 602-606, (2017).
[11] Xun Gao and Lu-Ming Duan, Efficient representation of quantum many-body states with deep neural networks. Nat. Commun. 8, 662, (2017).
[12] Rongxin Xia, and Sabre Kais, Quantum machine learning for electronic structure calculations, Nat. Commun. 9, 4195, (2018).
[13] Chang Yu Hsieh, Qiming Sun, Shengyu Zhang, and Chee Kong Lee, Unitary-Coupled Restricted Boltzmann Machine Ansatz for Quantum Simulations, arXiv:1912.02988, (2019).
[14] Kerstin Beer, Dmytro Bondarenko, Terry Farrelly, Tobias J. Osborne, Robert Salzmann, Daniel Scheiermann and Ramona Wolf. Training deep quantum neural networks. Nat. Commun. 11:808, (2020).

[15] Yusen Wu, Fei Gao et al., Quantum Restricted Boltzmann machine is universal for quantum computation. arXiv:2005.11970, (2020).

卷积神经网络

- 卷积神经网络（CNN）：包含卷积计算、具有深度结构（层数多）
  - 通常包括卷积层（激励函数为卷积运算）、池化层（降低特征维度）和全连接层（两层之间的节点全部互相连接，用来实现特征组合，一般在最后一步）[16]
  - 被大量应用在图像识别等领域

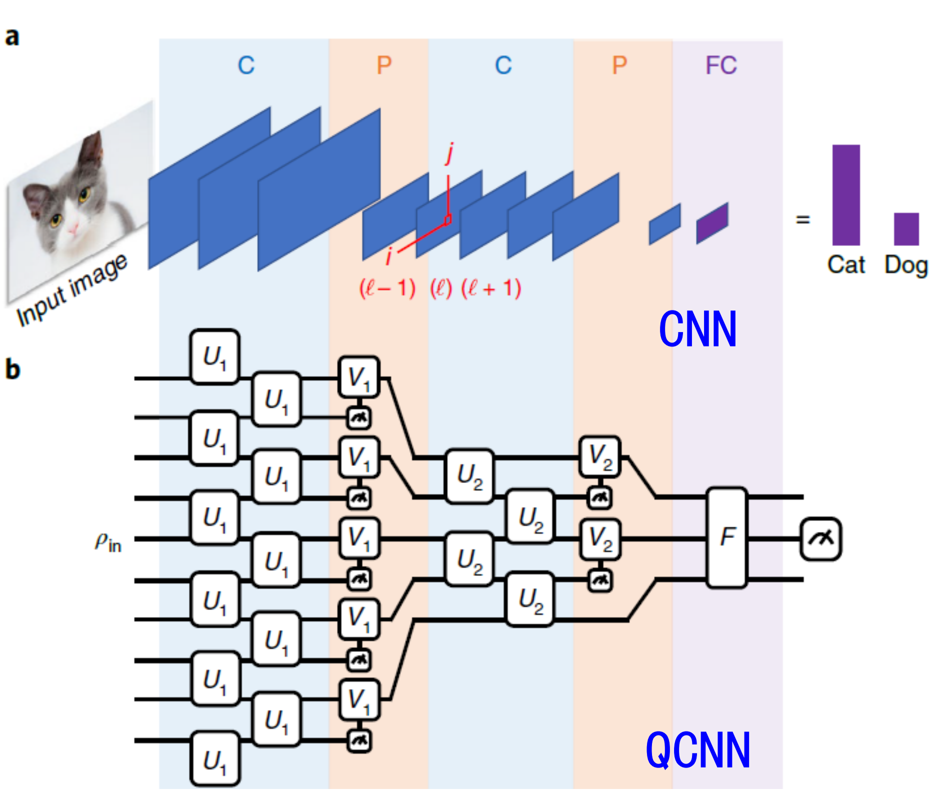


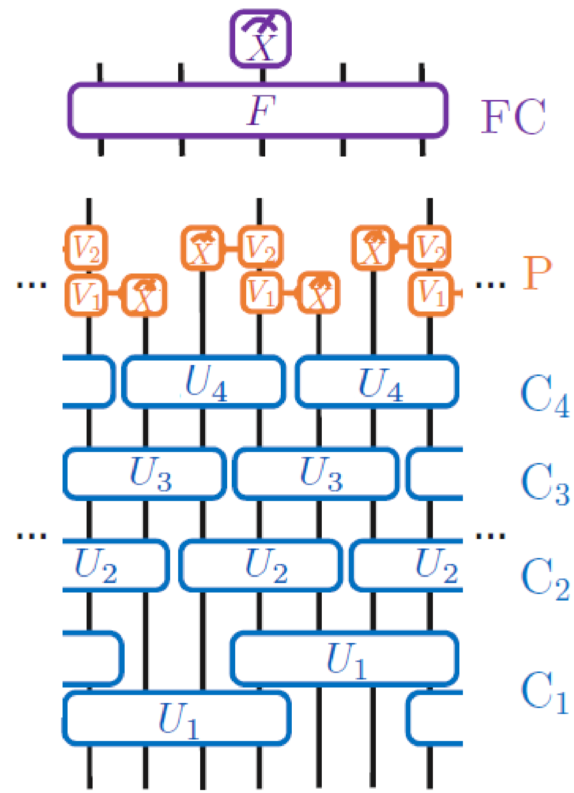
图例中，同一个位置的特征由RGB三个信道对应的卷积核分别提取，再把特征重叠到一起

[16] LeCun, Y., Bengio, Y. & Hinton, G. Deep learning. Nature **521**, 436–444 (2015).

量子卷积神经网络

- 量子卷积神经网络[17]
  - 也分为卷积层C（局部量子门）、池化层P（量子门+部分测量）以及全连接层FC（全局量子门）





[17] Iris Cong, Soonwon Choi et al., Quantum convolutional neural network. *Nat. Phys.* (2019).

性能比较

- 在输入数据为量子态时，相比经典神经网络关于qubit数具有指数加速优势
  - 量子态区分问题（量子物理）[8]
  - 对称拓扑相区分问题（凝聚态物理）[17]
  - 计算多体物理系统对应哈密顿量的基态和激发态[6,7,9]
- 在模拟物理系统的波函数时，相比经典神经网络具有更强的表示能力[12-15]。
- 在处理经典任务时，量子神经网络对数据维度d具有指数加速效果
  - 求解数据集$D=\{x_j\}, j=1,\dots N, x_j\in \mathrm{R}^{\mathrm{d}}$的回归问题、分类问题[18]

[18] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, Quantum circuit learning, Phys. Rev. A 98, 032309 (2018)

提纲

- 部分量子机器学习算法
  - 有监督分类算法
    - 最近邻相关算法
    - 支持向量机
    - 线性判别分析
  - 无监督分类算法
    - K-means算法
  - 推荐系统
  - 神经网络
- 我们的相关成果

量子关联规则挖掘算法

- 问题：从交易数据库中找出频繁被顾客购买的商品组合（项集），即找出购买频率（支持度）超过某个人为设定的阈值（如50%）的商品组合（频繁项集）

交易	商品（项）
T_0	面包、奶酪、牛奶
T_1	面包、黄油
T_2	奶酪、牛奶
T_3	面包、奶酪
T_4	奶酪、黄油、牛奶

k-项集：k个项（商品）的集合

例如，设定阈值=50%

频繁1-项集有：{面包} 60%，{奶酪} 80%，{牛奶} 60%

频繁2-项集有：{奶酪，牛奶} 60%

- 效果：平方加速（当$M_f^{(k)} \ll M_c^{(k)}$，关于$M_c^{(k)}$和ϵ均具有平方加速）

算法	时间复杂度
经典Apriori算法[1]	$O\left(\left(kM_c^{(k)}\right)/\epsilon^2\right)$
所提量子算法[2]	$O\left(\left(k\sqrt{M_c^{(k)}M_f^{(k)}}\right)/\epsilon\right)$

$M_c^{(k)}$：候选k-项集数目；$M_f^{(k)}$：频繁k-项集数目
ϵ： 项集支持度估计误差

[1] H. Mannila, H. Toivonen, and A. I. Verkamo, in *KDD-94: AAAI workshop on Knowledge Discovery in Databases,* 1994.
[2] Yu, C. H., Gao, F., Wang, Q. L., & Wen, Q. Y. Quantum algorithm for association rules mining. Physical Review A, 94(4), 042311, 2016.

求解Toeplitz系统的渐进量子算法

➢ 问题：求解线性方程组 $T_n(f)\mathbf{x}=\mathbf{b}$

Toeplitz矩阵：

$$T_n=\begin{pmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & \cdots & t_{-(n-1)} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & \ddots & \vdots \\ t_2 & t_1 & t_0 & \ddots & t_{-2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & t_{-1} \\ t_{(n-1)} & \cdots & t_2 & t_1 & t_0 \end{pmatrix}$$

应用中，常通过对连续函数的离散化得到

$$t_k=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(\lambda)e^{-ik\lambda}d\lambda,\ k=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

其中$f(\lambda)$称为生成函数

➢ 效果：指数加速

当n足够大时，对于良态的Toeplitz系统［$\kappa=O(\mathrm{polylog}\, n)$］，量子算法具有指数加速效果

算法	时间复杂度
经典算法[1]	$O(n\log n)$
所提量子算法[2]	$O(\kappa\,\mathrm{polylog}\, n)$

[1] R. M. Gray, Toeplitz and Circulant Matrices: A Review. Boston, 2006.
[2] Wan, L. C., Yu, C. H., Pan, S. J., Gao, F., Wen, Q. Y., & Qin, S. J. Asymptotic quantum algorithm for the Toeplitz systems. Physical Review A, 97(6), 062322, 2018.

求解具有位移结构的线性系统的量子算法

- 问题：求解线性方程组 $\mathbf{Mx}=\mathbf{b}$，其中系数矩阵M具有位移结构

❑ 几类典型的具有位移结构的矩阵

$$C_n=\begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{(n-1)} \\ c_{(n-1)} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{(n-2)} \\ c_{(n-2)} & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & c_1 \\ c_1 & \cdots & & c_{(n-1)} & c_0 \end{pmatrix}$$

循环矩阵

$$T_n=\begin{pmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & \cdots & t_{-(n-1)} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & \ddots & \vdots \\ t_2 & t_1 & t_0 & \ddots & t_{-2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & t_{-1} \\ t_{(n-1)} & \cdots & t_2 & t_1 & t_0 \end{pmatrix}$$

Toeplitz矩阵

$$H_n=\begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & \cdots & h_{n-1} \\ h_1 & h_2 & & \iddots & h_n \\ h_2 & & \iddots & \iddots & \vdots \\ \vdots & h_{n-1} & \iddots & & h_{2n-3} \\ h_{n-1} & h_n & \cdots & h_{2n-3} & h_{2n-2} \end{pmatrix}$$

Hankel矩阵

❑ Toeplitz-like/ Hankel-like矩阵：某些对角线/反对角线上存在一些元素与其他元素不相等

- 效果：

对于良态的系数矩阵，所提出的量子算法(i)在黑盒模型下具有平方加速效果；(ii)在QRAM数据结构模型下具有指数加速效果。

算法	时间复杂度
经典算法[1]	$O(n\log n)$
所提量子算法[2]	黑盒模型 $O(\sqrt{n}\kappa\mathrm{polylog}(1/\epsilon))$
	QRAM数据结构模型 $O(\kappa\mathrm{polylog}(n/\epsilon))$

[1] R. M. Gray, Toeplitz and Circulant Matrices: A Review. Boston, 2006.
[2] Wan, L. C., Yu, C. H., Pan, S. J., Qin, S. J., Gao, F., & Wen, Q. Y. Block-encoding-based quantum algorithm for linear systems with displacement structures . Physical Review A, 104, 062414, 2021.

量子岭回归算法

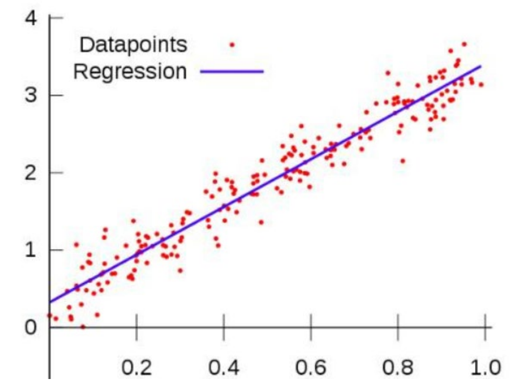
- **问题：** 给定N个数据点$(\mathbf{x}_i, \mathrm{y}_i)_{i=1}^{N}$，其中$\mathbf{x}_i = (x_{i1}\cdots, x_{iM})^T \in R^M$，$\mathrm{y}_i \in R$。线性回归的目标是拟合一个线性函数$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x}$，使得$f(\mathbf{x}_i)$尽可能接近$\mathrm{y}_i$。

岭回归: 在一般线性回归中引入w的正则化项，其拟合参数：

$$\mathbf{w} = \underset{\mathbf{w}}{\mathrm{argmin}} \sum_{i=1}^{N} |f(\mathbf{x}_i) - \mathrm{y}_i|^2 + \alpha\|\mathbf{w}\|^2$$

$$= (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X} + \alpha\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{X}^T\mathbf{y}$$

这里$\mathbf{y} = (y_1, \cdots, y_N)^T$，且$\boldsymbol{X} = (\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N)^T$，$\alpha$为岭回归参数



- **效果：指数加速**

当$1/\epsilon$，$\kappa = O(\mathrm{polylog}\, N)$，$\|X\|_{\max} = \Theta(1)$时，量子算法具有指数加速效果

算法	时间复杂度
经典岭回归算法[1]	$O\left(NM + N^2R\log(\frac{R}{\epsilon})/\epsilon^2\right)$
所提量子算法[2]	$O(\|X\|_{\max}^2 \mathrm{polylog}(N+M)\kappa^3/\epsilon^3)$

[1] S. Chen, Y. Liu, M. Lyu, I. King, and S Zhang,, Proc. 31th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (2015), p. 201.
[2] Yu, C. H., Gao, F., & Wen, Q. An improved quantum algorithm for ridge regression. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 33(3), 858, 2021.

量子视觉追踪算法

➢ 问题：在视频中确定感兴趣的移动目标

训练阶段：求如下$\mathbf{w}$：

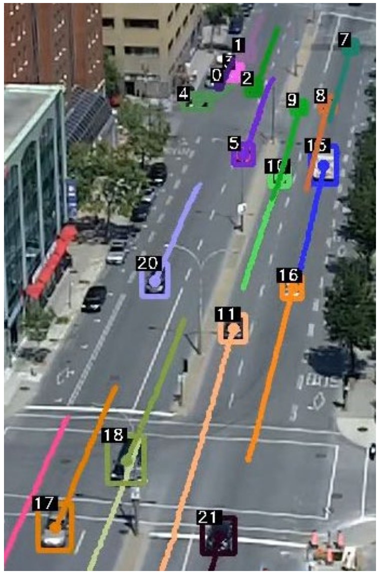
$$\mathbf{w} = (X^T X + \alpha I)^{-1} X^T \mathbf{y}$$

$$X = \mathcal{C}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \cdots & x_n \\ x_n & x_1 & x_2 & \cdots & x_{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_2 & x_3 & x_4 & \cdots & x_1 \end{bmatrix}$$

探测阶段：用一个n维的列向量$\mathbf{z}$表示n像素基础候选图像块，对应于$n \times n$的循环矩阵$Z = \mathcal{C}(\mathbf{z})$，这些图像块的响应可被预测为:

$$\hat{\mathbf{y}} = Z\mathbf{w}$$

其中$\hat{\mathbf{y}}$的最大元素揭示了目标的位置



➢ 效果：指数加速

X和Z的条件数$\kappa_Z, \kappa_X = O(\mathrm{polylog}\, n))$时，量子算法具有指数加速效果

算法	时间复杂度
经典HCMB15算法[1]	$O(n\log(n))$
所提量子算法[2]	$\tilde{O}(\mathrm{polylog}(n)\kappa_Z(\kappa_Z + \kappa_X^2)/\epsilon)$

[1] Henriques J F, Caseiro R, Martins P, et al. IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell., 7, 583 (2015).
[2] Yu, C. H., Gao, F., Liu, C., Huynh, D., Reynolds, M., & Wang, J. Quantum algorithm for visual tracking. Physical Review A, 99(2), 022301, 2019.

北京邮电大学
Beijing University of Posts and Telecommunications

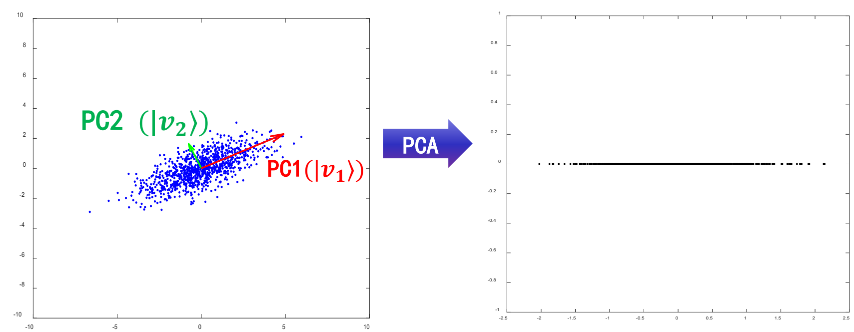
量子PCA数据降维算法

- **问题：** 数据降维是将高维数据集映射到低维空间并获得低维数据的过程，其中最具代表性的线性降维方法为主成分分析（PCA）

主成分分析：给定数据矩阵$X = (\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_N)^T \in R^{N\times D}$，其中每个$\mathbf{x}_i \in R^D$，构造由$X$ 的d个主特征向量组成的投影矩阵P，则低维数据为

$$Y = P^T X \in R^{N\times \mathrm{d}}$$

其中$Y = (\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_N)^T \in R^{N\times d}$，$\mathbf{y}_i \in R^d$



- **效果：指数加速**

对比经典算法，当$d = O(\mathrm{polylog}(D))$时，量子算法具有指数加速效果

算法	时间复杂度
经典算法[1]	$O\big(\mathrm{poly}(N, D)\big)$
所提量子算法[2]	$O\big(d^3\mathrm{polylog}(N, D)\big)$

[1] Bishop, C. M. (2006). Pattern recognition and machine learning. springer.
[2] Yu, C. H., Gao, F., Lin, S., & Wang, J. Quantum data compression by principal component analysis. Quantum Information Processing, 18(8), 249, 2019.

改进量子A最优投影算法

➢ 背景：A最优投影线性降维技术，其目的是提高在降维空间中的回归性能

Duan et al. [1]:

复杂度指数依赖于迭代次数s

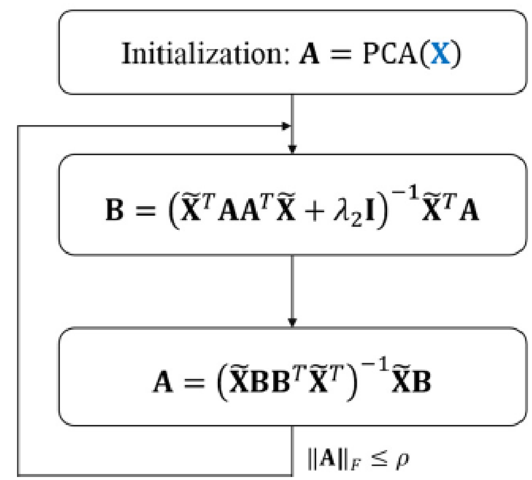
- 因为未知量子态不可克隆，而每轮迭代都要消耗多份$|\psi_{A^{(i)}}\rangle$

Ours [2]:

复杂度平方依赖于s

- 迭代不需要消耗$|\psi^{(i)}\rangle$
- 数值分析：$s=\Omega(\kappa+k+\log_2 1/\epsilon)$

Classical



算法	时间复杂度
Duan et al.[1]	$O(\frac{\kappa^{4s}\sqrt{k^s}}{\epsilon^s}\mathrm{polylog}^s(\frac{mn}{\epsilon}))$
Ours[2]	$O(\frac{s\kappa^6\sqrt{k}}{\epsilon}polylog\left(\frac{mn}{\epsilon}\right)+\frac{s^2\kappa^4}{\epsilon}\mathrm{polylog}(\frac{\kappa k}{\epsilon}))$

m: 数据条数
ϵ:精度参数
s:迭代次数
n:特征个数
κ:数据矩阵的条件数
$m=\Theta(n)$
k:降维后数据的特征个数

[1] Duan B et al. Quantum algorithm and quantum circuit for a-optimal projection: Dimensionality reduction[J]. Physical Review A, 2019, 99(3): 032311.
[2] Pan Shi-Jie et al. Improved quantum algorithm for A-optimal projection. Physical Review A, 102(5): 052402, 2020.

Beijing University of Posts and Telecommunications

量子谱回归算法

背景： 谱回归是一个降维算法的框架，包含了PCA(主成分分析)和LDA(线性判别分析)等降维算法。

- ❑ 难点：量子主成分分析无法得到主特征值相同的矩阵对应的特征向量
- ❑ 方法：绕开主成分分析，使算法适用于主特征值相同的情况
- ❑ **效果：** 多项式级加速（当精度参数的倒数、标签数和数据矩阵的条件数均远小于数据矩阵的维度时）

量子算法复杂度	经典算法复杂度
$O\left[\frac{c^2\kappa^2 M}{\epsilon}\mathrm{polylog}(M+N)\right]$	$O(c^2M+cMNs)$

M: 数据条数　　N:特征个数，满足$N=\Theta(M)$

ϵ:精度参数　　s:迭代次数　　c:标签数

κ:数据矩阵的条件数

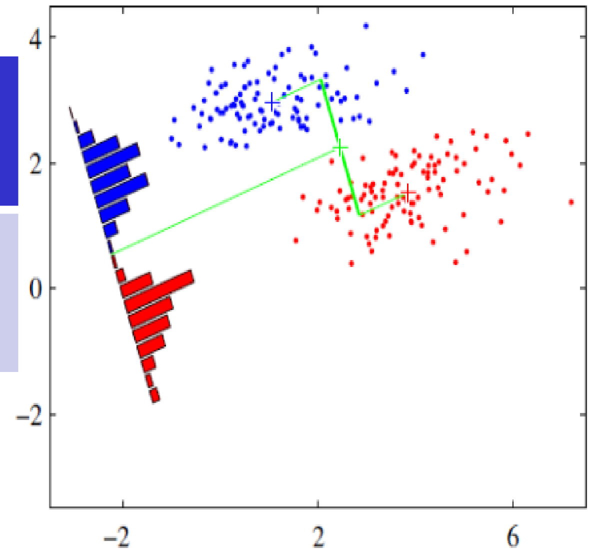


图1. 降维示意图

[1]潘世杰等，量子谱回归算法，计算机研究与发展，58(9):1835, 2021

针对泊松方程的变分量子算法

- **定义：** Dirichlet边界（边界函数值为0）条件下的 d 维泊松方程：

$$-\Delta\mu(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in I_d := (0,1)^d$$

其中$\Delta\mu(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{d} d^2\mu/dx_i^2$，$x_i$是$\boldsymbol{x}$的第$i$个元素，$\mu(\boldsymbol{x})$和$f(\boldsymbol{x})$是连续函数

- **应用：** 计算流体力学[2-3]、马尔科夫链[4]

- **经典求解：有限差分和谱方法[5-6]**
  - 核心：离散化泊松方程得到线性方程，用线性方程的解来近似泊松方程的解
  - 困难：维数通常非常大，经典方法复杂度高、量子方法[7-8]需要通用量子计算机

- **我们的算法[1]：**

设计变分量子算法来求解离散泊松方程得到的线性方程组

- **效果：** 可在近期量子设备上实现（量子比特数目少和线路深度浅）

[1]H L. Liu, Y S. Wu, L C. Wan, S J. Pan, F. Gao, S J.Qin, Q Y. Wen, Variational quantum algorithm for the Poisson equation, Phys. Rev. A.104(2) 022418, 2021.

[2] Batchelor G K. (Cambridge: Cambridge University Press) (2000)；[3] Fletcher C A J. vol 1, 2nd edn (Berlin: Springer) (1991)
[4]Meyn S P. (Cambridge: Cambridge University Press) (2007)； [5]G. E. Forsythe, W. R. Wasow, and W. Nachbar, Physics,Today 14, 58 (1961).
[6] G. B. Folland, (Princeton university press, 1995)；[7] Cao, Y, Papageorgiou, A., et al.New J. Phys. 15, 013021 (2013).
[8] 7. Childs, A.M., Liu, J. P. & Ostrander, arXiv:2002.07868 (2020).

Email: gaof@bupt.edu.cn
Tel: 86 -10 -62283192
Web: www.bupt.edu.cn

谢 谢!