



计算机科学

COMPUTER SCIENCE

量子原型聚类

刘翔, 祝静, 仲国强, 顾永建, 崔丽媛

引用本文

刘翔, 祝静, 仲国强, 顾永建, 崔丽媛. 量子原型聚类[J]. 计算机科学, 2023, 50(8): 27-36.

LIU Xiang, ZHU Jing, ZHONG Guoqiang, GU Yongjian, CUI Liyuan. Quantum Prototype Clustering [J]. Computer Science, 2023, 50(8): 27-36.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

[基于人工蜂群的三支 \$k\$ -means 聚类算法](#)

Three-way k -means Clustering Based on Artificial Bee Colony

计算机科学, 2023, 50(6): 116-121. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.220800150>

[面向轻量化医学图像分割网络的神经结构搜索](#)

Neural Architecture Search for Light-weight Medical Image Segmentation Network

计算机科学, 2022, 49(10): 183-190. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.210800052>

[基于特征相似度聚类的空中目标分群方法](#)

Aerial Target Grouping Method Based on Feature Similarity Clustering

计算机科学, 2022, 49(9): 70-75. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.210800203>

[早期量子算法在量子通信、量子纠错等领域的应用](#)

Application of Early Quantum Algorithms in Quantum Communication, Error Correction and Other Fields

计算机科学, 2022, 49(6A): 645-648. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.210400214>

[基于注意力门控图神经网络的文本分类](#)

Text Classification Based on Attention Gated Graph Neural Network

计算机科学, 2022, 49(6): 326-334. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.210400218>

量子原型聚类

刘翔^{1,3} 祝静¹ 仲国强¹ 顾永建² 崔丽媛¹

1 中国海洋大学计算机科学与技术学院 山东 青岛 266100

2 中国海洋大学物理与光电工程学院 山东 青岛 266100

3 中国海洋大学创新教育实践中心 山东 青岛 266100

(liuxiang@stu.ouc.edu.cn)

摘要 经典机器学习算法的量子化重构是量子机器学习领域的一个重要研究方向。聚类作为一类在机器学习领域被广泛应用的算法,其量子化重构也拥有较高的研究价值。目前的量子机器学习算法大多存在复现难度大、难以与经典算法形成直观对比等问题。为解决这些问题,提出了一种量子原型聚类算法(Quantum Prototype Clustering, QPC),该算法可以很方便地在现有的通用性量子计算设备上部署。该方法首先结合单量子位旋转特性,寻找信息损失最小的特征映射方式,使用双维度特征数据制造单量子位旋转;然后,基于多量子位纠缠及纠缠系统坍塌的特性,设计了一种用于制造特定量子纠缠系统和测量纠缠系统坍塌结果的量子线路。根据纠缠系统中受控量子位旋转角和纠缠系统坍塌结果的关系,并结合闵可夫斯基距离的定义,推导了一种用于评估输入样本相似性的量子距离。该量子距离测量模块与经典计算机中的距离计算模块具有相同的输入输出形式,可以不加修改地替换掉原型聚类中的闵可夫斯基距离计算,从而将经典的原型聚类算法重构为 QPC。在来自 kaggle 和 scikit-learn 的多组公开数据集上进行的多次重复实验表明,在平均样本中心距等评价指标上, QPC 与经典的原型聚类算法无明显差别。

关键词: 量子计算;量子机器学习;聚类算法;原型聚类

中图分类号 TP181

Quantum Prototype Clustering

LIU Xiang^{1,3}, ZHU Jing¹, ZHONG Guoqiang¹, GU Yongjian² and CUI Liyuan¹

1 College of Computer Science and Technology, Ocean University of China, Qingdao, Shandong 266100, China

2 College of Physics and Optoelectronic Engineering, Ocean University of China, Qingdao, Shandong 266100, China

3 Innovation Center, Ocean University of China, Qingdao, Shandong 266100, China

Abstract Quantitative reconstruction of classical machine learning algorithms is one of the significant research directions in the field of quantum machine learning. The quantitative implementation of clustering algorithm, which has been widely used in the machine learning area, is worth studying. Most of the current quantum machine learning algorithms suffer from the difficulty of reproduction and the difficulty of forming direct comparisons with classical algorithms. To address these problems, this paper proposes the quantum prototype clustering algorithm that can be easily deployed on existing general-purpose quantum computing devices. Combining the rotation property of single quantum bit (qubit), and finding the feature mapping method with minimal information loss, the single qubit rotation is created using two-dimensional feature data. Then, based on the properties of multi-qubit entanglement and the collapse of the entangled system, a quantum circuit is designed for generating a specific quantum entangled system and measuring the collapsed result of entangled system. Based on the relationship between the rotation angle of controlled qubits in the entangled system and the collapse result of the entangled system, and combined with the definition of Minkowski distance, a quantum distance for evaluating the similarity of input samples is then derived. Both the quantum distance calculation module and its counterpart in classic computer have the same forms of input and output, so that the latter can be replaced by the former without modification, hence the prototype clustering algorithm is quantitatively reconstructed into QPC. Several replicated experiments on multiple publicly available datasets from kaggle and scikit-learn show that the QPC performs similarly to classic prototype clustering algorithm in terms of many evaluation metrics, such as the mean sample-centroid distance.

到稿日期:2022-06-13 返修日期:2022-11-23

基金项目:国家重点研发计划(2018AAA0100400);山东省自然科学基金(ZR2020MF131);山东省重大基础科研项目(ZR2021ZD19);青岛市科技计划项目(21-1-4-ny-19-nsh)

This work was supported by the National Key Research and Development Program of China(2018AAA0100400), Natural Science Foundation of Shandong Province, China(ZR2020MF131), Major Basic R&D Projects in Shandong Province(ZR2021ZD19) and Science and Technology Program of Qingdao(21-1-4-ny-19-nsh).

通信作者:仲国强(gqzhong@ouc.edu.cn)

Keywords Quantum computation, Quantum machine learning, Clustering algorithm, Prototype clustering

1 引言

近年来,信息空间数据量的大幅增长对处理大规模数据的算力提出了更高的要求。同时,现行冯氏结构计算机具有指令串行执行、数据串行输入输出、软硬件完全分离等特征,这天然限制了其拥有更高效率的并行计算能力。为了突破冯氏结构计算能力的限制,研究者尝试构建了光子计算机、量子计算机、DNA 计算机等非冯结构计算机,其中量子计算机利用量子系统的并行计算优势来提高运算效率,是突破冯氏结构束缚的一个比较有前景的方向^[1-3]。相比二进制电子比特,量子比特具有叠加性, N 个电子比特的信息只需 $\log_2 N$ 个量子比特即可表示;又由于量子纠缠性的存在,多量子比特纠缠系统可以表现出比多个单量子比特单独作用更加丰富的信息,实现更复杂的操作。

随着用于大数质因子分解的 Shor 算法^[4]和用于数据搜索的 Grover 算法^[5]的提出,量子计算逐渐展现出其实用性^[6]。量子机器学习属于量子计算和机器学习的交叉领域。对经典机器学习算法(在冯氏结构计算机上实现的机器学习算法,下同)进行量子化重构,并实际部署到量子计算机上,是量子机器学习的一个重要研究方向。随着 2009 年 Harrow 等提出通过量子计算方式求解稀疏且具有良好条件数的线性方程组的 HHL (Harrow-Hassidim-Lloyd)算法^[7],经典机器学习算法的量子化重构逐渐吸引了越来越多研究人员的注意力^[8]。

原型聚类是一类经典的聚类算法^[9]。学习向量量化、高斯混合模型和著名的 k -means 聚类都属于原型聚类。该类算法假设聚类结构能由一组原型(样本空间中具有代表性的点)刻画,通过对原型进行迭代求解获取最终聚类结构,往往具有较强的鲁棒性,实现其量子化算法也具有重要的科学意义。因此,本文对原型聚类算法进行量子化重构,实现了量子原型聚类算法。受量子计算理论以及当前量子硬件的限制,多量子态解纠缠不可避免地会导致更大的系统误差。出于验证量子算法的可行性及有效性之目的,本研究采用以双维度数据制造单量子位旋转的方法,对经典机器学习算法的量子重构进行研究。

目前,由于缺少通用量子计算框架,量子聚类算法的研究并不成熟。一方面,虽然有部分研究在理论上推导了基于距离的量子聚类算法的实现过程及效率^[7,10-11],但受限于当时的硬件条件,这些研究没有在实际量子计算机上进行实验验证。Casper 等的研究详细介绍了通过 QRAM (Quantum Random Access Memory)加载数据到量子计算机进而实现量子算法的过程^[12-14],然而就目前的条件而言,使用 QRAM 加载大规模数据集仍难以实现^[15-17]。同时,以上研究又大都缺乏对实际运行结果,尤其是实际运行结果与理论分析对比的讨论。Xiao 等提出的使用特征映射实现量子位旋转的构建^[18],是目前较为可行的一种方法,但其基于特征压缩和非线性映射的方式会大幅损失有效信息。

本文综合相关研究的优缺点,设计了一种新的 QPC 算法。首先,通过双维度特征的线性映射与归一化制造单量子

位多角度旋转,并将其输入到特定的量子线路,构建量子纠缠系统。通过辅助量子比特测量该量子系统坍缩后两输入量子位的相似概率。然后,基于观测得到的量子位相似概率,并结合闵可夫斯基距离的定义,采用根据量子位旋转角度的差异程度来评估样本相似度的方法,推导出一种量子距离,并将其作为独立距离计算模块。最后,在保持数据输入输出形式不变的情况下,保留并复用原型聚类算法中除距离计算外的其他模块,直接将闵可夫斯基距离计算替换为量子距离测量模块,既简化了量子聚类算法的构建和使用,又便于与经典算法形成直观对比。值得强调的是,由于与经典算法中的距离计算模块保持了一致的数据输入输出形式,该量子距离测量模块可以嵌入到任意基于距离的算法框架中。为验证量子距离测量模块的有效性,本文使用公开数据集进行了距离计算对比实验。实验结果表明,基于本文方法的量子样本相似度与基于欧氏距离(闵可夫斯基距离的一种表现形式)的真实样本相似度达到了 97% 的关联度,这一数值在此前公开的项目中的最大值是 61%^[19]。随后,本文在多组公开数据集进行了多组多次对比实验,结果表明,本文设计的量子原型聚类算法与经典算法在多个指标上的表现不相上下。最后在 IBM 量子计算机上进行了进一步实验,验证了本文提出的量子原型聚类算法在真实量子计算环境中的有效性。

2 相关工作

量子聚类是量子机器学习领域的一个重要分支,而量子机器学习又属于量子计算与机器学习的交叉领域^[20-22]。随着该领域研究的不断深入,许多代表性的工作不断涌现,此处择其要者而述之。

2.1 量子计算

量子计算领域最著名的成果之一是 Shor^[4]于 1994 年提出的在多项式时间内对大数进行质因数分解的 Shor 算法。经典算法求解 N 位十进制整数质因子分解问题的时间复杂度达到了指数级别的 $O\left(\exp\left(\sqrt{\frac{64}{9}n(\log n)^2}\right)\right)$ ^[23], Shor 算法通过量子傅里叶变换方法将该问题的时间复杂度降低至多项式级的 $O(n^3 \log n)$ 。

对于在随机排序数据库中查找特定项这一任务,经典计算机所能达到的最低复杂度为 $O(n)$,而量子算法 Grover 算法则将该数值降低至 $O(\sqrt{n})$ ^[6]。同时,Bennett 等发现量子图灵机对上述搜索任务的复杂度最低值的理论极限就是 $O(\sqrt{n})$,从而证明了 Grover 算法是目前通过量子计算解决同类问题的最优解^[24]。

这两个算法是最早的具有实用意义的量子算法,对后来量子算法的设计具有重要参考意义。

2.2 量子机器学习

求解线性方程 $A\vec{x} = \vec{b}$ 的 HHL 算法^[7]作为量子机器学习领域的奠基之作,已经在多种量子计算设备上得到了验证^[25-27]。该算法采用的相位估计-受控旋转-反相位估计过程

为包括量子支持向量机(Quantum Support Vector Machines, QSVM)和量子主成分分析(Quantum Principal Component Analysis, QPCA)在内的许多机器学习算法所使用,本文提出的量子聚类算法也不例外。

支持向量机是主流的有监督机器学习模型,最初用于执行分类任务。记样本量为 N , 特征维度为 M , 通过在 QRAM^[28] 上计算内核矩阵,使用类似 HHL 的算法求解线性方程等步骤,Rebentrost 等提出的 qSVM 算法可以以 $O(\log NM)$ 的复杂度在量子计算机上执行最小二乘支持向量机(Least Square SVM, LS-SVM)^[29]。

PCA(Principal Component Analysis, PCA)^[30] 是一种重要的无监督机器学习算法,常用于对高维数据降维。对已中心化样本的协方差矩阵进行特征值分解后,取最大的 d 个特征向量即是 PCA 的解。Lloyd 等提出的量子 PCA^[31] 通过对量子密度矩阵 $\rho = \sum_{i=1}^M p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ 的酉算子 $e^{-i\rho t}$ 进行相位估计实现了特征降维^[28]。

2.3 量子聚类算法

在量子聚类方向上,目前已经出现了少量探索性的工作^[17,32],也有部分受量子计算思想启发而探索经典聚类算法新的可能实现方法的工作^[10,33],例如微软团队和 Schuld 等研究者探究了 k -means 算法的量子实现^[34-35];根据量子的叠加特性,Casper 等探索了基于量子特性的模糊聚类方法^[35]。但是基于这些技术的算法在真实数据集上的测试结果不尽人意^[11]。近些年也有一些表现较为出色的量子聚类算法被提出^[16],但是它们往往又因为苛刻且繁多的数学约束而难以通过量子编程实际实现。由于基于距离的原型聚类算法具有广泛适用性和鲁棒性,因此本文在尽可能多地复用经典原型聚类算法框架的基础上,使用自行设计的量子距离测量模块替换原有的闵可夫斯基距离,对原型聚类算法进行量子化重构。该实现具有效率高、易复现等优点。

3 量子原型聚类算法的设计与实现

原型聚类算法的核心是距离计算。此类算法假设聚类结构能通过一组原型刻画,先对原型进行初始化,然后对原型进行迭代更新求解。采用不同的原型表示、不同的求解方法,将产生不同的算法,比如 k 均值聚类、学习向量量化、高斯混合模型等。

考虑到 k 均值聚类是原型聚类算法中最具代表性的算法,同时它又具有实现简单、简洁易懂、适用领域较广、鲁棒性极强等优势,本节从 k 均值算法出发,通过总结分析算法关键步骤,引入本文所研究的量子原型聚类算法。由于两者之间的唯一区别在于进行簇分类时,量子算法需要使用基于受控状态交换门的量子距离对输入的数据点之间的差异性进行比较,因此本文又介绍了相关的量子位旋转制作方法和量子算法线路设计与实现。最后详细推导用于 QPC 的量子距离测量模块。

3.1 算法流程简述

本文以 k 均值聚类算法为例介绍原型聚类算法的量子化过程,首先对 k 均值聚类算法做简要介绍。 k 均值聚类算法

通过迭代训练将一组无标签的数据集划分成不同类簇,并且最小化每个样本点与其聚类中心点之间的距离和。详细流程如算法 1 所示。

算法 1 k 均值聚类算法

输入: 样本 $x^i, (i: 1 \rightarrow m)$, m 是样本总数; 索引 $c^i, (i: 1 \rightarrow m)$, 距离 x^i 最近的聚类中心点索引, 共 K 个可能取值

输出: 聚类中心点 $\mu_k, (k: 1 \rightarrow K)$, K 是聚类中心总数

样本聚类点 $\mu_k^i, (i: 1 \rightarrow m, k: 1 \rightarrow K)$, 样本点 x^i 对应的聚类中心点 μ^i ;

损失函数: $J(c^1, \dots, c^m, \mu_1, \dots, \mu_K) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \|x_i - \mu_{c(i)}\|^2$;

1. 随机初始化 K 个聚类中心 $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_K \in \mathbb{R}^n$;
2. DO: {
3. FOR ($i: 1 \rightarrow m$):
4. 赋值 c^i 为最接近 x^i 的聚类中心点索引 *;
5. FOR ($k: 1 \rightarrow K$):
6. 赋值 μ_k 为所有被分类为 c^i 的数据点 x^i 的平均值;
7. } UNTIL: 损失函数 J 收敛。

算法 1 的核心可以总结为迭代执行如下两步,直至损失函数收敛。

(1) 归类样本点到与之距离最近的聚类中心;

(2) 更新聚类中心为到同一类样本点平均距离最小的位置。

其中第(1)步是 k 均值算法的核心所在,也是其与 QPC 的重要区别,即距离计算方式不同。

通过测量两个量子位的相似概率,本文推导出一种量子距离:根据输入样本的特征值对两个处于 $|0\rangle$ 状态的量子位分别进行特定角度的旋转,这两个旋转角越接近,两个量子位相似的概率就越大,即距离越小。

在未标注数据集中,本文使用 Elbow 方法设置合适的聚类中心点数量:在可接受范围内对每一个可能的 K 值计算一个初始 J (损失函数)值,以 K 为自变量、 J 为因变量绘制曲线,曲线曲率最大的点所对应的自变量(即肘点, elbow points)值取整为最合适的 K 值。

3.2 量子位旋转制作方法

量子位旋转是将经典信息转化成量子信息的关键手段,也是使用 QPC 聚类经典数据的前提。受量子位旋转参数量的限制,本研究需要将多维样本点部署到单量子位,这就面临着需要通过双维度数据制造单量子位旋转的挑战。Casper 等提出以两特征比值作为单一量子位的新特征^[14],通过量子位旋转的方式实现信息的量子化。这一实现虽然简单,但是特征维度的压缩会导致有效信息的大量丢失。此外,Kerenidis 等提出了将更多维的信息装载到 QRAM 的方法^[17],即通过 QRAM 实现信息的量子化。就理论分析而言,这是最有效的实现,但事实上,对特征维度不多的数据而言,QRAM 方法太过复杂,而较高维度特征的数据(文献[17]中基于 δ - k -Means 算法对 MNIST 数据集进行聚类),其实验又难以在现有的通用量子计算机上部署。

本文综合这两种实现的利弊,采取不压缩特征、不使用 QRAM、直接将双维度特征映射为单量子位的旋转参数的方法。首先,在量子计算中,由于概率守恒及全局相位不可检测性,因此只需要两个参数 θ 角和 φ 角进行量子位旋转来表示

一个单量子比特量子态 $|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi}|1\rangle$, 取值范围分别为 $0 \leq \phi \leq 2\pi, 0 \leq \theta \leq \pi$, i 是虚数单位。其次, 为避免特征映射后丢失其可聚类性, 所以选取简单的、单调的映射函数, 比如反正切函数 $x \rightarrow \arctan(x), x \in [0, +\infty)$, 反余弦函数 $x \rightarrow \arccos(x), x \in [-1, 1]$ 等。通过对特征的归一化、取平方(考虑 k 均值算法使用的欧氏距离存在平方项)等处理, 组合出多种不同的映射方式, 进而计算量子距离与欧氏距离的相关度。本文考虑的映射原始特征数据的方式有:

- (1) 归一化到 $[-1, 1]$ 再线性映射到 $[0, \pi]$;
- (2) 零均值化后进行反正切, 再增加 0.5π 到 $[0, \pi]$;
- (3) 直接反正切并增加 0.5π 到 $[0, \pi]$;
- (4) 归一化到 $[0, 1]$ 后反正切, 再线性缩放到 $[0, \pi]$;
- (5) 归一化到 $[0, 1]$ 并取平方, 再线性缩放到 $[0, \pi]$;
- (6) 归一化到 $[-1, 1]$ 后通过反余弦映射到 $[0, \pi]$ 。

本文通过实验对上述 6 种可行的数据映射方式进行验证后, 选出量子距离与相应两点间欧氏距离关联度最高的一种方式来处理原始数据。最后, 将映射后的特征作为量子位的旋转角的参数 θ 和 ϕ , 其直观表现如图 1 的布洛赫球所示, 其中单个非纠缠态的量子位可表示为布洛赫球面上的一个点:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi}|1\rangle.$$

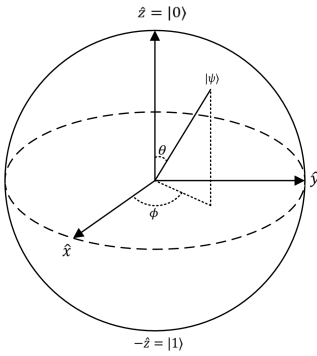


图 1 布洛赫球

Fig. 1 Bloch sphere

3.3 量子距离测量线路设计

量子计算区别于冯氏结构计算的最大特点之一是其依靠具体硬件线路实现算法, 而非算法与硬件分开, 从而需要首先设计出量子距离测量的量子线路。在 IBM Q Experience 平台通过量子编程实现的量子距离测量硬件部署情况示意图如图 2 所示, 其实现逻辑可描述如下。

以输入向量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 进行特征映射后得到的 θ 角和 ϕ 角作为最一般性么正量子门 U_3 的参数, 对初始态量子位 $|0\rangle$ 进行特定角度旋转, 可将向量转化为量子位 $\mathbf{x} \rightarrow |\mathbf{x}\rangle, \mathbf{y} \rightarrow |\mathbf{y}\rangle$ 。将这两个经受控旋转后的量子位加入到量子线路, 再使用受控状态交换门(Controlled-SWAP, CSWAP)进行状态交换, 该步骤将 3 个独立的量子位建立为纠缠态系统。CSWAP 门中起控制作用的量子比特(辅助量子比特)以初始态 $|0\rangle$ 作为输入, 经哈德马门构造为标准叠加态 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 。完成

对 CSWAP 门的控制后, 对控制位进行反哈德马变换(哈德马门的反是其本身)。最后对整个系统进行测量, 观测辅助量子

比特坍塌到稳定态的表现。

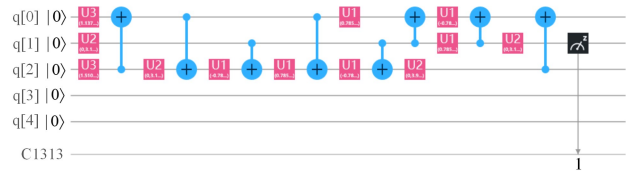


图 2 基于 IBM 5-qubit 量子计算机实现的量子距离测量线路的硬件部署情况示意图

Fig. 2 Schematic of hardware deployment of a quantum distance measurement line based on IBM 5-qubit quantum computer

我们注意到, 图 2 比上文中对量子距离测量线路实现的逻辑描述要复杂得多, 这是因为 IBM Q Experience 中只有最一般性么正量子门 U_3 有对应的物理组件, 退化的一般性么正量子门 U_1 和 U_2 则是限定参数的 U_3 门, 其相应矩阵如式(1)~式(3)所示:

$$U_3(\theta, \varphi, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -e^{i\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i\lambda+i\phi} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$U_2(\varphi, \lambda) = U_3\left(\frac{\pi}{2}, \varphi, \lambda\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\lambda} \\ e^{i\varphi} & e^{i(\varphi+\lambda)} \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$U_1(\lambda) = U_3(0, 0, \lambda) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\lambda} \end{pmatrix} \quad (3)$$

而其他专用量子门则需要依靠一般性量子门组合实现, 因此, 逻辑描述上很简单的一个过程实际却需要多个量子硬件组合才能完成。对整个量子线路系统的运行流程分析如下。

记系统初始状态为 $|0_{\text{anc}}\rangle|\mathbf{x}\rangle|\mathbf{y}\rangle$, 其中 $|0_{\text{anc}}\rangle$ 作为辅助(Ancillary)量子比特。为使受控状态交换门 CSWAP 起作用, 对辅助量子比特做哈德马变换, 成为标准叠加态 $H(|0_{\text{anc}}\rangle) = |+\rangle_{\text{anc}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_{\text{anc}}\rangle + |1_{\text{anc}}\rangle)$ 后再加入 CSWAP 门作为控制位, 即 CSWAP 门作用前的系统状态为:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0_{\text{anc}}\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle + |1_{\text{anc}}\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle) \quad (4)$$

在受控状态交换门 CSWAP 中, 量子比特 $|+\rangle_{\text{anc}}$ 作为控制比特, 当其为 $|1\rangle$ 时, 量子线路可以交换两个向量 $|\mathbf{x}\rangle$ 和 $|\mathbf{y}\rangle$ 。于是经过 CSWAP 系统状态变为:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0_{\text{anc}}\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle + |1_{\text{anc}}\mathbf{y}\mathbf{x}\rangle) \quad (5)$$

对辅助量子比特进行反哈德马变换后, 系统状态为:

$$\frac{1}{2}(|0_{\text{anc}}\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle + |1_{\text{anc}}\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle + |0_{\text{anc}}\mathbf{y}\mathbf{x}\rangle - |1_{\text{anc}}\mathbf{y}\mathbf{x}\rangle) \quad (6)$$

根据辅助量子比特状态简化整合式(6), 得到该量子系统的输入输出关系:

$$|0_{\text{anc}}\rangle|\mathbf{x}\rangle|\mathbf{y}\rangle \rightarrow \frac{1}{2}|0_{\text{anc}}\rangle(|\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle + |\mathbf{y}\mathbf{x}\rangle) + \frac{1}{2}|1_{\text{anc}}\rangle(|\mathbf{x}\mathbf{y}\rangle - |\mathbf{y}\mathbf{x}\rangle) \quad (7)$$

此处需要特别注意辅助量子比特 $|0_{\text{anc}}\rangle$, 该量子比特经过一次哈德马门和一次反哈德马变换, 且两次变换之间仅作为 CSWAP 门的控制位而不参与计算, 按照经典二进制计算

模型思想而言,其应当坍缩为 $H(H(|0\rangle))=H(|+\rangle)=|0\rangle$,即最终观测到 $|0\rangle$ 的概率应当为 1 或无限接近 1。但在量子力学体系中,经过 CSWAP 受控交换门后,辅助比特 $|+\text{anc}\rangle$ 已经和量子化的输入向量 $|x\rangle|y\rangle$ 组成的双量子比特构成了新的纠缠系统。在纠缠建立后对辅助量子比特进行观测,其结果会受量子化输入 $|xy\rangle$ 影响。

3.4 量子距离

在 3.3 小节构建的量子系统中,本文以辅助量子比特坍缩到 $|1\rangle$ 的概率而非经典聚类算法中的欧氏距离,作为两个样本点相似程度的评判。由前者结合闵可夫斯基距离定义,可以推导出适用于 QPC 的量子距离。

由式(7)可知,辅助量子比特坍缩到 $|1\rangle$ 的概率取决于 $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$:

$$P(|1_{\text{anc}}\rangle) = \frac{1}{2}(|xy\rangle - |yx\rangle) \quad (8)$$

由于 n 量子比特量子态可以表示成 n 个量子位的张量积,也即 2^n 维的向量,于是可将式(8)以向量形式表示:

$$P(|1_{\text{anc}}\rangle) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ x_1 y_2 - y_1 x_2 \\ x_2 y_1 - y_2 x_1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

对式(9)做内积可得:

$$P(|1_{\text{anc}}\rangle) = \frac{1}{2}(x_1^2 y_2^2 + x_2^2 y_1^2 - 2 x_1 x_2 y_1 y_2) \quad (10)$$

考虑概率守恒又有:

$$\begin{aligned} y_1^2 + y_2^2 &= x_1^2 + x_2^2 \\ &= x_1^2 y_1^2 + x_1^2 y_2^2 + x_2^2 y_1^2 + x_2^2 y_2^2 = 1 \end{aligned} \quad (11)$$

结合式(10)和式(11),对该量子系统输出的辅助量子比特单独进行观测(也称测量),其最终状态坍缩为基态 $|1\rangle$ 的概率就可以简化为:

$$P(|1_{\text{anc}}\rangle) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} |\langle x|y\rangle|^2 \quad (12)$$

其中, $\langle x|y\rangle$ 表示输入量子位 $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$ 做内积。

于是可以得到结论:输入向量之间的相似度越低, $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$ 之间的内积绝对值越小,观测到辅助量子比特坍缩为 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率 $P(|1_{\text{anc}}\rangle)$ 就越大(显然最大为 $\frac{1}{2}$)。这一点可以通过实验更直观地体现,图 3 子图从左到右两个量子位的旋转角 θ 分别取为 $\pi-\pi, \pi-0.5\pi$ 和 $\pi-0$,柱状图横轴最后一位表示辅助量子比特坍缩结果,纵轴是概率。如图所示,当两个量子都取 $\varphi=0$,其中一个量子位固定 $\theta=0$ 时,当另一个量子位的旋转角 $\theta=\pi$,即认为这两个量子位表现相同,相似度最高,图 3 所示的实际观测结果也显示辅助量子比特坍缩到 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率为 0;当另一个量子位旋转角 $\theta=\frac{\pi}{2}$,辅助量子比特坍缩到 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率超过了前者,达到了 $\frac{1}{4}$;当另一个量子位旋转角 $\theta=0$,辅助量子比特坍缩到 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率达到了最大值 $\frac{1}{2}$ 。从而得到量子聚类线路给出的辅助量子比特坍缩到 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率与输入向量 x 和 y 的相似度是负相关的。

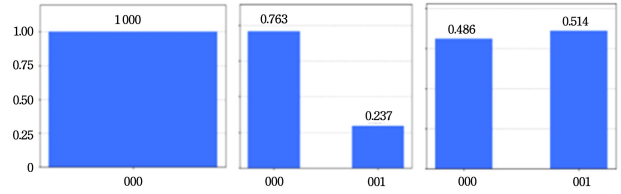


图 3 对量子聚类算法中两个受控量子位以不同的 θ 角旋转后坍缩到稳定态表现的观测

Fig. 3 Observation of the collapse to steady state performance of two controlled quantum bits rotated at different θ angles in quantum clustering algorithm

原型聚类算法认为,数据点之间距离越小,其相似度越高。从而在 QPC 中,应当使观测后的辅助量子比特坍缩到 $|1_{\text{anc}}\rangle$ 的概率和输入量子比特 $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$ 之间的量子距离呈正相关。考虑闵可夫斯基距离:

$$D_m = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (13)$$

当取 $p=2, n=2$, 闵可夫斯基距离转化为用于计算双维度样本点之间距离的欧氏距离:

$$D_e = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2} = \sqrt{2 - 2\langle x, y \rangle} \quad (14)$$

其中, $\langle x, y \rangle$ 表示向量 x 和 y 的内积。结合式(11)、式(12)和式(14),最终可以定义量子距离为:

$$D_q = \sqrt{(2)2, \langle x|y\rangle} \quad (15)$$

4 实验与结果分析

基于来自 kaggle 和 scikit-learn 的多组公开数据集,本节首先展示在本地环境进行的量子 and 经典算法的对比实验结果,并对分析两种聚类算法的表现。此外,本文还在云端量子模拟环境和 5-qubit 真实量子计算机中进行了典型数据集上的实验,并简要总结了量子算法在量子模拟机/计算机中的表现。其中,量子算法中单次执行距离计算线路的重复次数为 1024 次。

4.1 数据集

实验使用到的数据集包括来自 Kaggle 的市场细分数据集 Mall_Customers(下文简称为 Mall)、基于 scikit-learn 创建的随机聚类数据集,以及来自 scikit-learn 的 Toy, Iris 和 Blob 聚类数据集。5 个数据集的整体信息如表 1 所列,其中 Mall 属于未标注数据集,需要先行选择合适的聚类中心点数量,其余 4 组数据集已有类别划分。

表 1 实验使用到的 5 组数据集

数据集	Mall	Iris	Blob	Random
样本量和原始特征数	200×5	150×2	200×2	450×2
标签	无	有	有	有
最佳聚类点数	5	2	2	3

以特征较多的 Mall 为例,首先通过数据分析库 pandas 提取该数据集的部分数据,如表 2 所列。可以观察到该数据集的特征数在个位数级别。为了说明是否存在明显的聚类关系,我们先在常规的笛卡尔坐标系中,对该数据集各特征两两之间的关系进行可视化分析,以对各特征之间的关系产生

感性认识,可视化结果如图 4 所示。可以看出,以笛卡尔坐标系为参考, CustomerID 与 Spending Score、Annual Income 与 Spending Score 这两组特征之间有明显的可聚类关系;并且 CustomerID 与 Annual Income 之间符合连续变化的、近乎一一对应的某种函数关系。从而对于该数据集可以考虑只使用其中一组(选择 Annual Income 与 Spending Scores)特征进行聚类分析。

表 2 Mall_Customers 数据集部分数据
Table 2 Part of data from Mall_Customers

ID	Gender	Age	Annual Income_k\$	Spending Score_1_to_100
1	Male	19	15	39
2	Male	21	15	81
3	Female	20	16	6
4	Female	23	16	77
5	Female	31	17	40

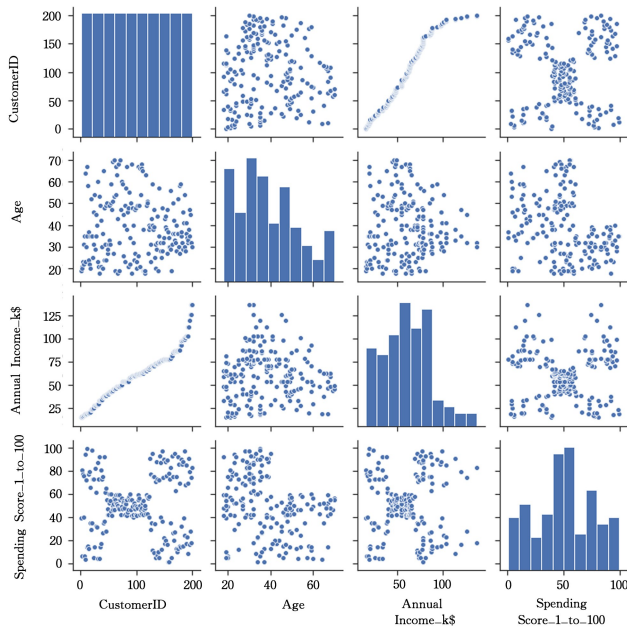


图 4 Mall_Customers 数据集各特征之间的关系

Fig. 4 Relationship between the features of Mall_Customers dataset

Mall 属于无标签数据集,为了加快算法收敛速度、优化聚类效果,需要自行设定聚类中心点数量。本文通过 Elbow 方法选择合适的聚类中心点数量 K 。在 Mall 数据集中,对 Annual Income 和 Spending Score 两项特征进行聚类,设置聚类中心点数量范围为 1~20,分析结果如图 5 所示。显然,在聚类中心点数量取值为 5 时,损失曲线曲率达到最值。Elbow 方法分析的结果与观测结果相互印证,因此聚类中心点数量取 5。

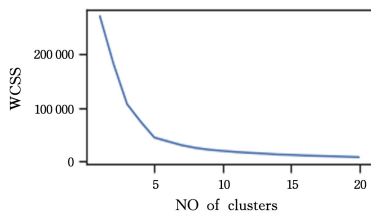


图 5 Elbow 方法分析 Mall 数据集最佳聚类中心点曲线

Fig. 5 Best clustering centroid curve of Mall dataset obtained by Elbow method analysis

其余 4 组随机创建的和来自 scikit-learn 库的数据集则简单得多。一方面,由于其已经是二维特征数据集,无需进行分析和选择特征;另一方面,数据本身具有类别标签,可以用来评判聚类准确率。但需要指出的是,量子算法实现过程中数据集需要被映射到适合量子旋转的范围。

根据 3.2 节对量子位旋转制作方法的介绍,本文基于 Mall 数据集对最佳特征映射方法进行探索。首先,随机抽取 20 个样本点以 3.2 小节提到的 6 种不同的映射方式产生旋转参数 θ 和 φ ;通过该参数制造量子位旋转并输入到量子距离测量模块后可以测量样本点两两之间的量子距离。以 pandas 库中的 corr 方法衡量两组数据之间的相关度,20 个样本点两两之间的欧氏距离和量子距离相关度如表 3 所列,其中,1)归一化到 $[-1, 1]$ 后再线性映射到 $[0, \pi]$;2)零均值化后反正切再增加 0.5π 到 $[0, \pi]$;3)直接反正切后增加 0.5π 到 $[0, \pi]$;4)归一化到 $[0, 1]$ 后反正切再线性缩放到 $[0, \pi]$;5)归一化到 $[0, 1]$ 后取平方再线性缩放到 $[0, \pi]$;6)归一化到 $[-1, 1]$ 后反余弦到 $[0, \pi]$ 。由表 3 易知,将原始特征作归一化缩放后再线性映射为量子位在布洛赫球上的旋转参数,得到的量子距离与反应样本点在笛卡尔系真实间距的欧氏距离最为接近。

表 3 不同特征比值映射方式对应的量子距离与相应两点间欧氏距离的关联度

Table 3 Correlation between the quantum distance corresponding to different eigenratio mapping methods and the corresponding Euclidean distance between two points

映射方式	1	2	3	4	5	6
关联度/%	97	94	93	92	91	87

采用最佳关联度对应的特征比值映射方式,图 6 给出了 20 个样本点两两之间共 400 组的量子距离与欧氏距离的分布关系图,可以看出欧氏距离与量子距离呈近似线性的正相关关系。其他数据集依照此方法进行特征映射。

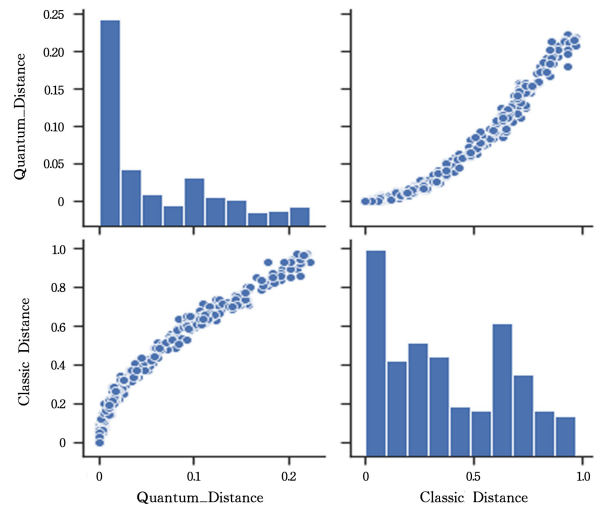


图 6 20 个样本点两两之间的欧氏距离和量子距离的分布关系图
Fig. 6 Plot of Euclidean distance and quantum distance distribution between two of 20 sample points

4.2 量子算法与经典算法的对比

将使用闵可夫斯基距离的原型聚类算法和使用了量子

距离的 QPC 两种算法在 5 组数据集上的表现进行对比分析 (其中原型的表示和求解方法为 k 均值聚类算法),图 7 为各

算法在数据集上的聚类结果散点图,其中左侧为经典算法,右侧为量子算法。

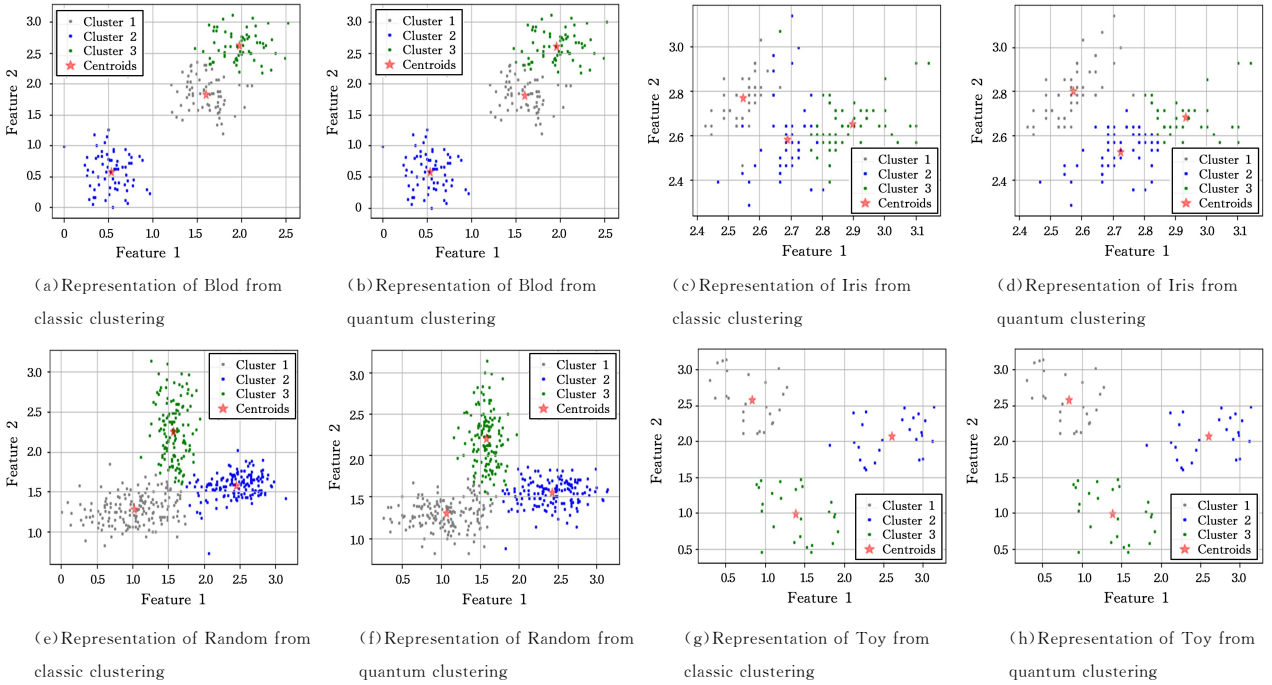


图 7 经典算法与量子在 Bloch, Iris, Random, Toy 数据集上执行聚类的结果散点图

Fig. 7 Scatter plot of the results of classical algorithm and quantum performing clustering on Bloch, Iris, Random, and Toy

图 8 为各算法在计算过程的平均样本中心距/准确率-迭代次数关系折线图。图 8(a) — 图 8(d) 分别给出了算法在 Toy, Random, Iris, Bloch 这 4 个数据集上的表现,4 个子图中均以左侧轴为平均样本中心距,右侧轴为聚类准确率。蓝色/红色折线分别为经典/量子算法的平均样本中心距,绿色/黄色折线分别为经典/量子算法的聚类准确率。观察两组组图可以发现,在样本点分布有明显边界的 Toy 和 Bloch 数据集上,量子算法与经典算法实现的聚类效果相差无几,

并且如图 8 中 Toy 和 Bloch 子图所示,聚类算法执行过程中的指标变化也几乎一致,这说明量子算法与经典算法对强可聚类数据集的处理效果无明显差别。而在样本点无明显分界的 Random 和 Iris 数据集上,两种算法的最终实现结果有显著差别。结合样本点的分布范围和数据量,就图 8 中 Random 和 Iris 子图所示的折线来看,量子算法和经典算法表现出较明显的差别,但并没有哪一种算法绝对优于另一种。

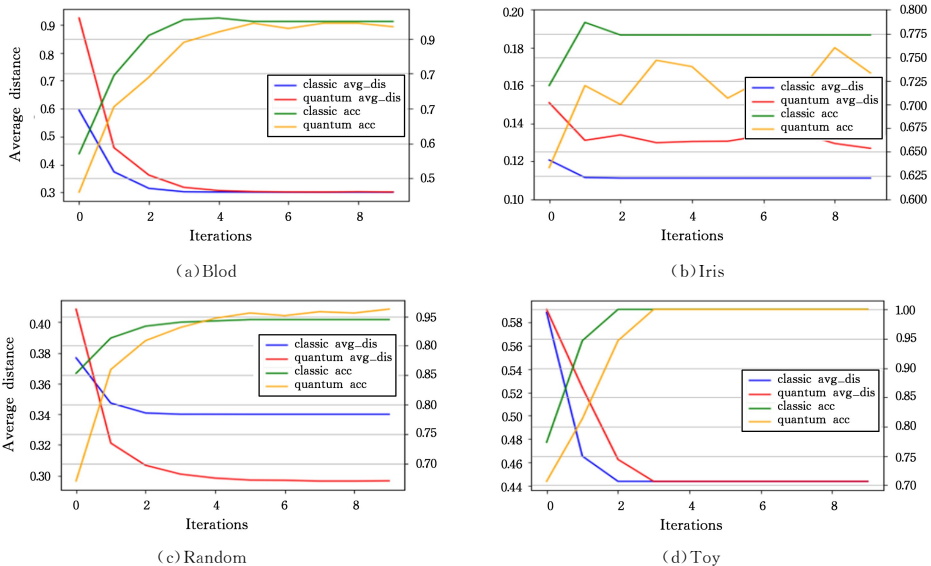


图 8 经典与量子两种原型聚类算法在部分数据集的计算过程中平均样本中心距/准确率-迭代次数折线图

(电子版为彩图)

Fig. 8 Mean sample centroid/accuracy-iteration line graphs of the classical and quantum prototype clustering algorithms for selected datasets

4.3 多次重复实验的表现

实际上,图7、图8所展现的是典型的、具有代表性的结果。从多次重复实验的表现来看,经典算法或量子算法并没有各自的“优势”数据集,即其在该数据集中的表现并没有恒优于另一种算法。我们仍以 Mall 数据集为例,分析多次重复实验中的算法表现,图9给出了4次典型对比实验的损失-迭代关系折线图,蓝色线代表经典算法的表现,红色线代表 QPC 的表现。可以看出,即使在同一个

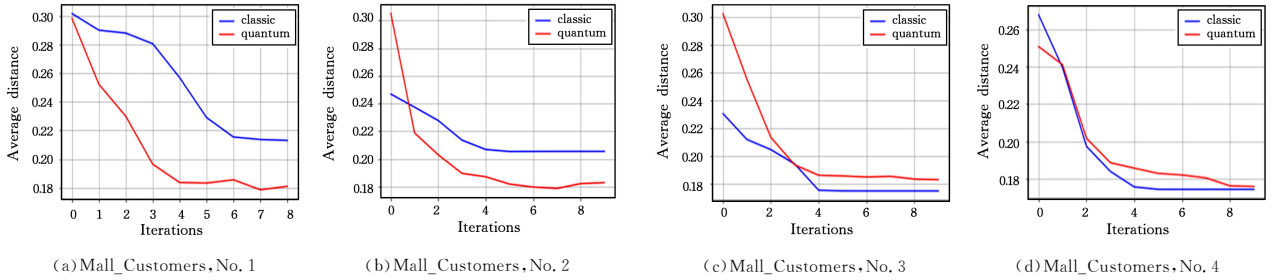
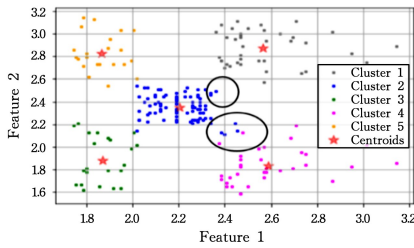


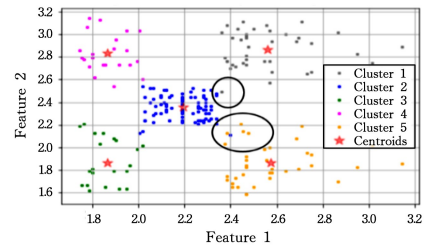
图9 在 Mall_Customers 数据集上多次重复执行原型聚类算法和 QPC 得到的 4 幅典型的平均样本中心距-迭代次数折线图

(电子版为彩图)

Fig. 9 Four typical mean sample centroid-iteration count line plots obtained by multiple iterations of the prototype clustering algorithm and QPC on Mall_Customers dataset



(a) Clustering result obtained by quantum algorithm in Mall



(b) Clustering result obtained by classic algorithm in Mall

图10 在 Mall 数据集执行量子原型聚类算法与经典原型聚类算法的结果对比

Fig. 10 Results of executing the quantum prototype clustering algorithm versus the classical prototype clustering algorithm on Mall dataset

为减小量子计算随机性对结果的影响,本文对每组数据集都进行 10 次重复实验,结果如表 4 所列,其中原型 d 的表示和求解方法为 k 均值。

表 4 5 组数据集上分别重复 10 次量子/经典原型聚类算法对比实验的结果

Table 4 Results of ten repeated quantum/classical prototype clustering algorithm comparison experiments on each of the five data sets

数据集	Toy	Random	Iris	Blob	Mall
量子算法平均样本中心距	0.442	0.316	0.122	0.300	0.183
量子算法平均准确率	1.00	0.955	0.755	0.959	—
经典算法平均样本中心距	0.442	0.310	0.109	0.305	0.178
经典算法平均准确率	1.00	0.962	0.775	0.950	—
量子算法表现更好的次数	—	3	3	6	4

可以看出,在多数数据集上的多组重复实验中,QPC 在 Mall, Random, Iris 数据集上表现优于经典算法的次数明显比 Toy 和 Blob 少。这说明在本研究的实验环境下,在较复杂的经典数据集中,QPC 的表现仍稍弱于经典算法。需要强调的是,这一方面是因为当前通用量子计算平台更适用于处理具有量子效应的问题,对经典机器学习算法部署的支持不够;另一方面是由于通用量子计算平台对经典数据的输入和读取

数据集上,多次实验中的量子算法和经典算法的表现也略有差别,互有优劣。随机选择一组量子算法与经典算法对 Mall 数据集进行聚类的结果散点图进行比对,结果如图 10 所示,其中左图是量子算法,右图是经典算法。只有在被圆圈围住的小部分类别交汇区域,量子算法与经典算法会产生些许差别。这是单次量子距离测量具有随机性导致的,如果在类似的有强可聚类性特征的数据集上多次执行基于欧氏距离的聚类算法,其结果通常不会有差别。

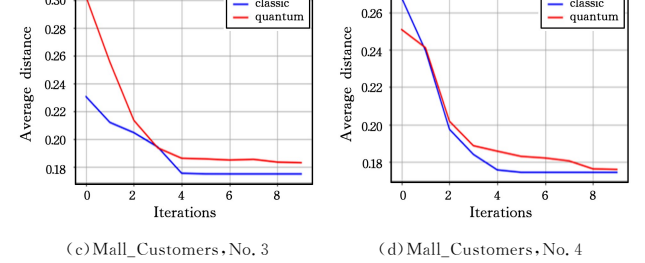


图10 在 Mall 数据集执行量子原型聚类算法与经典原型聚类算法的结果对比

(电子版为彩图)

Fig. 10 Results of executing the quantum prototype clustering algorithm versus the classical prototype clustering algorithm on Mall dataset

的支持仍不完善,任何原始数据输入量子系统之前都不进行量子化处理,这不可避免地会损失部分原始信息。总体而言,在当前有限的量子计算条件下,QPC 达到了和当前著名原型聚类算法几乎一致的结果,这说明了本文提出的 QPC 的有效性。

4.4 真实量子环境中的表现

本文在本地模拟环境、云端量子模拟机和 IBM 量子计算机 3 种环境下进行了 Mall 数据集的量子原型聚类算法实验,结果如表 5 所列。由表 5 可知,就 3 种量子环境而言,使用云端量子模拟机和真实量子计算机进行 QPC 聚类的效果与本地模拟环境并无明显差别。究其原因,就数据集而言,无论是量子算法还是经典算法,它们在该数据集上的聚类结果几乎都达到了最佳状态,没有更多的上升空间;从较为普遍的观点来看,由于本文使用的经典数据没有进入复空间,其本身亦无量子噪声干扰,因此量子计算机/模拟机对有量子效应问题的处理优势无法展现。关于量子模拟机和量子计算机的总耗时远大于本地环境和经典算法的问题,一方面是由于使用 IBM Q Experience 执行量子算法时每次计算都要重新搭建硬件线路,无法实现保留线路并多次复用。具体而言,使用量子模拟机时,每次距离计算都需要重新搭建线路、上传数据,因此,

进行 200 个样本点、5 个聚类中心、10 次迭代共 1 万次距离计算需要上传 1 万次数据,重新搭建 1 万次硬件线路。搭建和解除线路的时间会算入运行时间中。特别地,由于现阶段量子计算机本身更多地被用于解决粒子物理学、物理化学等具有量子效应的问题,因此那些用于解决复杂的有量子力学效应问题^[5-6]的线路的复杂程度不会明显高于、甚至会低于本文研究的用于解决经典数据问题的量子机器学习算法线路^[36]。另一方面,由于量子距离的衡量依赖于对同一量子系统数千次坍塌结果的统计,也就是说实验中进行 1 万次量子距离测量,会执行量子线路千万余次。而经典算法完成一次欧氏距离计算只需要 CPU 执行一次二维向量平方和运算。最后,如图 11 所示,由于目前量子计算资源有限,向 IBM 量子计算机部署实验时,任务排队和线路合法性验证会消耗极为可观、甚至远超过线路运行本身的时间(根据前方任务序列的长度,排队和合法性验证时间从数毫秒到数分钟乃至十余分钟不等)。刨除线路合法性验证和任务排队时间后的纯计算时间如表 5 所列,可以发现量子算法的纯计算耗时远小于总耗时。虽然其与经典算法的计算耗时仍有显著差距,但事实上这是当前量子计算框架和量子硬件研究仍未成熟、缺少工程优化等原因所导致的,并非是量子计算本身的性能缺陷。就验证量子原型聚类算法在不同环境中的有效性而言,本文研究显然是成功的。

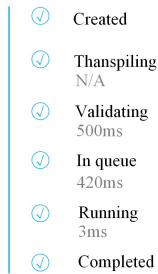


图 11 量子计算机单次执行量子计算的流程和时间消耗

Fig. 11 Process and time consumption of quantum computers performing a single quantum computation

表 5 Mall 数据集重复 10 次量子/经典聚类算法实验的结果

Table 5 Results of ten repeated quantum/classical clustering algorithm experiments on Mall data set

实验环境	本地	云端	量子机	经典算法
平均样本中心距	0.179	0.183	0.183	0.183
总耗时	269 s	3 d	5 d	0.19 s
计算耗时/s	14	30	30	0.19

结束语 本文提出了一种量子原型聚类算法,通过对两个量子位之间的相似程度进行度量,推导出了一量子距离,并将量子距离测量模块化。该模块的数据输入输出形式与经典算法完全一致,且由于量子距离定义与欧氏距离定义具有相当的一致性,该模块可以以“即插即用”的方式直接替换掉经典的原型算法中的闵可夫斯基距离计算模块,将经典的原型聚类算法进行量子化重构。相比从头设计一整套独立的量子算法,本文算法的实现更加易于复现、更容易与经典算法形成直接对比。在多个公开数据集进行的多组重复实验证明,本文提出的量子原型聚类算法在低特征维度的数据集上取得

了与经典算法几乎一致的聚类结果。最后,本文还在量子模拟机和真实量子计算机上进行了量子原型聚类算法的实际实验,探究了现阶段量子算法在真实量子计算环境中的实际运行效率,并对其实际运行时间与理论分析之间的差距进行了分析解释。

近年来,研究人员对量子计算的深入研究,尤其是国内量子计算领域的重大突破^[37],为量子机器学习算法的研究创造了良好条件。本文提出的量子原型聚类算法对基于双量子位纠缠的量子无监督学习算法研究的一个可能的方向进行了较为充分的研究,可以作为更先进量子机器学习算法研究的参考。

由于量子状态数与量子比特数呈指数型对应关系,当量子比特数进一步增多时,量子线路设计将更加复杂,测量误差将更加难以预测。但受 IBM 量子机所能提供的最大量子位限制,本文并没有对 3 个及以上量子位纠缠线路进行过多讨论。这无疑是进一步研究必须要讨论和验证的。

参考文献

- [1] CILIBERTO C, HERBSTER M, IALONGO A D. Quantum machine learning: a classical perspective [J]. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2018, 474(2209): 20170551.
- [2] BIAMONTE J, WITTEK P, PANCOTTI N, et al. Quantum machine learning [J]. Nature, 2017, 549(7671): 195-202.
- [3] MISHRA N, KAPIL M, RAKESH H. Quantum Machine Learning: A Review and Current Status [J]. Data Management, Analytics and Innovation, 2019, 2: 101-145.
- [4] SHOR W P. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring [C] // Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, 1994: 124-134.
- [5] GROVER L K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack [J]. Physical Review Letters, 1997, 79(2): 325.
- [6] HUANG Y M, LEI H, LI X Y. Overview of Quantum machine learning algorithms [J]. Journal of Computer Science, 2015, 41(1): 145-163.
- [7] HARROW A W, HASSIDIM A, LLOYD S. Quantum algorithm for linear systems of equations [J]. Physical Review Letters, 2009, 103(15): 150502.
- [8] BHARTI K, HAUG T, VEDRAL V. Machine Learning meets Quantum Foundations: A Brief Survey [J]. arXiv: 2003. 11224, 2020.
- [9] ZHOU Z H. Machine Learning [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2016: 202-211.
- [10] WIEBE N, BRAUN D, LLOYD S. Quantum algorithm for data fitting [J]. Physical Review Letters, 2012, 109(5): 050505.
- [11] CHILDS A M, KOTHARI R, SOMMA R D. Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision [J]. SIAM Journal on Computing, 2017, 46(6): 1920-1950.
- [12] SCHULD M, SINAYSKIY I, PETRUCCIONE F. An introduction to quantum machine learning [J]. Contemporary Physics,

- 2015,56(2):172-185.
- [13] WITTEK P. Quantum machine learning: What quantum computing means to data mining[M]. Academic Press,2014:132-133.
- [14] CASPER E,HUNG C C,JUNG E,et al. A quantum-modeled k-means clustering algorithm for multi-band image segmentation [C]//Proceedings of the 2012 ACM Research in Applied Computation Symposium, Texas,USA,2012:156-163.
- [15] ARUNACHALAM S,DE W R. Guest column:A survey of quantum learning theory [J]. ACM SIGACT News, 2017, 48(2):41-67.
- [16] ADCOCK J, ALLEN E, DAY M, et al. Advances in quantum machine learning[J]. arXiv:1512.02900,2015.
- [17] KERENIDIS I, LANDMAN J, LUONGO A, et al. Q-means: a quantum algorithm for unsupervised machine learning [J]. arXiv:1812.03584,2019.
- [18] XIAO J,YAN Y,ZHANG J, et al. Quantum-inspired genetic algorithm for k-means clustering[J]. Expert Systems with Applications,2010,37(7):4966-4973.
- [19] ENNIOGI T. Quantum K-Means [EB/OL]. https://github.com/enniogit/Quantum_K-means.
- [20] ZHANG Y, NI Q. Recent advances in quantum machine learning [J]. Quantum Engineering,2020,2(1):e34.
- [21] O'QUINN W, MAO S. Quantum Machine Learning: Recent Advances and Outlook[J]. IEEE Wireless Communications, 2020, 27(3):126-131.
- [22] DUNJKO V, WITTEK P. A non-review of Quantum Machine Learning: trends and explorations[J]. Quantum Views,2020,4:32-45.
- [23] POMERANCE C. A tale of two sieves[J]. Notices of the American Mathematical Society,1996,43(12):1473-1485.
- [24] BENNETT C H, BERNSTEIN E, BRASSARD G, et al. Strengths and weaknesses of quantum computing [J]. SIAM Journal on Computing,1997,26(5):1510-1523.
- [25] BARZ S, KASSAL I, RINGBAUER M, et al. A two-qubit photonic quantum processor and its application to solving systems of linear equations[J]. Scientific Reports,2014,4:6115-6120.
- [26] CAI X D, WEEDBROOK C, SU Z E, et al. Experimental quantum computing to solve systems of linear equations[J]. Physical Review Letters,2013,110(23):230501.
- [27] ZHENG Y, SONG C, CHEN M C, et al. Solving systems of linear equations with a superconducting quantum processor [J]. Physical Review Letters,2017,118(21):210504.
- [28] LLOYD S, MOHSENI M, REBENTROST P. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning[J]. arXiv:1307.0411,2013.
- [29] REBENTROST P, MOHSENI M, LLOYD S. Quantum support vector machine for big data classification [J]. Physical Review Letters,2014,113(13):130503.
- [30] WOLD S, ESBENSEN K, GELADI P. Principal component analysis [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1987,2(1/2/3):37-52.
- [31] LLOYD S, MOHSENI M, REBENTROST P. Quantum principal component analysis[J]. Nature Physics,2014,10(9):631-633.
- [32] SENTÍS G, BAGAN E, CALSAMIGLIA J, et al. Quantum change point [J]. Physical Review Letters, 2016, 117 (15): 150502.
- [33] ADACHI S H, HENDERSON M P. Application of quantum annealing to training of deep neural networks [J]. arXiv:1510.06356,2015.
- [34] SCHULD M, KILLORAN N. Quantum machine learning in feature Hilbert spaces[J]. Physical Review Letters,2019,122(4):040504.
- [35] CASPER E,HUNG C C. Quantum modeled clustering algorithms for image segmentation[J]. Progress in Intelligent Computing and Applications,2013,2(1):1-21.
- [36] ZHANG H, MAO S, WU W, et al. A Review of quantum computing complexity theory [J]. Journal of Computer Science, 2016,39(12):2403-2428.
- [37] ZHONG H, HUI W, DENG Y, et al. Quantum computational advantage using photons[J]. Science,2020,370:1460-1463.



LIU Xiang, born in 1998, master candidate, is a member of China Computer Federation. His main research interests include lightweight neural networks designing, underwater vision system and quantum machine learning.



ZHONG Guoqiang, born in 1981, Ph.D, professor, Ph.D supervisor, is a member of China Computer Federation. His main research interests include pattern recognition, machine learning and image processing.

(责任编辑:何杨)