量子信息与量子密码 课程报告

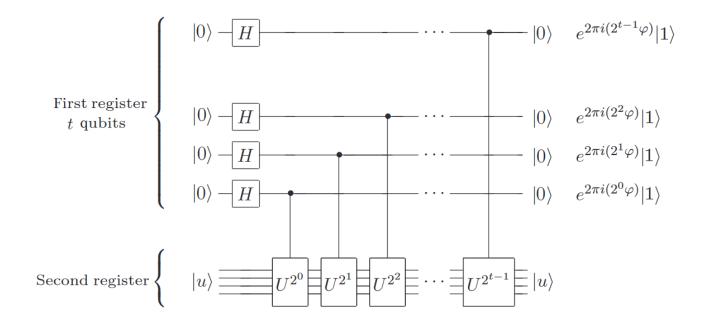
从经典量子算法到量子机器学习

本报告主要探索了一些经典的量子计算的算法,以及其在典型的量子机器学习中的应用。 其中的部分算法是在课程汇中涉及到的,这里会进行一定的略过,并突出一些没有讲解过的经典算法,例如HHL 算法,并给出两个经典机器学习算法的量子实现(QPCA 和 QSVM),来分析这些基础算法在其中的应用。

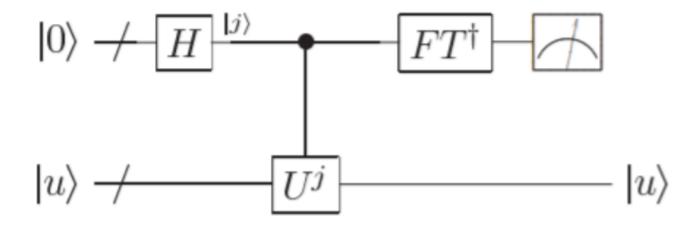
HHL 算法

相位估计

相位估计算法是课上已经讲解过的一个算法,其是许多量子算法的关键,其第一个阶段的框架如下:



总线路图如下所示:



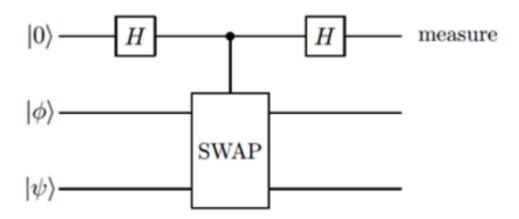
$$\frac{1}{2^{t/2}} \sum_{j=0}^{2^{t}-1} e^{2\pi i \varphi j} |j\rangle |u\rangle \to |\tilde{\varphi}\rangle |u\rangle$$

上述路线实现的变换为

最后在计算基下的测量将会给出\varphi>的估计值。相位估计通过两个阶段实现,**第一阶段提取了目标酉算子的特征值放到了量子态的概率幅中,第二阶段提取了概率幅中的相位放到了量子态的基态中。**最终输出的就是估计的相位,由这个相位就可以进一步求出输入矩阵的特征值。 在相位估计中,实际上是通过QFT算法的逆运算,将量子态的概率幅值存储到基态中,以便通过后续测量得到相位值。

Swap test

在课程中,介绍了经典的两个纯态量子之间进行交换的量子电路,如下图所示,其主要是用来计算内积模的平方,以表明两个纯量子态的接近程度。



其基本的计算过程如下所示:

$$|0\rangle_{1}|\phi\rangle_{2}|\psi\rangle_{3} \xrightarrow{H_{1}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_{1} + |1\rangle_{1})|\phi\rangle_{2}|\psi\rangle_{3} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_{1}|\phi\rangle_{2}|\psi\rangle_{3} + |1\rangle_{1}|\phi\rangle_{2}|\psi\rangle_{3})$$

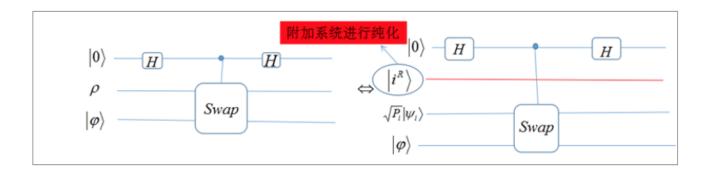
$$\xrightarrow{\text{Swap}_{2,3}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 |\phi\rangle_2 |\psi\rangle_3 + |1\rangle_1 |\psi\rangle_2 |\phi\rangle_3)$$

$$\frac{\frac{H_1}{2}}{2} \{ (|0\rangle_1 + |1\rangle_1) |\phi\rangle_2 |\psi\rangle_3 + (|0\rangle_1 - |1\rangle_1) |\psi\rangle_2 |\phi\rangle_3 \}$$

$$\frac{1}{2} |0\rangle_1 (|\phi\rangle_2 |\psi\rangle_3 + |\psi\rangle_2 |\phi\rangle_3) + \frac{1}{2} |1\rangle_1 (|\phi\rangle_2 |\psi\rangle_3 - |\psi\rangle_2 |\phi\rangle_3)$$

可以看到,用基态|0> 在最后测量为0的概率为 \frac{1}{2}(1+|<\phi|\varphi> $|^2$),而用基态|1>测量得到1的概率为\$ $\frac{1}{2}(1-|<\phi|\varphi>|^2)$ 。所以可以用这样的方法来计算内积。

而要进行混合态与纯态的swap test 操作,需要对混合态进行纯化操作,相较于上面的电路图而言,其具体为:



可以看到,对于混合态的密度算子 \rho = \sum_ip_i \rangle \varphi_i > < \varphi_i \rangle 而言,附加一个系统R 对其进行纯化得到:

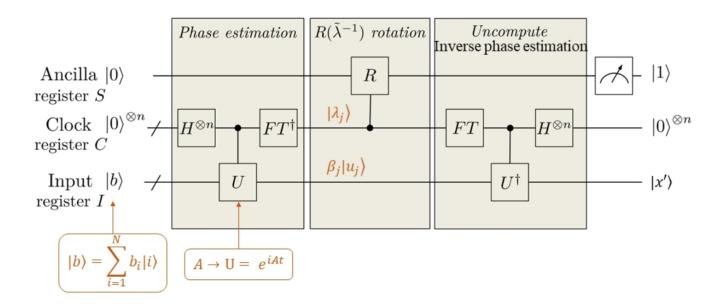
$$|
ho R>=\sum_i \sqrt{p_i}|arphi_i>|i^{R_i}>$$

而后的操作就和之前的swap test 操作是一致的。

HHL 算法

基本框架

HHL 算法[1] 是在2009年由 Harrow 等人提出的一个经典量子算法,用于求解线性方程的问题。 **线性系统是很多科学和工程领域的核心**,由于**HHL算法_在特定条件下实现了经典算法的*指数加速*_效果**,能够在数据处理、机器学习、数值计算等场景具有广泛应用。



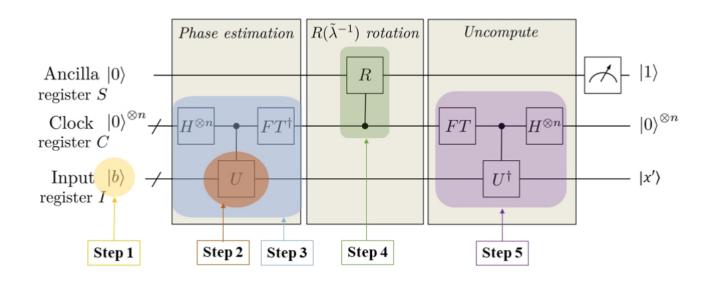
经典的求解线性方程的问题,一般表示为:输入一个n \times n的矩阵 A 和 一个n 维向量b,输出n维向量x,满足Ax=b

对于HHL量子算法而言,对输入和输出有一定的限制,包括如下:

- 1) 对输入A 和 b的要求: 首先要求n \times n 的矩阵A是一个厄米矩阵, 其次输入b是一个单位向量。
- 2) 对输出x的形式的要求: 算法的输出如上图中电路最后一行所示,为 x'>,其依旧存放在底部寄存器中(即输出x 和 输入b是在同一个寄存器中)。底部寄存器存放的是一个蕴含了向量x的量子态。这里的"蕴含"的意思是我们并不能读出这个x的确切值是什么。不过我们能够得到一个关于x的整体特性,比如我们能够通过一个算子M,得到一个关于x期望值的一个评估: x^{+}Mx。

从上图中,我们可以清晰地看到,HHL算法有三个过程,分别是相位估计,受控旋转和逆相位估计。 在上一节中,已经说明了相位估计的基本方法,而逆相位估计,就是相位估计的逆运算。具体而言,可以将相位估计看做是一个基本的算子U{pe},相位估计的过程也就是得到|\varphi> = U{pe}|u>,那么相位估计的逆运算,也就是将该算子求逆,并带入到具体的运算过程中。

计算过程



下面来具体解析HHL 算法,根据上图的步骤来分析每步的计算(为了简化描述,将线路图中第一行附加量子比特称为第一寄存器,第二行称为第二寄存器,底部的第三行即输入 b>所在的寄存器称为第三寄存器。):

step 1. 在第三寄存器中,准备 |b> = \sum{i=1}^N b_i|i>, 其中\vec{b} = (b_1, ..., b_N), 且有 \sum{i=1}^N|b_i|^2 = 1 (根据前面提出的对输入的限制)

step 2. 在最底部线路中,构建酉算子。将厄米矩阵A 转换为酉操作e^{iAt}, 其中HHL 算法中还介绍了如何将一个非厄米矩阵转换为厄米矩阵的形式。 这里所构造的酉算子,就是这样的一个形式。

step 3. 通过相位估计,这也是前面介绍过的部分,在A 的特征空间上分解|b>,得到其结果为|b> = $|sum{j=1}^N |b>$ = $|sum{j=1}^N |b>$ = $|sum{j=1}^N |b>$ = $|sum{i=1}^N |ambda_j|$ = $|sum{i=1}^N |ambda_j|$

step 4. 如图中绿色方框所示,设计一个映射R,其是一个受控旋转操作,其基本的操作如下:将附加量子比特由基态 | 0 > 映射到 | 0 > 和 | 1 > 的叠加态上,同时到值提取到基态 | 1 > 的概率幅上,具体计算为:

$$R|0>=\sqrt{1-rac{c^2}{\lambda_j^2}}|0>+rac{c}{\lambda_j}|1>$$

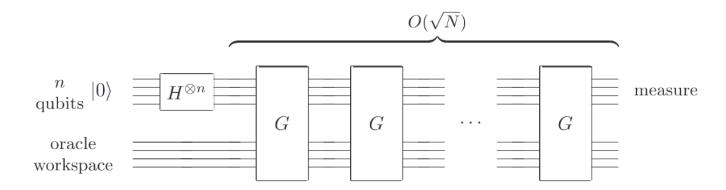
其中c = O(1/\kappa) \le minj $|\lambda_j|$ 。因此,在经过了step 4 之后,得到的量子寄存器态为 $\beta_j=1$ ^N(\sqrt{1-\frac{C^2}{\lambda_j}|0> + \frac{c}{1}|1>)\beta_j|u_j>|\lambda_j>.

step 5. 执行逆相位估计将 $|\lambda|$ 收回 变为 |0>,并测量附加的量子比特,若测量的结果 为 |1>,那么得到该线性系统的计算值 |x>。

量子搜索算法

Grover 算法

Grover算法最早被用于在无序数据中搜索最大值、最小值问题[3]。Grover 算法在课程中已经清晰地说明过,这里就只作简单的介绍,不进行过多细节的深化。



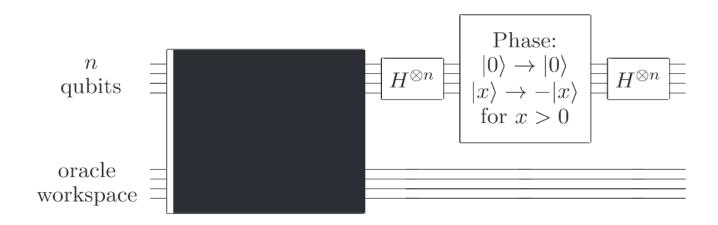
如上图所示, Grover 算法的基本执行过程主要是经过\sqrt(N) 次G门, 就可以以很大的概率找到需要寻找的那个值, 这里不再对\sqrt(N) 次G门之后, 以多大概率能够区分搜索的值和其它值进行说明。

其基本流程如下:

首先对n量子比特的基态进行一个初始化操作,得到无序数据集合,一共有2ⁿ个基态的均衡叠加态:

$$|\varphi> = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{x=0}^{n-1} |x>$$

然后进行多次Grover 迭代,如图中G部分所示。



Grover 迭代分为四步,分别为:黑箱Oracle,起到标记解的作用,对满足等式C(x) = 1 的 x 进行标记。 然后进行Hadamard 变换, 相位翻转 , 然后再进行一次Hadamard 变换。 整个 Grover 迭代过程可以标记为:

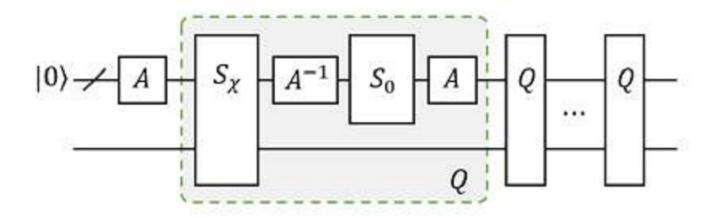
$$G = (2|\varphi> < \varphi| - I)O$$

经过O(\sqrt{N})次Grover 迭代后进行测量,会以高概率得到要搜索的X。

Grover 算法的推广 —— AA 算法

AA (Amplitude Amplification) 算法[4]在Grover算法基础上做了推广,使其应用更加广泛。原始的Grover算法主要应用于搜索问题。推广的AA算法不仅可以提高经典算法的成功概率,也可以用于提高量子算法输出的成功概率。例如,该算法在很多HHL-based算法中都有应用。具体而言,假设量子算法输出满足f(x = 1)的x的概率为a > 0,则经过O(1/\sqrt(a)) 次迭代,算法能够以一个很高的概率搜索到解x,其实现呢了经典算法的二次加速。

从计算的步骤上而言,两个算法具有很强的相似性,下图展示了AA 算法的计算步骤,可以看到,相较于 Grover 算法而言, 其同样是一个首先进行初始化,然后迭代计算 Q 门的状态。



接下来通过对比 Grover 算法 和 AA 算法,来说明AA 算法的基本计算流程:

对于Grover 算法而言,其 G 门的计算逻辑可以表示为 G = -HS0HS{\chi},而上图中AA算法中的迭代部分Q可以表示为:

$$Q = Q(A, \chi) = -AS_0A^{-1}S_{\chi}Q = Q(A, \chi, \phi, \varphi) = -AS_0(\phi)A^{-1}S_{\chi}(\varphi)$$

可以看到,从上述公式的描述中,实际上Q 是G 的一般化过程,当算子A 为 Hadamard 门的时候, 那么就可以表示成Grover 算子的形式。 而在更一般的情况下,A可以是任意一个量子算法,将初始基态 | 0 > 转变为一个任意叠加态,具体可以表示为A | 0 > = \sum_{x \in X} a_x | x > 。

在公式中,另外两个值得注意的算子就是SO和S{\chi},在考虑给这两个算子添加可变角度之后,可以将这两个变换的函数表示为:

$$S_\chi(arphi):|x>
ightarrow egin{cases} e^{iarphi|x>} & if\ \chi(x)=1\ |x>=0 \end{cases} S_0(\phi):|x>
ightarrow egin{cases} e^{i\phi|x>} & if\ x=0\ |x>=if\ x
eq 0 \end{cases}$$

对于一般化的SO和S{\chi},其设置了\phi=\varphi=\pi,那么可以得到公式为如下:

$$S_\chi(\pi):|x>
ightarrow egin{cases} -|x>&if\ \chi(x)=1\ |x>=0 \end{cases} S_0(\pi):|x>
ightarrow egin{cases} -|x>&if\ x=0\ |x>&if\ x
eq 0 \end{cases}$$

总体来看,AA 算法是对于Grover 算法的一般化,并从这种一般化的过程中,研究出了一些新的可适用的场景,这种思路是一个很好的研究思路。

量子主成分分析 (QPCA)

主成分分析 (PCA) 是一种常用的降维方式,在很多方面都有应用。 本章将首先介绍经典的PCA 算法,然后介绍量子主成分分析的实现。

经典主成分分析算法

PCA 算法的目标是将高维数据投影到低维空间,具体而言,其寻找投影后的低维空间中的r个新变量,基本要求是要通过降维手段,将这些样本点的投影尽可能的分开,即投影后的样本点方差最大化。 其具体的推导过程如下。

数据: 给定数据集 X = (x1, x_2, ... x_n), 其中x_i \in R^d 为 d维数据, 为了后续计算的简化, 不 妨假设\sum{i=1}^nx_i = 0

目标: 构造一个投影矩阵P_{r \times d}, 使得将原数据集投影到低维空间,投影方式为Y = P^TX ,其中Y = $(y_1, y_2, ..., y_n)$, $y_i \in R^r$, r < d。而根据最大化方差的基本目标,寻找这个投影算子P 的优化目标应该是:

$$\max_{P} tr(P^T X X^T P) s. t. \ P^T P = I$$

求解:对于该目标函数使用拉格朗日乘值法,可得到:

$$XX^TP = \lambda P$$

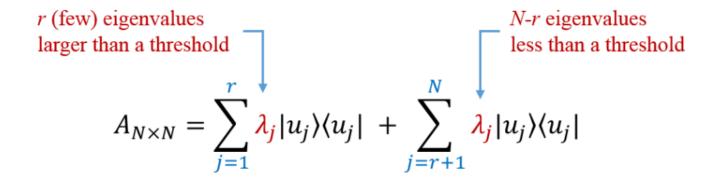
因此,只需要对计算样本的协方差矩阵 $A = XX^T$ 进行特征分解,然后将求得的特征值进行排序,得到其排序为:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_d$$

再取前r个特征值对应的特征向量构成 $P = (p_1, ..., p_r)$

量子主成分分析算法

根据上文的介绍,实际上 PCA 的关键在于取协方差矩阵A的前r个最大特征值对应的特征向量来构造投影矩阵P,这里我们使用bra-ket 形式来进行描述,其可以构建为如下图所示的形式:



需要说明的是,QPCA [6] 并不是经典PCA 一个简单对应的量子版本,其具有其独特的研究背景和目标,主要是为了研究密度算子的特征向量和特征值,这也是在课程中多次涉及到的内容。

QPCA 的求解过程可以理解为矩阵的特征分解过程,在之前所讨论的算法中,相位估计能够有效求解矩阵的特征分解问题。在相位估计中,需要构造两个内容,即量子态和对应的受控U算子。在QPCA中,这两个输入均由密度算子\rho来构造,具体构造为:

量子态: 即密度算子\rho 本身, 其在特征空间上的分解为:

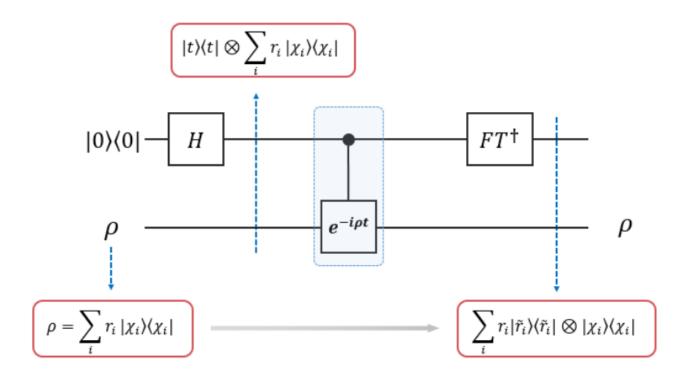
$$ho = \sum_i r_i |\chi_i> <\chi_i|$$

受控U 算子: 构造受控的e[^]{-i\rho t}。假定能够复制得到n个密度算子\rho,则可以构造得到受控的酉算子U。 其构造方式如下所示

$$\operatorname{tr}_{P} e^{-iS\Delta t} \rho \otimes \sigma e^{iS\Delta t} = (\cos^{2} \Delta t)\sigma + (\sin^{2} \Delta t)\rho - i\sin \Delta t \cos \Delta t [\rho, \sigma]$$
$$= \sigma - i\Delta t [\rho, \sigma] + O(\Delta t^{2}) \tag{1}$$

具体而言,其借助密度算子\rho的n个复制和稀疏的交换矩阵S,通过偏迹运算实现e^{-i\rho t}的构造。进一步的,在相位估计中,执行的是受控酉算子。在QPCA[6]中,提出了使用受控Swap来代替原始的Swap操作,从而解决了这一问题。

因此, QPCA 的过程如下图所示, 其本质上就是一个相位估计的内容。



根据计算图的描述,最终的相位估计会输出的结果为

$$\sum_i r_i |\chi_i> <\chi_i| \otimes | ilde{r_i}> < ilde{r_i}|$$

综上,QPCA借助相位估计便可分解出密度算子ρ的特征值和特征向量,从而实现了降维的操作。 实际上,在QPCA的文章中指出,这个算法不仅仅用于求解经典PCA,也可以用于进行量子态层 析,量子态的区分和分配问题等。

量子支持向量机 (QSVM)

经典支持向量机

支持向量机 (SVM) 是传统机器学习中,基于监督学习算法来解决分类问题的一个经典的算法,当然,在一定的条件下,SVM 算法也可以用于回归问题。本小节主要简单说明SVM 算法的计算过程。 SVM 的目标是寻找到一个超平面能够最好的区分两类数据,并提供一个决策边界。下面我们将以最简单的二分类问题,来说明经典的SVM 算法的建模和求解过程。

数据: 对于一个二分类问题,假设其共有N个样本,表示为x_i,其对应的标签为y_i,其中用y_i = 1和y_i = -1来分别表示这两类。其目标是最大化两种类别之间的距离。

目标与对偶问题: 根据SVM求解的目标, 即最大化两种类别之间的距离, 将其描述为如下形式:

$$\min_{w,b}rac{1}{2}||w||^2s.\,t.\,y_j(w\cdot x_j+b)\geq 1$$

对于原问题的求解,是困难的,将其转换为对偶问题,表示为:

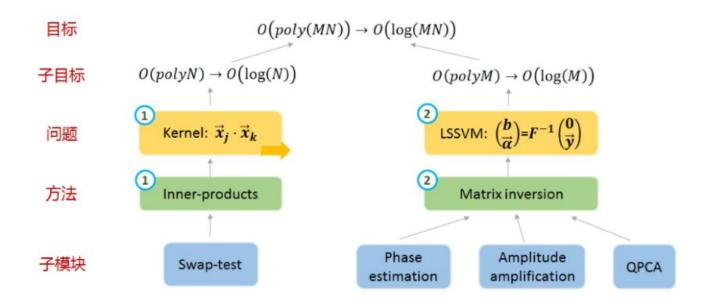
$$\max_{lpha} \min_{w,b} L(w,b,lpha) = rac{1}{2} ||w||^2 - \sum_{i=1}^N y_j lpha_j (y_j (w\cdot x + b) - 1) s. \, t. \quad y_j lpha_j \geq 0$$

进一步地, 会有:

$$\max_{lpha}L(lpha)=\sum_{i=1}^N y_jlpha_j-rac{1}{2}\sum_{j,k=1}^Nlpha_jK_{jk}lpha_ks.\,t.\quad \sum_{j=1}^Nlpha_j=0,\quad y_jlpha_j\geq 0K_{jk}=k(x_j,x_k)=x_j\cdot x_k$$

QSVM 算法的实现

QSVM [5] 算法是在SVM 算法的基础上,对于原有的计算过程的改进,其主要的改进如下图所示:



在经典的SVM 实现中,对于\alpha的求解过程需要涉及到核函数的计算,也就是样本之间的内积操作。在上文的分析中,我们给出了利用swap-test 方法实现的内积运算的加速操作,对于经典的内积操作,其时间复杂度为O(N),而基于swap-test 实现的内积操作,其时间复杂度仅为O(logN),实现了指数级的加速。

在求得了内积之后,就是要求解了\alpha ,对于\alpha的求解,本身是一个二次规划问题,在这里文章没有对原始SVM 进行分析,而是对最小二乘支持向量机LSSVM 的求解进行了分析,具体如下。

对于SVM 的初始约束条件,可以进行如下的转换:

$$y_j(w\cdot x_j+b)\geq 1 o w\cdot x_j+b=y_j-y_je_jy_j=\pm 1$$

在这里,引入了一个松弛变量e_j,将不等式约束转变为了等式约束。 通过这样的转换,使得求解\alpha 的问题从二次规划变成了求解线性方程组的问题。而在之前的讨论中,我们已经说明了,使用HHL 算法可以对于求解线性方程组实现指数级别的加速。该问题的实际计算过程为:

$$F\begin{pmatrix} b \\ \vec{\alpha} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & \vec{1}^T \\ \vec{1} & K + \gamma^{-1}I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ \vec{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{y} \end{pmatrix}$$

$$\binom{b}{\vec{\alpha}} = F^{-1} \binom{0}{\vec{y}}$$

下面展示整个算法的训练和推理流程:

Input: $F \in \mathbb{R}^{(M+1)\times (M+1)}$, $y \in \mathbb{R}^M$

Output: A quantum state $\propto |b,\vec{\alpha}\rangle$, where $(b,\vec{\alpha})^T \approx (b^*,\vec{\alpha}^*)^T \stackrel{def}{=} F^{-1}(0,\vec{y})^T$

Algorithm:

- 1. Prepare the quantum state $|\tilde{y}\rangle = \sum_{j=1}^{M+1} \langle u_j | \tilde{y} \rangle |u_j \rangle$ ($|u_j\rangle$: eigenstates of \hat{F}).
- 2. Perform **phase estimation** to create $\sum_{j=1}^{M+1} \langle u_j | \tilde{y} \rangle | u_j \rangle | \lambda_j \rangle$.
- 3. Inverts the eigenvalue by performing a controlled rotation and remove the eigenvalue register to get $\sum_{j=1}^{M+1} \langle u_j | \tilde{y} \rangle | u_j \rangle \left(\sqrt{1 \frac{c^2}{\lambda_j^2}} | 0 \rangle + \frac{c}{\lambda_j} | 1 \rangle \right).$
- Use amplitude amplification to boost the amplitude for |1>.
- 5. Measure the qubit.

 If we observe $|1\rangle$, the remaining state is \propto to $\sum_{j=1}^{M+1} \langle u_j | \tilde{y} \rangle / \lambda_j | u_j \rangle$. $|b, \vec{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{c}} (b|0\rangle + \sum_{k=1}^{M} \alpha_k |k\rangle)$ else output 0.

上图给出了训练过程,可以看到,其训练过程主要就是对于之前所讨论的F的估计,通过得到一个好的F,来实现最终的优化,其具体线路和HHL 是类似的。 在上述过程中,重点使用到了我们介绍的HHL 和 AA 算法。

Input: $|b, \vec{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{C}} (b|0\rangle + \sum_{k=1}^{M} \alpha_k |k\rangle), |\vec{x}\rangle$

Output: $y \in \{-1, +1\}$

Algorithm:

1. By calling the training data oracle, construct $|\tilde{u}\rangle$ and the query state $|\tilde{x}\rangle$:

$$\begin{split} |\tilde{u}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{u}}}} \left(b|0\rangle|0\rangle + \sum_{k=1}^{M} \alpha_{k}|\vec{x}_{k}||k\rangle|\vec{x}_{k}\rangle\right), \, N_{\tilde{u}} = b^{2} + \sum_{k=1}^{M} \alpha_{k}^{2}|\vec{x}_{k}|^{2} \\ |\tilde{x}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_{\tilde{u}}}} \left(|0\rangle|0\rangle + \sum_{k=1}^{M} |\vec{x}||k\rangle|\vec{x}\rangle\right), \, N_{\tilde{x}} = M|\vec{x}|^{2} + 1 \end{split}$$

2. Perform a swap test.

Using an ancilla, construct :
$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|\tilde{u}\rangle + |1\rangle|\tilde{x}\rangle)$$
, measure the ancilla in $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$
Success $P = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 = \frac{1}{2}(1 - \langle\tilde{u}|\tilde{x}\rangle)$, $\langle\tilde{u}|\tilde{x}\rangle = 1/\sqrt{N_{\tilde{x}}N_{\tilde{u}}}\left(b + \sum_{k=1}^{M} \alpha_k|\vec{x}_k||\vec{x}|\langle\vec{x}_k|\vec{x}\rangle\right)$

3. If $P < \frac{1}{2}$, we classify $|\vec{x}\rangle$ as +1; otherwise, -1.

而对于推理过程,其就是对于内积进行求解,重点使用了介绍的swap test 来实现向量内积的计算模式。

通过量子算法,对于这两个过程的计算都实现了指数级别的加速。

总结

在本课程报告中,首先介绍了一些经典的量子算法,并说明如何利用这些算法求解量子机器学习问题。量子机器学习是量子计算中一个极具吸引力的领域,在一些经典的机器学习算法上,利用量子算法进行改写,已经证明了可以实现指数级别的加速。而如何将两者有机的结合,还是需要回归到一些基本的量子算法上,并通过恰当的构造,得到一个好的实现。

参考文献

- [1] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations[J]. Physical review letters, 2009, 103(15): 150502.
- [2]quantum algorithm for data fitting PRL 109,050505(2012)
- [3] Durr C, Hoyer P. A quantum algorithm for finding the minimum[J]. arXiv preprint quant-ph/9607014, 1996.
- [4] Brassard G, Hoyer P, Mosca M, et al. Quantum amplitude amplification and estimation[J]. Contemporary Mathematics, 2002, 305: 53-74.
- [5] Patrick Rebentrost, Masoud Mohseni, and Seth Lloyd. Quantum Support Vector Machine for Big Data Classification, Physical Review Letters, 113, 130503 (2014).

- [6] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantumprincipal component analysis[J]. Nature Physics, 2014, 10(9): 631.
- [7] Lloyd, S., Mohseni, M. & Rebentrost, P. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning.