

面向含噪中规模量子处理器的量子机器学习

石金晶¹⁾ 肖子萌^{1),2)} 王雯萱^{2),3)} 张师超³⁾ 李学龙⁴⁾

¹⁾(中南大学电子信息学院 长沙 410004)

²⁾(中南大学计算机学院 长沙 410083)

³⁾(广西师范大学广西多源信息挖掘与安全重点实验室 广西 桂林 541004)

⁴⁾(中国电信人工智能研究院 北京 100033)

摘 要 量子计算与人工智能结合,在增强模型表达能力、加速和优化机器学习等方面可能产生颠覆性影响,有望突破人工智能领域所面临的不可解释性差、最优解难等问题,量子人工智能已成为国内外重点关注的学科前沿。量子机器学习是量子人工智能领域的重要研究内容,它将量子计算基础理论与机器学习原理相结合,以实现具有量子加速的机器学习任务。随着量子计算软硬件的快速发展,含噪中规模量子(NISQ)处理器的学习优势被证明,国内外学者相继提出一系列量子机器学习方法,以挖掘量子计算助力人工智能技术创新应用。然而,当前的量子机器学习仍局限于对算法的优化,缺乏系统层面的理论架构,仍有许多科学问题亟待解决。本文首先从量子机器学习系统表征角度出发,建立量子机器学习系统的层次模型,概括和总结了面向各类任务的量子机器学习方案,分析了量子机器学习在提高经典算法速度等方面可能体现的“量子优势”。接着根据量子机器学习系统的层次结构,从原理层、计算层、应用层这三个方面对现有量子机器学习方法进行了总结与梳理,系统性地分析和讨论了其中的关键问题与解决方案。最后,结合当前阶段量子人工智能的发展特点,重点分析了量子机器学习领域面临的科学问题与挑战,并对未来该领域的发展趋势进行了深入分析与展望。

关键词 量子计算;量子人工智能;量子机器学习;量子算法;含噪中规模量子处理器

中图法分类号 TP18

DOI号 10.11897/SP.J.1016.2025.00602

Quantum Machine Learning with Noisy Intermediate-Scale Quantum Processors

SHI Jin-Jing¹⁾ XIAO Zi-Meng^{1),2)} WANG Wen-Xuan^{2),3)} ZHANG Shi-Chao³⁾ LI Xue-Long⁴⁾

¹⁾(School of Electronic Information, Central South University, Changsha 410004)

²⁾(School of Computer Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083)

³⁾(Guangxi Key Laboratory of Multi-Source Information Mining and Security, Guangxi Normal University, Guilin, Guangxi 541004)

⁴⁾(Institute of Artificial Intelligence (Tele AI), China Telecom, Beijing 100033)

Abstract Quantum computing is a new type of computing model that follows the laws of quantum mechanics. By leveraging the characteristics of quantum entanglement and superposition, it can theoretically achieve exponential acceleration of classical algorithms. The combination of quantum computing and artificial intelligence may have a transformative impact on enhancing model representation ability, accelerating and optimizing machine learning. It is expected to break through the problems of poor interpretability and difficulty deriving optimal solutions in the field of artificial intelligence. Quantum artificial intelligence has increasingly become a technological highland that countries around the world compete for. More and more researchers have begun to explore a breakthrough to help the development of artificial intelligence through quantum computing.

收稿日期:2024-05-29;在线发布日期:2025-01-08。本课题得到国家自然科学基金(62272483)、湖南省自然科学基金杰出青年基金(2023JJ10078)和湖南省研究生科研创新项目(CX20240266)资助。石金晶,博士,教授,中国计算机学会(CCF)杰出会员,主要研究领域为量子计算、量子机器学习。E-mail: shijinjing@csu.edu.cn。肖子萌,硕士研究生,主要研究方向为量子计算、量子机器学习。王雯萱(通信作者),博士研究生,主要研究方向为量子计算、量子机器学习。E-mail: wangwenxuan0524@csu.edu.cn。张师超,博士,教授,中国计算机学会(CCF)高级会员,主要研究领域为大数据处理、人工智能。李学龙(通信作者),博士,教授,主要研究领域为图像处理、人工智能。E-mail: xuelong_li@ieee.org。

Quantum machine learning is an important research area in the field of quantum artificial intelligence, which combines the basic theory of quantum computing with the principles of machine learning. It is expected to use the potential ‘quantum advantage’ to break through the problems that are difficult to solve by classical algorithms and improve the computational efficiency of machine learning models. With the rapid development of quantum computing hardware and software, the learning advantages of noisy intermediate-scale quantum (NISQ) processors have been proved. Scholars both domestically and internationally have successively proposed a series of quantum machine learning methods to explore the innovative applications of quantum computing to help the development of artificial intelligence technology. In the future, with the fault tolerance, generalization, and large-scale development of quantum computing devices, the ‘quantum advantage’ of quantum machine learning is expected to be fully explored, and then applied to engineering and industry, bringing new transformations to the field of artificial intelligence. However, quantum machine learning is still limited to algorithm optimization and lacks a theoretical framework at the system level, and there are still many scientific problems to be solved. This paper systematically summarizes and discusses the research progress of quantum machine learning algorithms, parameterized quantum circuits, quantum neural networks, and hybrid quantum-classical frameworks for NISQ processors both domestically and internationally. From the perspective of representing quantum machine learning systems, the hierarchical model of quantum machine learning systems is established, and the quantum machine learning schemes for various tasks are summarized. The ‘quantum advantage’ that quantum machine learning may reflect in improving the speed of classical algorithms is analyzed. Then, according to the hierarchical structure of quantum machine learning systems, the existing quantum machine learning methods are summarized and sorted out from the three aspects of principle layer, calculation layer, and application layer, and the key problems and solutions are systematically analyzed and discussed. Combined with the development characteristics of quantum artificial intelligence in the current stage, the scientific problems and challenges faced in the current field of quantum machine learning are analyzed from six aspects: the advantage limitation of quantum machine learning, data coding, design and optimization of quantum neural network, fault-tolerant quantum machine learning, security of quantum artificial intelligence, and applications of quantum machine learning. Finally, the future development trends in this field are analyzed and prospected.

Keywords quantum computing; quantum artificial intelligence; quantum machine learning; quantum algorithm; noisy intermediate-scale quantum processor

1 引言

量子计算是一种遵循量子力学规律的新型计算模式,通过充分发挥量子的纠缠和叠加等特性,在理论上可以实现对经典算法的指数级加速^[1-2]。1985年,Deutsch^[3]首次提出了量子图灵机模型;1993年,Yao^[4]证明了量子图灵机模型与量子线路模型在计算复杂性上的等价性,奠定了量子计算机的理论基础;1998年,量子算法在第一批基于量子力学原理的可运行计算机上实现了首次实验演示^[5],许

多研究者相信在未来量子计算将成为一种有效的信息存储与处理技术,量子计算机的研究从此开始飞速发展。2012年“量子优势(Quantum Supremacy)”的概念被提出^[6],并在2019年由Google团队在实验上进行了验证^[7],中国科学技术大学的潘建伟团队基于量子计算原型机“九章”^[8]和“祖冲之号”^[9]在光量子计算及超导量子计算体系上进一步实现了复杂度更高的“量子优越性”,含噪中规模量子(Noisy Intermediate Scale Quantum, NISQ)技术的迅速发展使得量子计算成为多国战略布局的重点领域。随着量子计算以可观的速度向规模化与容错化迈

进^[10],基于量子计算的人工智能技术也将为处理实际任务带来更多的可能性。

量子计算与人工智能结合,在增强机器学习模型的表达能力、加速和优化机器学习算法等方面可能产生颠覆性的影响,并有望突破人工智能领域当前所面临的模型可解释性差、难以求得最优解等问题^[11-12]。量子人工智能日趋成为世界各国抢占的技术高地,越来越多的研究者开始探索量子计算助力人工智能发展的突破口。量子机器学习^[13]是量子人工智能领域中的重要研究内容,能够将量子计算的指数级加速、量子线路高并行计算以及强表达能力等潜在的“量子优势”融合到机器学习中。Google团队设计了量子机器学习的学习优势的证明实验^[14],他们提出并分析了预测物理系统的属性、执行量子主成分分析和学习物理动力学过程这三类具有量子优势的学习任务。其中,量子主成分分析方法作为量子机器学习算法中的重要代表,将为未来量子机器学习模型及其深度学习模型的构建提供强有力的支撑,为面向大数据降维处理、图像压缩降噪处理等量子算法的设计提供新的研究思路。在未来,随着量子计算设备的容错化、通用化与规模化发展,量子机器学习的“量子优势”有望得到充分的挖掘,进而应用到工程与产业中,给人工智能领域带来全新的变革。

然而,现阶段还并未有效构建起面向实际任务的量子人工智能体系,且对当前量子机器学习中的许多重要科学问题的研究仍十分有限。例如,在量子计算硬件含噪且比特数有限的背景下,使用量子机器学习的方法处理实际任务时存在计算精度和效率受限的问题;要解决这一问题,就必须深入研究量子机器学习基础理论,全面理解和剖析量子计算原理与量子机器学习线路内部结构,充分结合“量子优势”和量子力学的物理特性,设计量子学习线路优化方法和构建抗噪量子机器学习模型。另一方面,量子人工智能作为新一代计算机技术的有力候选,对应的量子计算理论与计算设备仍需完备;相

比于经典算法,量子机器学习算法能带来的有效性优势与极限究竟是多少,至今仍是未知数。此外,量子机器学习在数据编码方面也有许多核心问题还未能得到有效的解决;量子人工智能发展也将带来越来越多的安全性问题思考。而面向未来,对于不同场景下的量子机器学习应用,特别是由大数据、大模型等带来的一系列新问题、新挑战同样亟待攻破。

量子机器学习是一个广泛且具有深远影响的研究方向。本文系统性地总结论述了现阶段面向NISQ处理器的有关量子机器学习算法、参数化量子线路、量子神经网络和混合量子-经典框架四个方面的国内外研究进展,并以此为基础提出了量子机器学习系统的层次架构。随后,本文对目前量子机器学习领域所面临的重点科学问题和发展趋势进行了讨论和分析。本论文的组织结构如下,文章共分为5个部分:第1节为引言;第2节总结该领域4个重要方向的国内外研究进展;第3节给出量子机器学习系统的层次架构;第4节提出未来需重点关注和研究的科学问题与发展趋势;第5节进行总结。

2 国内外研究现状分析

量子计算硬件与量子算法的快速发展,为挖掘量子人工智能的应用提供可能。作为量子人工智能领域中的重要方法,量子机器学习将量子计算与经典机器学习模型相结合,有望利用潜在的“量子优势”突破经典算法难以解决的问题,提升机器学习模型的计算效率,在近年取得了丰硕的研究成果。目前,在量子计算与量子机器学习领域中主要的代表性研究团队来自Google、Xanadu、IBM等公司以及中国科学技术大学、清华大学等,其中中国科学技术大学凭借以“九章”和“祖冲之号”为代表的工作已走在量子计算领域的前沿^[15],并承建了量子信息科学国家实验室。表1简要总结了这些研究团队的一些主要代表工作。

表1 量子计算与量子机器学习领域中的主要研究团队

研究团队	主要代表工作
Google	Characterizing quantum supremacy in near-term devices ^[16] Barren plateaus in quantum neural network training landscapes ^[17] Quantum supremacy using a programmable superconducting processor ^[7] Power of data in quantum machine learning ^[18] Quantum advantage in learning from experiments ^[14] Suppressing quantum errors by scaling a surface code logical qubit ^[19]

(续表)

研究团队	主要代表工作
Xanadu	Quantum generative adversarial learning ^[20] Quantum machine learning in feature Hilbert spaces ^[21] Quantum circuits with many photons on a programmable nanophotonic chip ^[22] Quantum computational advantage with a programmable photonic processor ^[23]
IBM	Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets ^[24] Quantum advantage with shallow circuits ^[25] Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces ^[26] A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning ^[27]
Microsoft	Q #: Enabling scalable quantum computing and development with a high-level DSL ^[28] Circuit-centric quantum classifiers ^[29]
中国科学技术大学	Quantum computational advantage using photons ^[8] Quantum walks on a programmable two-dimensional 62-qubit superconducting processor ^[15]
清华大学	Quantum circuit complexity ^[4] Programmable quantum simulations of spin systems with trapped ions ^[30] Quantum entanglement in neural network states ^[31] Experimental quantum adversarial learning with programmable superconducting qubits ^[32]
中南大学	Parameterized hamiltonian learning with quantum circuit ^[33] QKSN: A Quantum Kernel Self-Attention Network ^[34]

2019年,Google宣布实现“量子优势”^[7]。2020年,中国科学技术大学的潘建伟团队使用光量子原型机“九章”解决了76个光子的高斯玻色采样问题^[8],进一步在光学体系上验证了量子计算的优越性。2021年,潘建伟团队研制出可编程量子计算机“祖冲之号”^[9],为探索新的多体现象和实现复杂的量子算法打开了新的大门。2022年Google团队通过实验证明了NISQ处理器在学习任务上存在指数优势的可能性^[14],并于2023年基于量子纠错在构造量子逻辑比特方面取得突破^[19]。同年,潘建伟团队也成功验证了NISQ处理器相比于经典计算机在处理图搜索问题上具有“量子优势”^[35]。目前,以Google和中国科学技术大学等为引领者的世界各国科技工作者正在积极推进量子计算的发展,布局超越传统能力的硬件与软件开发^[7-9,14,16-19,36-37]。Xanadu作为新

兴的量子科技公司,在光量子计算机的开发上取得了许多前沿进展。2020年,Xanadu发布了其关于可扩展容错光量子计算机的设计蓝图,期望在未来实现数百万量子比特在室温下进行模块化、易组网的量子计算^[38]。在2022年进行的一项玻色采样实验中,他们表示实现了相对于早期光量子计算机的5000万倍加速^[23]。同时Xanadu在量子编程软件和量子机器学习等领域也有广泛的研究^[20-22]。IBM致力于探索量子计算与量子机器学习的基础研究,规划将于2026年后实现上万量子比特的超导量子计算机^[24-27],推动量子软件原型转化为规模化的量子软件应用,并列入公司发展路线图中。目前,量子计算机的比特规模虽然仍然处于中等规模水平,但在近期已经逐步迈向了指数级增长的爆发期,近期量子处理器中的量子比特规模发展趋势如图1所示。

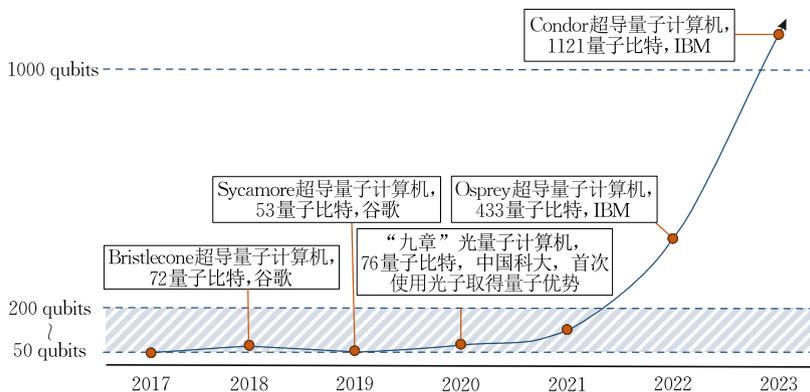


图1 量子处理器中量子比特数目的发展

面对量子计算硬件的快速发展,Preskill^[39]在2018年做出了含噪中规模量子(Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ)技术即将到来的预言。NISQ处理器指目前到近期将推出的50到数百量子比特

的含噪量子计算机,由于50量子比特超出了现今超级计算机所能暴力模拟的范围,人们认为NISQ处理器具备执行超越当今经典数字计算机能力的任务的可能,这种可预见的“量子优势”使得围绕NISQ

处理器的研究成为了量子计算领域的重要热点,一些将 NISQ 技术用于量子机器学习算法的尝试开始出现。而此时量子计算应用也从全新的安全、隐私保护机制过渡到了挖掘 AI 发展突破口的关键时期,国际上尤其关注对未来可能产生颠覆性影响的量子机器学习算法的突破创新与应用,并已有研究团队取得了一系列重要的研究成果。邓东灵团队^[30,32]主要关注量子机器学习的开拓研究,提出的量子对抗学习在可编程超导量子计算机上得到了实现。石金晶团队^[33-34,40-41]也针对量子机器学习进行了广泛的探索与研究,在量子人工智能领域和启发式的量子机器学习方面上都取得了进展。

围绕“量子优势”的实现,研究者进行了广泛的探讨^[42-44]。如量子支持向量机和量子主成分分析等量子算法在理论层面上展示了相对于经典算法的潜在加速。通过利用量子叠加和量子并行性,量子支持向量机可以在某些情况下实现指数级的速度提升^[45]。此外,量子线路复杂度的分析表明,某些量子机器学习任务可以在较低的计算复杂度下完成,这是经典算法无法企及的^[46]。而在数值验证方面,许多研究者利用模拟器和实际的 NISQ 处理器进行了实验,验证了量子算法在特定任务上的优势。例如,近期的研究表明,量子近似优化算法在组合优化问题上比经典启发式算法具有更好的表现^[47]。此外,一些研究利用数值模拟展示了量子卷积神经网络在图像识别任务中的优势,显示出较高的准确率和较低的计算时间^[48]。在物理实验方面,NISQ 处理器的实际实验验证了量子机器学习的潜在优势。例如,Google 的量子处理器 Sycamore 在解决特定的随机电路采样问题上展示了量子优势,表明量子设备可以在特定任务上超越最强大的经典超级计算机^[49]。随着研究的深入,能够带来明确量子优势的

量子机器学习算法将进一步被发掘。

NISQ 技术为量子机器学习算法与模型的实现提供了新的有力工具,也对量子机器学习算法与模型的设计产生了许多影响。在 NISQ 处理器受到量子噪声和量子线路规模等限制的背景下,混合量子-经典框架受到了广泛的重视与运用,其中作为量子处理器的参数化量子线路(Parametrized Quantum Circuits, PQC)成为了以量子神经网络为范例的量子机器学习模型的物理主体,对噪声耐受的性质使其在近期具有实现量子优势的巨大潜力。凡是由量子单元和经典单元两部分所组成的量子机器学习方法都可以被认定到混合量子-经典框架中,其量子或经典部分在整体中的具体形式以及所占的比例并不受到限制;量子神经网络并不局限于这种混合的形式,它也可以作为一个完全由量子优化器与量子处理器的纯量子模型来学习量子数据的模式;而参数化量子线路则是完全由固定门和参数化门组成的物理电路,除了量子神经网络模型外,它也可以作为量子核方法等其他量子机器学习方法的物理实现,也可以用于量子态的编码。本节首先对量子机器学习算法的发展历程与应用进行回顾,随后对当前面向 NISQ 处理器的混合量子-经典框架与实现工具的进行概述,最后聚焦于参数化量子线路和量子神经网络,从量子机器学习模型的物理构造与逻辑实现两个角度对量子机器学习领域的国内外发展现状进行概括与分析。

2.1 量子机器学习算法

量子机器学习算法将量子计算中的并行与纠缠等特性引入机器学习领域,针对一些特定问题,能够有效地提升机器学习面对大规模数据时的计算效率和存储能力。如图 2 所示,我们将量子机器学习算法的发展历程总结为了诞生期、发展期和爆发期三个时期。

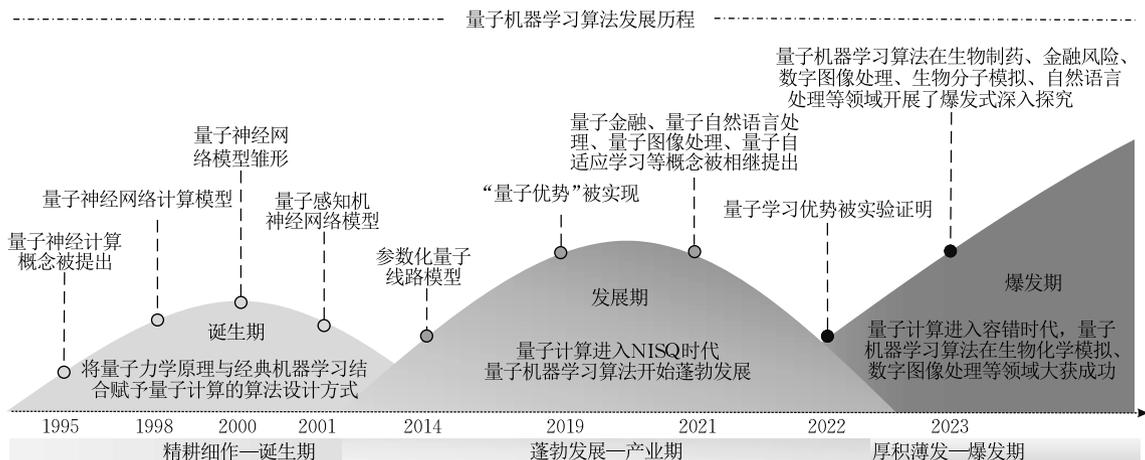


图 2 量子机器学习算法的发展历程(修改自参考文献[50])

量子机器学习算法的研究最早可追溯到 1995 年 Kak^[51] 提出的量子神经计算的概念,这也是诞生期的开始。在这个时期,对量子机器学习算法的研究较为简单,往往只是基于物理过程或者理论描述。比较有代表性的有 1998 年 Smith 等人^[52] 提出的使用量子叠加态表示的人工神经元模型和 2001 年 Altaisky^[53] 提出的最早的量子感知机模型。

随着 HHL (Harrow-Hassidim-Lloyd) 算法的提出^[54],量子机器学习算法迎来了发展期,研究者们开始关注量子机器学习算法在实际任务上的表现,并发现量子计算的特性可以用于无监督聚类算法和有监督分类算法的实现和优化^[26,55-57]。NISQ 处理器的出现也为量子机器学习算法带来了全新的设计思路与物理载体。2014 年,Rebentrost 等人^[58] 将量子密度矩阵与支持向量机的核矩阵概念相结合,进而提出了量子支持向量机作为量子大数据分类算法的高效实现;随后 Gong 等人^[59] 提出了一种基于量子云计算的量子 K-means 算法,用于解决在训练量子大数据时重复同一量子子程序的执行问题。Wiebe 等人^[60] 还提出了通过结合统计推断和量子模拟来表征未知量子系统的哈密顿学习模型,为推断未知量子系统的哈密顿量提供了新的方法。此外,适用于量子机器学习模型的优化训练方法也得到了关注与引入。2018 年, Liu 等人^[61] 提出了基于梯度的学习算法,用于训练量子线路波恩机

作为离散数据的生成模型;同年, Mitarai 等人^[62] 也引入了基于梯度的系统参数优化方法,通过计算可观测量的期望值对于线路参数的梯度,进而以反向传播的方式实现量子线路的参数优化;2019 年, Gao 等人^[63] 提出了一种利用主成分分析压缩大数据的量子算法,表明量子机器学习可以从维数灾难中解放出来,以解决具有实际问题。

随着量子计算的不断发展,量子机器学习的研究将进入爆发期,量子机器学习算法的应用场景也将会更加广泛。2022 年 Google 团队在实验上证明 NISQ 处理器对于学习任务的执行存在指数级优势的可能性^[10],发现量子系统可以从比传统实验所需数量少得多的实验中学习,其中执行量子主成分分析的实验为使用 NISQ 处理器对数据降维、图像降噪等任务提供了新的研究思路^[64]。2023 年 Google 团队利用量子纠错在构造量子逻辑比特方面的突破^[19],也将为挖掘基于量子机器学习算法的应用带来更多可能性。

在量子机器学习算法的应用方面,国内外学者也进行了多方面的探究。表 2 列举了量子机器学习领域的代表算法在时间复杂度、量子线路及应用领域方面的对比,其中参数具体含义如下: N 、 m 均为训练样本数、 n 为训练向量的维度、 E 为样本边个数、 d 是数据空间维度、 k 是聚类簇总数、 T_1 、 T_2 分别代表子训练过程的训练时间。

表 2 量子机器学习算法对比

量子算法	量子时间复杂度	经典时间复杂度	线路实现
Quantum K-Nearest Neighbor ^[65]	$\mathcal{O}(\log(tm))$	$\mathcal{O}(tm)$	✓
Quantum Principal Component Analysis ^[66]	$\mathcal{O}(\log d)$	$\mathcal{O}(d)$	✓
Quantum K-means ^[67]	$\mathcal{O}(k \log(kmn))$	$\mathcal{O}(mn)$	✓
Quantum Support Vector Machine ^[68]	$\mathcal{O}(\log(mn))$	$\mathcal{O}(mn)$	✓
Quantum Divisive Lustering ^[67]	$\mathcal{O}(m \log m)$	$\mathcal{O}(m^2)$	✓
Quantum Kernel Methods ^[69]	$\mathcal{O}(\log n \cdot m^2)$	$\mathcal{O}(n^2 m)$	✓
Quantum Decision Tree Classifier ^[70]	$\frac{(\sqrt{n}-1)\sqrt{kd}}{\sqrt{n}(\sqrt{k}-1)}(T_1+T_2)$	$\mathcal{O}(mn \log n)$	
Quantum K-medians ^[67]	$\mathcal{O}\left(\frac{n^2}{k}\right)$	$\mathcal{O}\left(\frac{n^s/2}{\sqrt{k}}\right)$	
Quantum Deep Learning ^[71-72]	$\mathcal{O}(\sqrt{NE^2}(\sqrt{k}+\max_r\sqrt{k_n}))$	$\mathcal{O}(NEk)$	✓

可以看出绝大多数量子机器学习算法的时间复杂度相比经典算法均有降低。量子 K-近邻(Quantum K-nearest Neighbor)^[65]、量子主成分分析(Quantum Principal Component Analysis, QPCA)^[66]、量子 K-均值(Quantum K-means)^[67]、量子支持向量机(Quantum Support Vector Machine, QSVM)^[68] 和 Quantum Divisive Lustering^[67] 算法的时间复杂度均达到了对数级别,充分发挥了量子系统高并行、多纠缠等非

经典特性,实现了量子计算指数级加速特性与机器学习强数据处理能力的充分融合。以上算法能够在结合量子计算指数级加速以及机器学习强处理能力等优势的前提下,将量子线路高并行计算以及强表达能力的特性应用到提高传统机器学习效率、提高量子算法的实用性等方面,赋予了量子机器学习算法及方案的重要研究意义和较广阔的应用前景,还可以在现有硬件条件下为设计高效且实用的

量子算法提供理论依据。其中,量子核方法(Quantum Kernel Methods)^[69]是一种基于量子计算的机器学习方法,用于计算两个向量之间的核函数。具体来说,假设有 n 个数据点,每个数据点有 m 个特征,那么经典核方法的时间复杂度为 $\mathcal{O}(n^2 m)$,而量子核方法的时间复杂度仅为 $\mathcal{O}(\log n \cdot m^2)$ 。这意味着当数据集较大时,量子核方法的优势更为明显。Quantum transformer^[73]是一种基于量子计算的机器学习模型,用于自然语言处理和其他序列数据建模任务。与经典的 transformer 模型相似,它具有自注意力机制和位置编码,但使用量子门代替了经典的全连接层。其时间复杂度主要由两部分决定:量子门操作和自注意力机制。目前,由于量子计算硬件的限制,实际上运行量子核方法和 Quantum transformer 需要耗费大量的时间和资源;因此,在目前,它们仍然属于一种未经真实设备实验验证的机器学习算法,需待量子计算的硬件水平的进一步提升后才能得到实际的广泛应用。伴随着量子线路的设计和推广,量子机器学习算法的应用领域也扩展到数据降维、自然语言处理、图像处理、量子化学、生物科学等多个领域。表 2 中标注了目前已拥有量子线路的量子机器学习算法,但是包括 Quantum K -medians、Quantum Decision Tree Classifier^[70]在内的量子机器学习算法目前仍然面临许多技术困难,例如存在量子器件噪声、量子线路复杂性高和缺乏量子算法统一的标准库等,给量子机器学习算法的应用带来挑战。

面向 NISQ 处理器的量子机器学习算法大部分基于混合量子-经典框架来处理现实任务。相比依赖于遥远的大规模容错计算设备的量子算法,混合量子-经典框架下的量子机器学习算法借助于近期 NISQ 处理器,能够更加充分地挖掘现有量子资源的潜力,从而解决当下的实际任务。

2.2 混合量子-经典框架

由于 NISQ 处理器本身的限制,基于全量子硬件的量子机器学习算法与模型在处理实际应用任务时面临计算精度和效率受限等问题。于是,基于混合量子-经典框架的一系列模型与算法被相继提出,并成为重要的发展方向,备受关注。经典计算机可以调用规模相对较小的量子处理器来进行一些关键的计算,同时对参数化量子线路中的可学习参数提供优化方法,用于加速在有限量子比特背景下的量子机器学习任务的实现。这些新兴的变分子量子算法

(Variational Quantum Algorithm, VQA)^[74-75]和过去依赖于高深度量子线路、以量子相位估计算法^[76]为核心的机器学习算法不同,它们对线路深度的要求较低,使用经典的优化器来训练参数化量子线路,可以在错误率超出阈值之前完成算法量子计算部分的求解。

最早的混合量子-经典方法雏形在 2008 年被提出, Bang 等人^[77]利用经典计算机控制由量子设备实现的酉操作去探索其他量子算法的实现。2014 年,用于估计系统基态能量的变分子量子本征求解器(Variational Quantum Eigensolver, VQE)^[78]被提出,实现了量子化学模拟,打开了量子化学领域的大门,在解决优化问题方面具有潜在的应用价值。2016 年混合量子-经典学习模型框架的设计方案被总结归纳成了一个系统的量子机器学习模型设计方法^[79]。在针对监督学习任务的研究中, Mitarai 等人^[62]提出量子线路学习的一种混合量子经典算法,对输入数据进行非线性编码,再将低深度量子线路近似为一个复杂非线性函数,可以应用于高维回归或分类任务。量子生成对抗网络是一类基于混合量子-经典框架的代表模型,通过对模型中数据源、生成器和判别器等组成部分进行不同程度上的量子化,量子生成对抗网络也具有不同的混合方案。2018 年,受经典生成对抗网络这类机器学习框架启发, Dallaire-Demers 等人^[80]首先提出了对应的量子生成对抗网络;这种基于量子计算的对抗训练与生成过程与经典类似,但其中判别器和生成器都替换成了量子结构,数据类型也要求为量子态;这对应于同年 Lloyd 等人^[20]在量子生成对抗学习中所提出的纯量子场景,并在 2019 年进一步由 Hu 等人^[81]首次在超导量子计算平台中得到了实现。除了纯量子版本的生成对抗场景外, Lloyd 等人^[20, 82-83]认为还存在经典生成器生成量子数据以及量子的生成器和判别器生成经典数据等场景。目前,量子生成对抗网络在图像生成、异常检测和医药研发等领域都能够进行有效的应用^[84-86]。2021 年, Bravo-Prieto^[87]设计了一种增强特征的量子自编码器,能够以更高的保真度实现对量子线路参数的压缩,为使用编码的方式实现参数压缩指明了方向。2022 年, Huang 等人^[88]设计了能够利用先验知识来快速学习新任务的元学习变分子量子算法(Meta-Variational Quantum Algorithm, Meta-VQA),实验结果表明 Meta-VQA 在 NISQ 处理器上能够展现优越的性能。

混合量子-经典框架的出现不仅为量子机器学习带来了全新的活力,也促成了一大批量子编程语言与量子计算云平台的诞生,如 QISKit^[89]、PennyLane^[90]、Q#^[28] 和 isQ^[91] 等,这些语言和平台有助于开发者创建可以在量子模拟器或者真实 NISQ 处理器上执行的量子软件程序以及在云端访问、使用真实 NISQ 处理器,为研究和实现基于混合量子-经典框架的量子机器学习方案带来了便利。在此背景下,量子软件工程的概念被提出,旨在于更高的抽象层次交付合适的方法和工具,使软件工程师能够快速构建量子计算应用,其中应明生及其团队在量子软件与量子程序设计等方面做出了一系列国际一流的开创性基础研究工作^[92-94]。例如,建立了完整的量子 Folyd-Hoare 逻辑并证明了其(相对)完备性^[95],定义了量子程序的不变量这一基本概念^[96],还开辟了量子模型检测及量子软件验证与测试等全新的研

究领域^[97-100]。目前针对量子软件可靠性的量子软件测试研究也逐渐成为软件工程领域的热门内容之一^[101]。

2.3 参数化量子线路

作为当前混合量子-经典框架中的量子处理器部分,参数化量子线路(Parametrized Quantum Circuits, PQC)^[102]通常由初始态制备、依赖于自由参数的量子线路和测量三部分构成,具有鲁棒性和易实现性的特点,其性能可从可表达性和纠缠度两个方面来进行度量^[103]。研究指出在已知复杂度理论假设下,仅利用现有的经典资源仍无法有效地模拟出参数化量子线路输出分布^[104-105],因此参数化量子线路在解决经典算法难以解决的问题、提高经典算法性能方面发挥着重要作用。图 3 是对近年来参数化量子线路模型发展的总结。我们可将参数化量子线路的发展划分成了三个时期。

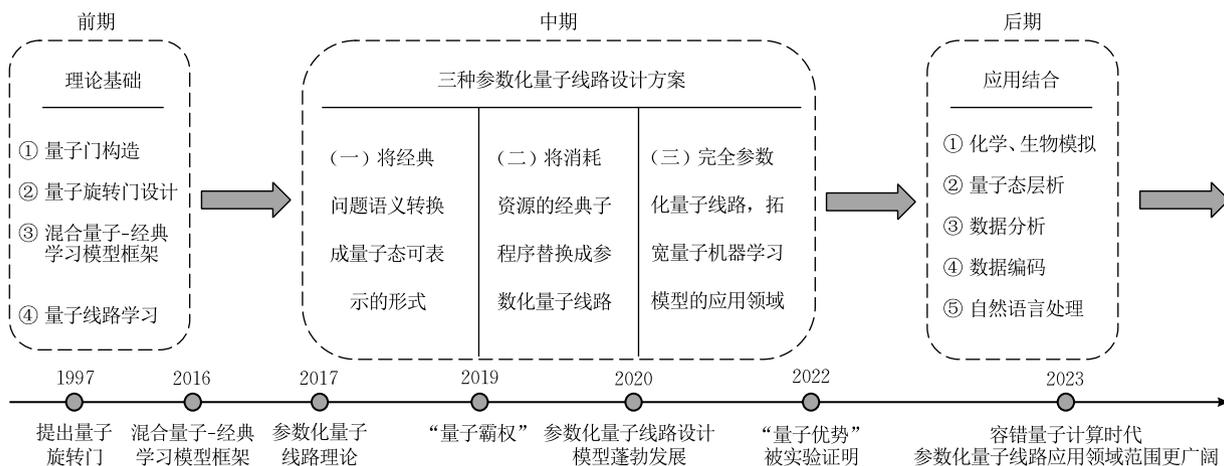


图 3 参数化量子线路的发展历程

在参数化量子线路发展的前期,参数化量子线路模型的设计处于理论基础建设阶段。量子门构造理论、量子旋转门的设计和量子线路学习方法构成了参数化量子线路的理论基础。量子门构造理论涉及量子逻辑门的设计以及对应酉矩阵的分解^[106]。量子旋转门和量子力学中的泡利算子有关,通过训练调整量子系统中泡利算子的自旋角度达到量子比特的旋转效果。伴随着混合量子-经典框架的兴起,量子线路学习方法也得到了广泛关注^[107]。量子线路学习将机器学习算法的训练过程转化为对参数化量子线路上的参数进行操作,从而利用量子计算的优势来解决机器学习问题,提升机器学习方法的计算效率。在量子线路学习方法中,训练数据将会被映射到一个量子态上,然后对这个量子态进行一

系列的量子操作,最后通过测量得到一个输出结果,进而优化模型参数以实现预测目标^[108]。量子线路学习方法涉及到量子算法、量子态表示、量子门操作、量子噪声等多个方面的研究内容^[109],它可以为建立量子神经网络、定义参数、构建面向任务的量子机器学习模型奠定理论基础,并被认为是未来量子人工智能领域的重要研究内容,也有望为解决某些经典机器学习问题提供新的思路和工具,近年来量子线路学习方法得到了越来越多的关注和研究。

在参数化量子线路发展的中期,我们将参数化量子线路的相关研究按设计思路划分为三大类:第一种是将经典问题语义转换成量子态可表示的形式,设计参数化量子线路以近似或直接求得问题最优解;2014 年,Farhi 等人^[110]根据绝热定理提出了

一种能够在多项式时间内近似求解最大切割问题的方法,通过参数化量子线路结合哈密顿量演化过程对参数进行优化,求得线路最终输出的近似解;2019年,Xue等人^[111]在典型的量子噪声环境下研究了量子近似优化算法的性能,并证实了其在NISQ处理器上运行的有效性;同年,Guerreschi等人^[112]提出了一种新的语义编码参数化量子线路的方法来减少所需量子比特的数量,以实现更好的量子加速效果。2021年,Shaydulin等人^[113]利用对称性质,将参数化量子线路中的搜索空间减少到一个对称子空间,从而减少了训练量子线路所需的计算成本,在一定程度上提高参数化量子线路的性能,并且能够在一些实际问题中实现更快的训练;同年,高飞团队^[114]提出了一种可以在NISQ处理器上执行的变分量子算法来求解泊松方程,大大减少了所需的量子资源。以上多种参数化量子线路设计方法均推动了量子机器学习在寻求最优解领域的进步,并为使用量子计算机解决NP完全问题提供了潜在的可能性^[104]。2023年,Mohseni等人^[115]为优化计算速度,在绝热量子计算中研究了哈密顿量间隙与参数化量子线路中参数变化关系中的能力。

第二种研究是将消耗资源的经典子程序替换成参数化量子线路,用于提高经典算法效率的同时也能够求得问题的解;2016年,McClellan等人^[116]通过将经典优化问题转化为一个量子力学问题,并利用上节所提到的VQE作为子系统来求解该问题。2019年,Xia等人^[117]提出了一种基于参数化量子线路的神经网络模型,可接受无监督训练方式,用于生成简单分子(如氢分子)的基态势能曲线;同年,Gao等人^[118]提出了一种用于岭回归的量子算法,其中提出了并行哈密顿模拟技术来并行模拟多个厄米矩阵(Hermitian Matrix),并通过实验证明了该方法可以有效地估计岭回归的预测能力。2021年,Tang^[119]提出了一种使用参数化量子线路来加速主成分分析和监督聚类的方法。该方法使用了量子计算机的特殊性质来加速计算特征向量,并将其与经典算法相结合,以提高算法的效率;同年,Shi等人^[41]利用混合量子经典的方法,在参数化玻色采样量子线路中实现了高斯函数的准确拟合。

第三类设计思路是设计一种完全参数化的量子线路,用于解决物理、化学、生物等问题;2021年,Qiang等人^[120]研制出新型可编程参数化硅基光量子计算芯片,实现了多种图论问题的量子算法求解,为参数化量子线路解决实际应用问题做出了开拓性

示范。2022年,Shi等人^[33]提出了一种使用量子线路进行参数化哈密顿量学习的方法,具有实现简单、可扩展性强等优点,在量子计算、量子化学等领域具有潜在的应用前景;同年,Brokowski等人^[121]利用参数化量子线路求解了分子和化学体系中的量子动力学问题。他们使用参数化线路来构造分子的哈密顿量,并通过优化线路参数来最小化能量。然后,利用得到的最优参数化线路计算分子的性质,如能量、结构等。Li等人^[122]也提出了一种参数化量子线路设计方法,通过将量子处理器初始化为最大纠缠态以及将数据信息编码为可有效模拟的哈密顿量,实现了在量子处理器上的谱聚类,显著提升了量子聚类算法的计算速度。而Wang等人^[123]则基于参数化量子线路的设计方法,提出了一种用于经典高级加密标准的变分量子攻击算法,研究了纠缠熵、并发性和成本函数的关系,极大程度上提升了量子搜索算法的计算速度。

在参数化量子线路发展的后期,我们认为参数化量子线路模型将会被广泛地用于各种应用领域,其中包括化学、生物分子模拟、量子态层析、数据分析、数据编码和自然语言处理等领域。与此同时,参数化量子线路也为量子机器学习模型的落地应用提供了一种构造思路,特别是为量子神经网络的设计提供了一种全新的实现方法。国内外众多学者通过研究与设计适用于现有量子计算硬件的参数化量子线路模型,这有利于量子机器学习在更加开放的任务中应用,将使量子人工智能不再局限于理论研究,能有效推进量子机器学习的实用化进程。

2.4 量子神经网络

自1943年提出M-P神经元模型以来^[124],作为联接主义典范的神经网络至今已经发展成百上千的计算模型,其中许多成为了自然语言处理、计算机视觉等领域的经典方法,在语义理解、语音识别、图像分割、目标检测乃至多模态等技术领域都取得了成功的应用^[125]。然而,目前的人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)仍存在一些短期内可能难以克服的缺陷,如高维数据下训练速度缓慢^[126]、网络记忆容量有限并存在“灾难性遗忘”^[127]等问题。同时,一些研究表明人脑的信息处理过程可能与量子现象(如量子纠缠特性)存在一定关联^[128-129],这为神经网络新型范式的研究提供了思路,在这种背景下,将量子计算与神经网络结合成为了一种重要的尝试。

量子神经网络是一种基于量子计算的神经网络

模型,在设计之初该模型由于缺乏成熟的量子计算机模型作为支撑,其早期的逻辑实现往往只是基于物理过程的计算或者量子启发式的模型描述,而较少涉及到量子比特和量子线路等概念。1995年,Kak^[51]首次将量子理论和神经计算相结合,利用人脑意识模型特征与量子系统波函数演化特征的相似性,将人脑与量子系统相联系,而神经结构充当着经典环境下的测量硬件的角色。2000年,Behrman等人^[130]探索了利用量子点分子模型构造量子神经网络的可能性,其所构造的单个量子点分子在不同时间维度的演化下可以模拟多个神经元以构成递归的时间序列神经网络。2001年,Gupta等人^[131]在其提出的量子神经网络模型中引入了一种非线性、不可逆的量子门用于模拟激活函数,并给出了应用非线性薛定谔方程的实例,证明了该模型的物理可实现性。

随着量子计算在硬件与算法上的发展,量子处理器在硬件技术上逐渐有能力为当前的量子算法提供可靠的探索和实验平台,更多量子神经网络模型开始引入量子比特与参数化量子线路的概念,其研究进程也加快了。2007年,Maeda等人^[132]基于量子线路结构提出了一种用于求解异或问题的量子神经网络模型及学习算法。2014年,Schuld等人^[133]基于自身所提出的量子神经网络的系统方法,认为过去所有对量子神经网络的潜在构想都缺乏对量子计算优势的充分利用,并对未来的量子神经网络设计提出了展望;2015年,Schuld等人^[134]基于量子相位估计算法,提出了一种基于新的模拟经典感知机阈值激活函数的量子感知机模型,该模型可以处理叠加的多个输入,并可以有效应用于更复杂的量子神经网络结构,提升了量子神经网络模型的计算速度。

NISQ技术出现后,受混合量子-经典框架的影响,以参数化量子线路为实现主体的量子神经网络模型研究迎来了快速发展。2018年,Mitarai等人^[62]提出了一种基于近期量子处理器的混合量子-经典算法,并称之为量子线路学习(Quantum Circuit Learning, QCL),通过仿真实验证明了以QCL算法驱动的量子神经网络在学习非线性函数和执行简单分类任务上的能力;Farhi等人^[135]提出了一种对经典和量子数据进行监督学习的通用量子神经网络线路,如图4所示,这种线路由一系列作用于输入量子态的含参酉算子组成,通过训练酉算子中参数达到训练量子神经网络结构的效果。同年,McClean

等人^[136]发现在基于混合量子-经典框架的量子神经网络中存在普遍的贫瘠高原效应,当量子神经网络的线路通过随机参数初始化训练后,其损失函数的梯度方差将会随着问题规模的扩大呈指数级递减,对应梯度下降的收敛速度变得极为缓慢,最后损失函数对应的优化曲面会愈加平坦形成高原。他们还指出这种梯度消失的现象可能与满足西2-设计性质的随机初始化线路有关^[17]。2019年,Killoran等人^[137]提出了一种通过非高斯门提供非线性与通用性的连续变量量子神经网络,能够在保持完全酉性的情况下编码高强度的非线性变换;同年,Steinbrecher等人^[138]提出了量子光学神经网络,将经典神经网络的特征自然映射到量子光学域,并通过数值模拟和分析证明了模型的可学习性。图5展示了这种光学神经网络的一种结构示例。2020年,Schuld等人^[29]提出了一种用于监督学习的低深度量子神经网络,利用量子线路的纠缠特性捕获数据中的相关性完成分类任务。同年,Beer等人^[139]提出了一种对经典神经元的量子模拟方法,利用这种量子神经元构建了一个能够用于通用量子计算的量子前馈神经网络,并在量子任务中展现了这种模型可观的泛化能力与鲁棒性。2021年,Skolik等人^[140]提出了一种用于量子神经网络的分层学习策略,并在实验上证明这种方法可以避免一些由于线路深度和参数数量引起的贫瘠高原问题;同年,Abbas等人^[141]在数值上证明了一类量子神经网络在获取有效维数和训练速度上相对于经典前馈神经网络的优势,并在真实的量子计算机上验证了这一点。

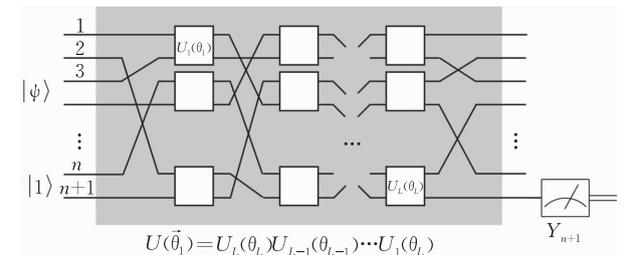


图4 面向NISQ处理器的量子神经网络线路(修改自参考文献[135])

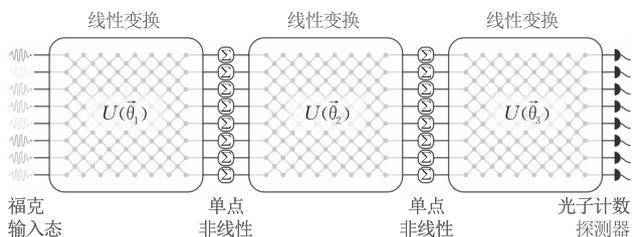


图5 量子光学神经网络模型结构(修改自参考文献[138])

同时,受到深度学习中的经典神经网络如卷积神经网络、循环神经网络等模型的启发,一系列具有新型参数化量子线路结构的量子神经网络模型也相继被提出。如 2019 年 Cong 等人^[142]提出的以图 6 中线路作为基础的量子卷积神经网络(Quantum Convolutional Neural Networks, QCNNs)和 Bausch 等人^[143]在 2020 年提出的量子循环神经网络等。值得一提的是,Bausch 等指出他们提出的量子循环神经网络在序列学习和数字分类等非平凡任务中并未遇到现有量子神经网络和经典循环神经网络中出现的梯度消失问题,而 Pesah 等人^[144]通过对 QCNNs 结构中参数梯度缩放的分析与数值验证,指出在 QCNNs 中不会出现贫瘠高原现象,并以此证明了 QCNNs 的可训练性。2022 年,Yan 等人^[145]设计了注意力增强型的图神经正切核(GNTK),将其拆分成一个个近似线性的模块,并使用量子线性代数算法将它们重新组合起来,形成基于量子机器学习模型的量子图神经正切核方法(GraphQNTK),从理论上将计算复杂度降低到 $\mathcal{O}(n)$ 。他们还开发了用于表示图属性的量子机器学习模型,基于三个公共数据集的实验结果表明了该模型的有效性,该方案在效率方面的表现也优于经典机器学习方法^[146]。

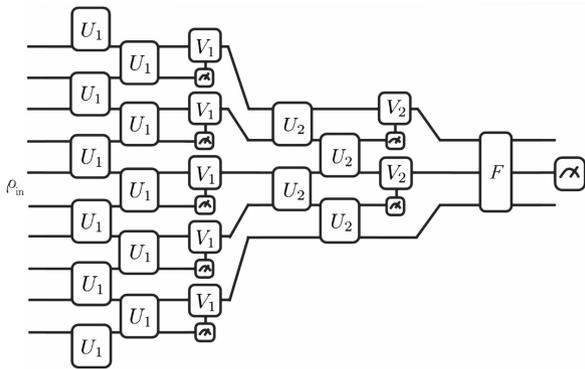


图 6 量子卷积神经网络模型结构(修改自参考文献^[142])

经典深度学习为量子机器学习带来了线路结构设计上的启发,其成果也影响着量子机器学习的研究与发展;量子神经网络对于优化经典深度学习模型也具有重要的启发意义。自然语音领域中文本分类、情感分析等任务的处理上,一些量子启发式的神经网络都表现出了良好的性能与潜力^[33,147-149]。2018 年,Zhang 等人^[150]提出了一个受量子启发的多模态情感分析框架,通过对两个大型图像数据集进行相关实验,表明了该方法明显具备一定的量子优越性;2020 年,他们又提出了一种受量子启发的

量子神经网络匹配模型,该模型可以应用量子干扰效应来产生在检索过程中匹配单元之间的相互作用,从而加强检索过程中的数据特征关联^[151]。

目前,关于量子神经网络的理论研究已经取得了一定的进展,特别是在近期基于 NISQ 处理器,研究者们提出了许多不同的量子神经网络模型。不过受限于量子比特数与量子线路深度问题,目前量子神经网络还难以在产业级任务中取得广泛的应用,因此,当前量子神经网络的发展仍处于初级阶段,需要进一步的理论研究和硬件实现来推动其实用化进程。

以上研究表明,面向 NISQ 处理器的国内外量子机器学习研究已经迈入了一个全新的阶段,为当前量子计算机对接实际应用提供了丰富的理论和实验基础。混合量子-经典框架下的量子机器学习算法通过与传统机器学习方法充分结合,利用量子并行计算特性降低计算复杂度、提高计算效率,为传统机器学习方法带来技术和应用上的创新。目前,量子机器学习在量子化学、量子金融、自然语言处理等许多领域都已经有了开拓性的探索和应用,并针对不同应用任务探索出一系列不同的参数化量子线路构造和量子神经网络设计。随着量子硬件设备的容错化和规模化发展,量子机器学习将有望不断展现出其中的量子优势,给人工智能领域带来重要的影响。

3 量子机器学习系统的层次架构

本文在总结已有研究基础和相关工作的基础上,提出面向 NISQ 处理器的量子机器学习系统层级架构,如图 7 所示。量子机器学习系统的层次架构可分为三层:原理层、计算层和应用层。原理层是量子机器学习系统层次架构的基石,包括量子力学中的基础物理量、量子系统和系统演化以及量子计算与机器学习结合机理。计算层是量子机器学习系统层次架构的核心,它主要包括了数据信息、数据编码、线路模型、优化方式、结果观测五个方面。应用层是量子机器学习系统层次架构的上层设计,它推进了量子机器学习的实用化进程,使量子机器学习模型及算法具备更广阔的应用和产业价值。本文归纳并总结了当前量子机器学习模型所广泛涉及的六个重要应用领域,包括生物、化学、物理、金融、计算机视觉和自然语言处理等。

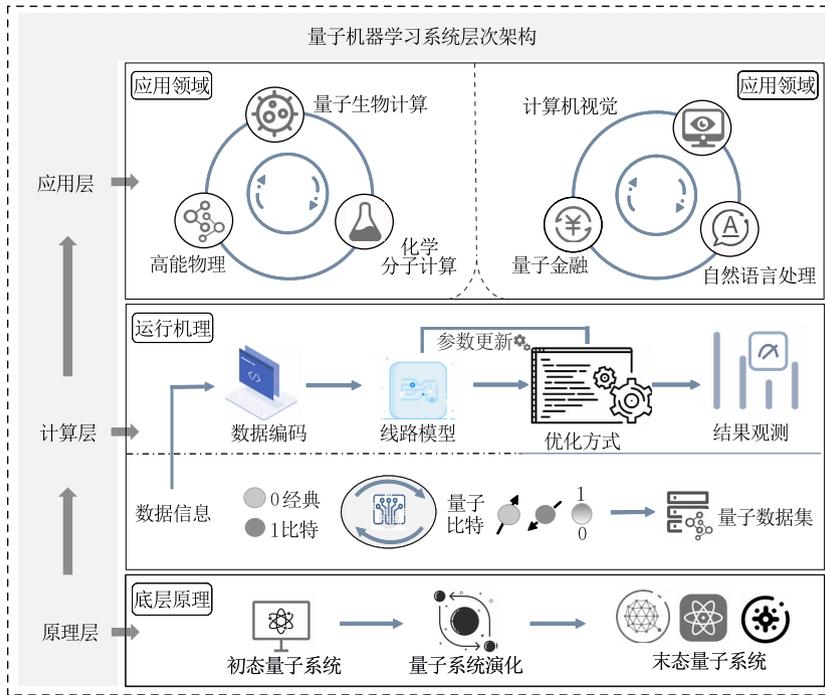


图7 量子机器学习系统的层次架构(修改自参考文献[50])

3.1 原理层

量子机器学习和量子计算的底层原理是量子力学^[152]。近年来,随着量子器件的发展与量子计算理论的完善,量子机器学习已从量子计算的研究领域脱颖而出,并向实际应用迈进,成为学术界重点关注的研究热点。在量子机器学习系统的层次架构中,原理层主要涉及量子力学基础物理量及性质、量子系统和系统演化以及量子计算与机器学习结合机理。

3.1.1 量子力学基础物理量及性质

哈密顿量:哈密顿量是量子力学中描述量子系统总能量的算符^[153];在化学分子计算与高能物理分析中,核心问题往往就在于对目标系统的哈密顿量的性质进行求解,因此,哈密顿量在量子机器学习中有重要的作用。哈密顿量的数学形式为哈密顿算子,用 H 表示,由式(1)给出:

$$H = T + V \quad (1)$$

其中,动能算子用 T 描述,势能算子用 V 表示。在量子力学中,它的定义来源于自式(2)中的薛定谔方程。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2)$$

其中, ∇ 是量子系统中的梯度算子, $\psi(\vec{r})$ 代表了量子态, \hbar 是普朗克常数, μ 是量子力学中的常数, $U(\vec{r})$ 是波函数, E 是能量算符, $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right]$ 代表量

子系统中的哈密顿量 H 。

状态空间:状态空间在数学上的描述是希尔伯特空间,量子力学的第一条公设确立了量子力学所适用的场合。在量子力学中规定:任意一个孤立的物理系统都与一个称为系统状态空间的复内积向量空间,即希尔伯特空间,相互联系。在该空间内,量子系统完全由状态向量来描述,状态向量是指系统状态空间里的一个单位向量,任意量子比特系统都可以用状态空间中的单位向量来表示。本质上,量子态编码就是一种从欧几里得空间中经典比特到希尔伯特空间中量子比特的特征映射,这种从低维空间到高维状态空间的映射过程也给后来的量子核方法带来了启发。

密度算子:密度算子 ρ 是另一种有别于状态空间的量子系统描述方式,但是两者在数学上是等价的。密度算子通常被称作密度矩阵,假设封闭量子系统的演化是由酉算子 U 进行描述的,如果初始量子系统的状态为 $|\psi_i\rangle$ 的概率为 p_i ,那么在系统演化后,系统将以概率为 p_i 处于状态 $U|\psi_i\rangle$ 。故,密度算子的演化可以表示为以下形式:

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \xrightarrow{U} \sum_i p_i U |\psi_i\rangle \langle \psi_i| U^\dagger = U \rho U^\dagger \quad (3)$$

其中, U^\dagger 为酉算子 U 的共轭表达, ρ 代表了密度算子。通过将密度矩阵与协方差矩阵、核矩阵等矩阵形式相关联,可能还会启发出一些如核密度矩阵的新的量子机器学习概念与方法。

不确定性原理:不确定性原理是海森堡于 1927 年提出的物理学原理,是量子力学的重要概念之一。具体是指:在测量某个量子系统的某个物理量时,如果这个物理量没有确定的值,那么测量这个物理量的不确定度和系统另一个物理量的不确定度之积不会小于一个普朗克常数,即式(4)所示。

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4)$$

其中, Δx 是位置不确定度, Δp 是动量不确定度, \hbar 是普朗克常数。不确定性原理对量子过程所施加的限制可能对量子计算的速度造成不良影响。例如,在量子计算中,量子态的制备和测量是关键步骤。不确定性原理限制了我们在制备和测量过程中对量子态的精确控制。在量子比特的操作过程中,无法同时精确测量其能量和时间,这会导致操作的误差累积,影响量子计算的准确性和稳定性^[154]。

3.1.2 量子系统和系统演化

量子力学通过研究量子系统和系统演化阐述物质和能量在微观层面的表现,为量子计算提供了理论上的基础。量子系统是指任何遵守量子力学定律的系统,它具有叠加性和纠缠性这两个独有的特性^[155]。叠加性意味着一种粒子可在几种状态下共存,纠缠性则用来描述经过相互作用然后分离的粒子之间存在的相关性,这种关系与粒子之间距离无关。

量子系统根据量子力学原理随时间发展的过程称为量子系统演化。理解量子系统的演化有助于更深刻地了解量子技术的发展。系统演化是指量子系统不断变化的过程,在此过程中量子系统将会产生大量的中间态 $|\psi_t\rangle$ 。以绝热演化为例^[156],量子系统演化中能量满足变化式(5)。

$$H_t = \left(1 - \frac{t}{T}\right)H_b + \frac{t}{T}H_p \quad (5)$$

其中,初始量子系统的哈密顿量用 H_b 表示, H_p 是最终量子系统的哈密顿量, t 表示演化时间, T 是系统的温度, H_t 为系统演化过程中的哈密顿量。在化学分子作用过程中,由于分子运动之间会产生力量的碰撞,量子系统演化遵循着热力学与分子力学的相关物理条件运行。

3.1.3 量子计算与机器学习结合机理

量子计算的量子纠缠和量子叠加等特性使得在解决一些问题时,量子算法在原理上可以优于最著名的经典算法。在计算数据规模不断膨胀、硬件算力走向瓶颈的背景下,将量子数据和量子计算与机器学习结合有望提高算法对数据的处理与计算能

力,克服机器学习领域当前和未来可能面临的一系列挑战。

量子计算与机器学习的结合机理目前主要分为三种。第一种是将量子技术替换经典机器学习算法中时间复杂度或者空间复杂度较高的部分,从而获得更快的运算速度与处理海量数据的能力,降低算法的复杂度^[157]。混合量子-经典框架就是这种结合机理的尝试范例,它将经典机器学习中的数据与模型部分进行不同程度上的量子化替换,用经典计算机中的优化器来完成训练。第二种则完全跳出经典机器学习的框架,设计完全量子机器学习算法以充分利用量子计算机并行运算与存储优势,达到更高的性能,早期针对全尺寸量子计算机的一些量子机器学习算法大多采用这种结合机理,此时量子计算作为量子机器学习算法的物理基底与逻辑基底。第三种是将机器学习的思维模式和方法框架应用到量子计算中,以更好地探索量子世界的物理规律。由此产生的量子机器学习算法通常比对量子系统数据的经典分析更具启发性,因此在生物分子计算和高能物理分析等领域具有丰富的应用潜力。

目前,大部分量子机器学习算法和模型的设计与构造往往基于第一种结合机理,这与当前 NISQ 计算的背景密不可分。对于受到量子噪声与量子线路规模限制的 NISQ 处理器来说,第一种结合机理能在一定程度上对抗量子噪声的影响,在较少的量子比特下拥有实现量子加速等优势的可能。

3.2 计算层

本节主要介绍计算层的数据信息、数据编码、线路模型和优化方式四个方面的内容。数据信息可分为经典信息和量子信息。数据编码是将经典数据转化成量子数据的映射模式,是量子机器学习任务能够良好执行的重要前提。线路模型是计算层的核心,量子线路的表达能力和纠缠能力等性质决定了量子机器学习模型执行任务时的通常表现。最后的优化方法通过更新量子线路中的可学习参数帮助量子机器学习找到最优解。

3.2.1 数据信息

量子机器学习处理的数据既可以是经典数据,也可以是量子数据。由量子系统和过程产生的实际量子数据是量子机器学习最直接的应用,而经典数据最终需要被编码为量子态才能输入量子计算机中。将大量经典数据直接通过制备量子态的量子子程序加载到量子系统中可能需要指数时间,不过理论上这可以通过量子随机存储器(Quantum Random

Access Memory, QRAM)^[158]来解决,但这对于大数据问题来说同样需要很高的“输入成本”^[9]。与此相关的量子机器学习数据集的构建与转换因此逐渐得到了重视^[159]。同时,对这些数据信息进行测量读取也往往面临着“输出成本”,不可避免地导致算法的运行减速。

3.2.2 数据编码

在量子机器学习中,为了使量子计算机能够处理经典数据,需要在量子系统中为经典数据寻找一种合适的表征形式,并设计一种从经典数据映射到量子数据的量子态编码方法^[160],映射方法的具体实现被称为量子态编码。目前常用的手段主要分为数据的直接映射转换和将数据映射成哈密顿量两种方式。目前常用的编码方式有基底编码^[160-161]、振幅编码^[160-162]和角度编码^[161-162]等,除此之外还有诸如量子抽样编码^[160]、波函数编码^[162]和哈密顿量演化编码^[18]等其他的编码方式,本文主要对常用的前三种编码方式进行介绍。

基底编码:基底编码是经典二进制比特到量子比特的一种直观映射。考虑一个长度为 n 的经典比特 x ,经基底编码的映射可以表示为

$$x \rightarrow |x\rangle = |v_x\rangle \quad (6)$$

其中, $|v_x\rangle$ 是希尔伯特空间中的一个计算基态。这种编码的优点在于直观且易于实现,但仅针对二进制数据类型,在量子比特资源稀缺的 NISQ 处理器中面临较大的比特数量限制。

振幅编码:振幅编码可以处理任意实数的经典数据,它的编码特性类似于原始向量。对于线路中输入的 N 维经典数据 x ,其向量元素经编码映射到一个 $\lceil \log_2 N \rceil$ 量子比特的振幅上的过程为

$$x \rightarrow |x\rangle = \sum_{i=1}^N x_i |i\rangle \quad (7)$$

其中, $\{|i\rangle\}$ 是该希尔伯特空间中的一组计算基态。因为经典数据特征信息被表征为一个量子态的振幅大小,因此该经典信息需满足归一化条件: $\|x\|^2 = \sum_i |x_i|^2 = 1$ 。振幅编码在量子机器学习的广泛运用源自它出色的量子比特利用率,但这种映射方式将不可避免地造成态矢量复数空间的浪费和经典比特的额外补充,并不能直接构成经典与量子系统之间的完美映射。

角度编码:角度编码通过量子线路上的旋转门来编码输入的经典信息,旋转门的旋转角度由经典信息决定。对于一个长度为 N 的经典信息 x ,其第 i 维的特征 x_i 将作用到第 i 个量子比特所在线路,并进行旋转编码:

$$x \rightarrow |x\rangle = \bigotimes_{i=1}^N R(x_i) |0^N\rangle \quad (8)$$

其中, R 是通用单量子比特旋转门,通常可以是 R_x 门、 R_y 门、 R_z 门或者它们的变形与组合。角度编码后的量子比特与原经典数据的维度保持一致,这种方法不要求归一化,具备通用性。

大多数量子态编码方法都可以通过在量子态 $|x\rangle$ 上作用参数化量子线路来实现,线路中量子门的参数可由经典信息决定。由于不同的量子态制备方法在提取经典数据信息后所映射的量子比特结构存在较大的差别,因此量子态制备方式的选择对后续在量子系统里的酉算子操作和整个量子机器学习算法的计算复杂度都有深远影响。表 3 总结了具有代表性的量子态编码方法在量子比特数、时间复杂度及经典数据类型上的对比,其中 N 代表经典数据的规模。

表 3 量子态编码方法对比

编码方法	量子比特数	运行时间	经典数据类型
Basis encoding ^[160-161]	$\mathcal{O}(N)$	$\mathcal{O}(N)$	二进制量
Amplitude encoding ^[160-162]	$\mathcal{O}(\log N)$	$\mathcal{O}(N)$	连续变量
Angle encoding ^[161-162]	$\mathcal{O}(N)$	$\mathcal{O}(N)$	连续变量
Qsample encoding ^[160]	$\mathcal{O}(\log N)$	$\mathcal{O}(2^N)$	二进制量
Wavefunction encoding ^[162]	$\mathcal{O}(\log N)$	$\mathcal{O}(N)$	连续变量
Hamiltonian evolution ansatz encoding ^[18]	$\mathcal{O}(\log N)$	$\mathcal{O}(N)$	连续变量

3.2.3 线路模型

量子机器学习模型的线路设计与实现是当前量子人工智能领域最热门的研究方向,高效的量子线路设计将直接影响模型的最终表现。本文将阐述几种代表性的量子机器学习线路设计方法,以便为后续相关工作提供参考。

变分量子本征求解器:变分量子本征求解器

(Variational Quantum Eigensolver, VQE) 是一种用于求解量子系统的基态能量的量子机器学习线路,该方法被广泛应用于化学、生物计算等领域。VQE 的基本任务是制备参数化的量子态 $|\psi(\theta)\rangle$ 并估计出给定分子离散哈密顿量 H 的基态能量^[163]。其中,量子态 $|\psi(\theta)\rangle$ 可由参数化量子线路生成。在这个过程中,通常采用经典的优化方法来寻找一组

最优的参数 θ , 以最小化期望值 E , 如式(9)所示。

$$E = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \quad (9)$$

当期望值 E 最小时, 分子离散哈密顿量 H 近似等于基态能量。在 VQE 的设计中, 通过将哈密顿量进行量子态编码并使用量子计算机进行计算, 使得经量子计算机所演化生成后量子态的基态能量能够逼近待模拟分子的基态能量。VQE 的量子线路主要由若干参数化的单量子比特旋转门和 CNOT 门组成。由于 VQE 算法的量子线路深度较小, 它被认为是用 NISQ 设备解决实际问题的理想选择^[164]。

量子组合优化算法: 量子组合优化算法是一类用于求解最大割、最小路径覆盖、最小顶点覆盖等组合优化问题的量子机器学习算法, 其中最典型的是量子近似优化算法 (Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA), 被广泛认为有潜力在 NISQ 处理器上展现量子优势。QAOA 的基本思路是将组合优化问题转化为复杂哈密顿量 H , 然后使用量子计算机寻找该哈密顿量的最大期望, 从而得到最优解^[113]。这个过程将问题转化为在量子计算机上执行的量子线路, 执行计算量子系统哈密顿量最大期望的任务。为了计算哈密顿量的期望值, 需要将哈密顿量 H 转换相应的酉算子 U , 使其完成系统演化生成期望值最高的量子系统^[165]。

量子卷积神经网络: 经典卷积神经网络通常由卷积层、池化层等一系列不同的图像处理层交错组成, 由于其面向空间领域的特征模式提取方式和层间的稀疏连接结构, 在计算时往往拥有出色的泛化能力与学习速度。量子卷积神经网络同样具备这些关键性质, 它是一种受经典卷积神经网络启发而设计的量子机器学习模型, 由基于参数化量子线路的卷积层、池化层和全连接层等构成。量子卷积神经网络中的卷积层通常由两行参数化的双量子比特门构成, 以平移不变的方式交替作用于相邻的一对量子比特, 而池化层将对一部分的量子比特进行量子测量, 其结果控制附近相邻量子比特的酉旋转。输入量子态经过一系列卷积层与池化层映射到足够小的维度后, 将进入一个包含酉变换的全连接层, 最后通过量子测量输出量子比特得到神经网络计算的结果。量子卷积神经网络中的卷积层与池化层的数目是固定的, 这意味着对于 N 量子比特输入态的分类任务, 量子线路只需要 $\mathcal{O}(\log(N))$ 的参数规模^[166]。量子卷积神经网络的非线性来自于池化层中的量子测量和受控量子门, 它能有效地减少每层的自由度, 因此在仅存在池化层的情况下, 量子卷积神经网络

也能完成学习任务。另外, 量子卷积神经网络也被证明其不存在过去通常量子神经网络所存在的贫瘠高原效应, 因此随机初始化线路参数的策略对量子卷积神经网络仍然适用^[144]。

量子核方法: 在机器学习中, 核方法的思想是将低维的数据映射到更高甚至无限维度的特征空间中, 使其特征模式变得易于分析。此时, 算法不再显式地通过特征空间上的映射向量来解决初始问题, 而是使用定义在原始输入域中的核函数来进行计算。研究发现, 参数化量子线路与核方法具有类似的原理, 两者都具备数学框架, 均存在数据从低维到高维的映射与有限访问^[167]。故可以将参数化量子线路视为一个具有核函数的量子系统。与传统机器学习不同, 量子核方法是一种基于量子力学理论、利用量子态作为基本信息载体来实现对复杂系统的建模并求最优解的有效方法, 通过使用量子计算机将输入数据映射到高维复杂的希尔伯特空间进行隐式计算, 可以潜在地提高学习模型的性能^[168]。在量子核方法中, 通过使用量子态和量子线路对经典数据 x 的编码来构造经典数据 x 和量子态空间的特征映射, 如式(10)所示。

$$x \rightarrow |\phi(x)\rangle = U_\phi(x) |0 \cdots 0\rangle \quad (10)$$

其中, ϕ 代表从数据空间到在希尔伯特空间上的特征映射, U_ϕ 表示特征嵌入线路, 通过对基态进行量子态制备实现量子特征映射。量子核函数的定义是量子特征空间上被映射的经典数据对之间的内积, 如式(11)所示。

$$K(x_i, x_j) = |\langle \phi(x_i) | \phi(x_j) \rangle|^2 \quad (11)$$

研究发现^[169], 选择合适的量子核函数往往可以使量子机器学习模型得到更好的表达能力。例如, 比起采用 $\langle \phi(x_i) | \phi(x_j) \rangle$ 作为量子核函数, $|\langle \phi(x_i) | \phi(x_j) \rangle|^2$ 往往可以让量子机器学习算法学习到更多的函数类。通过使用量子计算机运行表示为 $U_\phi^\dagger(x_i) U_\phi(x_j)$ 的量子线路并对输出进行采样, 可以估计出式(11)中的量子核函数, 进而以支持向量机的方法对数据进行分类。

参数化玻色采样: 参数化玻色采样 (Parameterized Boson Sampling, PBS) 是一种通过构建参数化量子线路学习方法, 针对提升玻色采样效率的量子机器学习方案。玻色采样作为一类在量子光学领域中重要的研究课题, 同时也是一种完全无源的线性光学量子计算^[170]。PBS 模型基本思路是: 首先, 准备输入量子态, 即将 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的乘积态或由用户根据输入数据进行量子态编码; 然后使用量子线性光

学元件结合酉算子 U 分解原理构造含有移相器层和分束器层的参数化量子线路,使得输入态演化为不同结果的组合;最后通过分析结果中的量子信息得到经典问题的解。PBS 模型的核心是设计参数化量子线路中的移相器和分束器,其中移相器的作用是将光的频率从一个频率完全转化成另外一个频率,而分束器的作用是把光的频率成功分散在两个其他频率上,同时保持双向性^[171]。移相器和分束器均属于量子光学器件,移相器和分束器的变换均是满足酉性质的,他们和参数化量子线路中的酉算子 U 息息相关。在参数化量子线路设计中,任何 n 量子比特的酉算子 U 都可以分解为多个且最多只作用于两个量子比特的量子门的乘积。同理可知,PBS 模型中的酉算子 U 也可以分解为多个移相器和分束器的组合。PBS 模型中每一层参数化量子线路的固定结构都是一个小规模的互连张量网络,故可以实现更好地表示量子态,同时降低了计算成本,提升了玻色采样模型的计算效率。例如一个有 d 层、 m 个端口的参数化玻色采样量子线路,一共只需要 md 个移相器和 $(m-1)d$ 个分束器,参数数量也仅有 $(3m-1)d$ 个^[172]。2021 年,Shi 等人^[41] 实现了使用 PBS 模型完成函数拟合的量子机器学习任务,他们利用参数化量子线路的训练过程,提出了基于梯度的优化以迭代更新损失函数的方案,实现了使用玻色采样完成高斯函数拟合的机器学习任务。2022 年,Shankar 等人^[173] 实现了在数字数据集上训练一个含有参数化量子线路的玻色采样模型来生成相似的图像。

哈密顿量子线路学习:哈密顿学习是一类模拟量子系统哈密顿量的量子机器学习算法,由 Wiebe 等人^[60] 在 2014 年提出。哈密顿学习方法能够利用系统演化时间 t 推导具有特定哈密顿量的物理系统,时间更新规则为式(12)所示。

$$t = \|H(x_-) - H(x')\|^{-1} \quad (12)$$

其中,参数 x' , x_- 是贝叶斯优化中的先验知识, $H(x_-)$ 和 $H(x')$ 是处于中间状态 $|\psi_t\rangle$ 的哈密顿量。在 2014 年所提出的哈密顿学习模型中,量子线路是根据贝叶斯优化规则构建的,主要包括了两个部分:可信任量子线路和不可信任量子线路。在 SWAP 门作用下,可信任量子线路和不可信任量子线路相互反转,同时量子系统将随时间进行演化。最终,经过量子线路的计算和量子系统的演化,将模拟出期望得到的量子系统。近些年,随着参数化量子线路技术的提出和发展,Shi 等人^[33] 提出了参数化哈密顿量子

线路学习方法并设计出对应的量子线路,将哈密顿学习的时间复杂度从 $\mathcal{O}(n \log n)$ 降为 $\mathcal{O}(n)$,显著降低了模型的线路复杂度,同时利用该方法解决了图像分割问题。2023 年,Wang 等人^[174] 提出了一种基于混合量子-经典模型的哈密顿学习算法,利用测量数据处理,优化了量子系统中的强凸函数,成功实现了使用量子计算机在量子系统演化下对参数梯度进行估计。

3.2.4 优化方式

在量子机器学习中,优化算法用于更新参数化量子线路中的可训练参数,使得量子机器学习模型能够学习到数据的具体模式。为了获取目标函数关于线路参数的梯度,参数迁移准则(Parameter Shift Rule)被提出并发展为一种被广泛使用的策略^[175-176],它具有和有限差分近似法类似的形式,但表达更为精确。这种方法在真实的量子计算设备中十分有效,通过对量子线路的原始期望值进行两次估计,可以完成线路参数的一次偏移。除此之外,包括如梯度下降^[177]、共轭梯度法^[178]、L-BFGS 算法^[179]、Adam 算法^[180] 和量子梯度下降法^[181-182] 等也是目前常用的优化算法。梯度下降是最基本的优化算法,通过沿着损失函数的梯度方向进行参数更新,以减少损失函数的值。共轭梯度法是一种用于求解大规模线性方程组的优化算法,也可以应用于优化非线性函数。相比于普通梯度下降法,共轭梯度法能够更快地收敛到最优解,而且不需要存储整个梯度向量。L-BFGS 算法(Limited memory-Broyden Fletcher Goldfarb Shanno)是一种基于 BFGS 算法的优化算法,其主要特点是只需要存储有限数量的历史信息来近似计算黑塞矩阵(Hessian Matrix),从而在空间和时间上都比 BFGS 算法更加高效。Adam 算法(Adaptive Moment Estimation)是一种自适应学习率的优化算法,其主要思想是根据梯度的一阶矩估计和二阶矩估计来自适应地调整学习率,从而更好地适应不同参数的变化。量子梯度下降法将量子相位估计方法和经典梯度下降优化法则相结合,极大地降低了对量子线路等资源的需求,证明了该方法在复杂的高维数据的优化方面的量子优势^[183]。不同的优化方法往往各有利弊,其选择应当取决于实践中的具体场景。在数值模拟中,采用 Adam 等人^[184] 算法可以更快地完成优化,但使用真实的量子计算设备来部署经典计算机难以模拟的参数化量子线路时,参数迁移准则等策略自然将成为一个有利的选择。

3.3 应用层

应用层是量子机器学习系统层次架构的上层设计,目前,面向 NISQ 处理器的量子机器学习应用涉及到包括生物、化学和金融在内的多个领域^[13]。

3.3.1 量子生物计算

量子生物计算可以使用量子计算设备对生物领域的大分子(如蛋白质、DNA 等)的结构进行检索、模拟和分析^[185]。蛋白质是生命体系中重要的分子之一,其分子结构和功能的研究对于理解生物学过程具有重要的意义^[186]。量子机器学习被尝试用于预测蛋白质的折叠结构,以突破目前电子结构理论难以广泛应用于大尺度生物分子的困境。Cheng 等人^[187]使用广义能量分解方法和量子机器学习构建蛋白质的量子力学质量力场,这种方法可以在减少计算资源和人力成本的同时,保持和传统方法相当的准确度和预测能力,为研究蛋白质结构和功能提供了有效的工具。量子机器学习还可以通过处理大量的分子动力学模拟数据,建立量子神经网络模型,从而预测蛋白质的折叠状态^[188]。该方法能够做到比传统的分子动力学模拟更快速、准确,并可以更好地模拟蛋白质的结构和动态行为。在遗传学领域,量子机器学习可以用来预测 DNA 和 RNA 的三维结构和折叠状态,这对于理解基因表达和调控非常重要。总之,通过处理大量的分子动力学模拟和计算数据,量子机器学习可以有效归纳和总结 DNA 和 RNA 的折叠规律和机制,并能够预测不同条件下的折叠状态和动态行为。随着量子人工智能技术的发展,量子生物计算将给予生物行业、医疗行业更多动力并推动相关产业的蓬勃发展。

3.3.2 化学分子计算

量子机器学习可被应用于化学分子计算领域,以提高分子模拟的精度和效率,并加速新材料和新药物的研发^[189-190]。分子构象优化是一种将分子中的原子位置进行调整以优化某些性质的过程。量子机器学习可以通过学习分子中化学键的长度、角度和二面角等构象特征,预测最优构象,加速构象优化过程。Wieder 等人^[191]设计了一种迭代量子机器学习的方法,该方法可以将一系列分子参数(如原子类型、位置和电荷等)转化为势能函数,然后使用实验测量得到的自由能数据对这些势能函数进行拟合。一旦获得最佳拟合势能函数,就可以使用这些函数来预测其他分子的自由能,并推断它们在给定条件下的性质,例如在溶液中的互变异构体比例等。该方法有望在材料科学、化学和生物学等领域中得以

应用,帮助研究者更高效地分析化学反应。分子性质预测是预测分子的物理和化学性质,如极化率、电离势等。量子机器学习可以通过学习分子所包含的电子结构和化学键信息进而预测分子的性质,并提高预测的准确性^[192]。Xia 等人^[193]将量子机器学习应用于分子的电子结构计算中,提出一种利用量子计算的优势来加速电子结构计算的方法,这种方法可以显著提高计算速度,与传统方法相比,具有更高的精度和更小的误差。他们的研究成果表明,将量子计算和机器学习技术相结合,可以在电子结构计算等领域实现更高效的计算方法,这对于化学、材料科学等领域的研究具有重要意义。随着量子计算的发展和应用范围的扩大,相信量子机器学习在化学分子计算领域的应用将会越来越广泛。

3.3.3 高能物理分析

高能物理实验中的粒子碰撞往往会产生庞大的数据量,对海量数据的捕捉和信息特征提取是该领域一直以来面临的重要挑战之一。量子机器学习算法,利用量子计算机中随量子比特数量而指数增长的复杂希尔伯特空间带来的表征能力,将增强高能物理数据分析的性能。Terashi 等人^[194]测试了一些代表性的量子机器学习算法在高能物理数据分析上的性能表现,证明了量子机器学习在高能物理领域的应用可行性。Wu 等人^[195-196]使用量子核支持向量机在 IBM 的模拟器与硬件上完成了两个近期的大型强子对撞机物理分析任务,证明了量子机器学习在现实的物理数据集上具有区分信号与背景的能力,并对量子机器学习在未来测量希格斯玻色子自耦合和暗物质寻找等方面的应用进行了展望。此外,他们对高能物理中粒子数据和状态在量子机器学习中的表示方法也进行了研究^[197]。Chen 等人^[198]提出了一种用于高能物理事件分类的量子卷积神经网络,并在模拟测试下取得了比经典卷积神经网络更快的学习优势和测试精度。目前对于量子机器学习在高能物理领域的应用大部分还停留在处理光子传感器形成的经典信号中,随着相关研究的进一步深入,直接导入高能物理实验中的光子进入量子计算机进行学习或者进行量子模拟,可能会给高能物理分析赋予更出色的性能。

3.3.4 量子金融

量子机器学习在量子金融方向的应用主要是利用量子计算机的优势,结合机器学习算法来解决金融领域中的一些组合优化问题。在金融风险管理方面,量子机器学习可以通过对金融数据的大规模分

析和建模,提供更准确和高效的风险评估和管理方法,相比经典算法,量子机器学习算法通过并行处理和量子叠加态,可以在高维度空间中快速找到最优解^[199]。例如,可以利用量子机器学习算法来分析市场波动性,并进行预测,从而更好地管理投资组合的风险。El Bouchti 等人^[200]使用量子神经网络设计了预测金融风险的方法,他们使用量子神经网络来预测股票价格变化的实验,并展示了其比传统方法更高的预测准确性。在投资组合优化方面,通过量子机器学习算法,可以对大规模的金融数据进行分析 and 建模,提供更精准和高效的投资组合优化策略,并可以对投资组合的多样性和风险进行优化,以获得更高的投资回报。投资组合优化是金融领域中一个重要的问题,其目标是找到一组投资组合,以最小化风险并实现预期收益。该问题通常涉及到大量的数据和复杂的计算,因此传统的计算机算法往往需要很长时间才能求解。而量子机器学习算法具有并行性和指数加速的特性,可以更快地解决这个问题。Kerenidis 等人^[201]提出用分别用 Grover 搜索算法和量子振幅估计(Quantum Amplitude Estimation)算法两种量子算法来解决投资组合优化问题,并分析了它们的效率和实用性。实验结果表明,这些量子算法可以在更短的时间内找到投资组合的最优解,从而提高了金融投资的效率和收益。量子机器学习在金融领域中具有巨大的潜力,可以为投资者提供更准确和可靠的决策支持。

3.3.5 计算机视觉

量子机器学习在计算机视觉方向的应用非常广泛,可用于图像处理^[202]、目标检测^[203]、图像分类^[204]等任务。量子图像处理技术通过量子态叠加的性质来表征和处理图像,可以对图片进行模糊处理、去噪、增强等操作^[205],还可以进行边缘检测^[206]、特征提取^[207]等。在图像分类方面,量子机器学习算法可借助量子纠缠性在特征空间中找到更多的非平凡关联。Nguyen 等人^[208]提出了一种基于量子图像表示的量子机器学习方法,使用量子比特表示图像,然后将其输入到量子神经网络中进行训练,以执行图像分类任务。Li 等人^[204]提出了一种基于量子深度卷积神经网络的图像识别方法,该方法将传统的深度卷积神经网络的计算模块替换为量子门,使用量子比特来处理图像数据,并在量子计算机上进行训练和推理。作者在实验中测试了该方法在 MNIST 和 Fashion-MNIST 数据集上的性能,结果表明量子深度卷积神经网络在处理图像分类任务方面比经典卷

积神经网络表现出更好的性能,并且在量子计算机上实现了更快的训练和更高的准确率,展现了量子深度卷积神经网络在图像处理领域的广阔应用前景。Hur 等人^[209]充分利用了两量子比特的相互作用,基于量子卷积神经网络构建了一个图像分类器,并在实验中发现,在相似训练条件下他们所提出的 QCNN 算法明显优于 CNN 模型。此外,量子生成对抗网络作为一种具有代表性的量子生成模型,近年来受到了广泛的研究,尤其在计算机视觉领域得到了积极的应用。Zhou 等人^[210]提出了一种学习离散分布的量子机器学习生成对抗网络模型,该模型采用变分量子线路作为生成器,协助量子优化器来学习分布函数,将所设计的变分量子线路嵌入经典神经网络中,利用混合量子-经典计算框架,从而使生成器可以同时利用经典算法和量子算法进行学习。实验结果表明,与传统的对抗模型结构相比,用量子机器学习生成的对抗网络在图像生成方面表现更好,生成的图像更加清晰、多样化,并且在训练时也更加稳定。

3.3.6 自然语言处理

量子机器学习可以被用于构建和优化语言模型,以提高自然语言处理任务的准确率和效率^[211-212]。例如将量子主成分分析应用于词嵌入的生成和优化,将单词或短语映射到高维空间中的向量表示^[213]。Shi 等人^[33]将量子密度矩阵和投影测量应用于词向量的表征和处理中,并结合经典机器学习模型构建自然语言处理方法,完成了文本情感语义的分类任务。Zhang 等人^[214]提出了一种基于复值神经网络的量子语言模型方案,它采用端到端的方法以轻量级和可微分的方式构建和训练密度矩阵,验证了该方法在单词和句子的复杂表示上的强表征能力。量子机器学习适用于处理文本分类任务,同经典算法相比,量子算法可以在更短的时间内完成语言模型的训练和推理。例如,Shah 等人^[215]提出了一种量子空间图卷积网络来处理文本数据,并将其应用于各种文本分类任务,并通过实验证明了量子空间图卷积网络方法在多个数据集上的分类性能明显优于传统的文本分类方法和其他基于图神经网络的方法,其有效性和可行性得以验证并值得深入研究。量子机器学习也适用于处理机器翻译任务。Abbaszade 等人^[216]针对传统自然语言处理方法在处理大规模语料库时可能面临的计算量大和效率低等问题,提出了一种基于量子计算的机器翻译方法,他们利用量子比特来表示单词和句子,利用量子门操作进行

翻译。并进一步提出了一种基于量子模拟的语言模型,实验证明了该方法在多个数据集上的翻译性能比传统方法要好,并且具有更好的扩展性和可靠性,验证了量子自然语言处理在语言翻译中的潜力和应用前景。

4 量子机器学习领域的科学问题与发展趋势

量子机器学习是一个国内外备受关注的前沿领域,在当前尚有许多科学问题亟待解决。我们在此抛砖引玉,对我们认为的量子机器学习领域当前所面临的相对重要的科学问题以及发展趋势进行讨论。

4.1 量子机器学习的优势极限

4.1.1 算法优势的获取

量子计算所具备的纠缠和叠加等性质让人们对其相比经典算法所带来的指数级加速效果保持着乐观的期待,早期著名的 Shor 算法^[217]和 Grover 算法^[218]都在理论上证明它们在对应任务中分别对经典算法所展现的指数级和多项式级加速,而量子机器学习正是出于这种可能的潜在优势得到了广泛的研究。目前的许多量子机器学习算法相比于传统算法的时间复杂度都有多项式或准多项式级的降低,然而能达到像 HHL 算法^[54]那样指数级或者亚指数加速的算法依然稀缺。

从硬件来看,虽然量子计算领域已经取得了很大的进展,但是我们仍然缺乏一个可用的大规模通用容错量子计算机来运行这些量子算法。NISQ 处理器并不能承载较大规模的量子机器学习任务,能使用的量子比特往往在几十到百位,同时,量子噪声的存在阻碍了量子线路的深度向深层发展。没有充足的量子资源,在小规模计算设备上寻求量子加速不可避免地面临许多的束缚与困难。这也导致许多量子机器学习算法较大程度依赖于数值模拟,难以真正地展现出量子算法在信息承载和计算上所蕴含的量子优势。目前 Li 等人^[219]虽然在真实的量子处理器上实现了量子支持向量机,但我们并未在其中寻找到明显的量子优势。比较令人鼓舞的是 Huang 等人^[14]通过 40 个超导量子比特和 1300 个量子门在量子主成分分析任务中证明了量子优势,但还有更多的量子机器学习算法还未在量子计算机中得到实现或被证明量子优势。

从算法层面来说,经典数据在输入量子计算设备前,需要编码为量子态,而量子态编码的过程就需

要消耗一部分资源,这在算法初始增加了时间复杂度与空间复杂度^[160-161]。随后,对于量子计算的结果状态读取需要使用到量子测量进行观测,而这将无可挽回地导致量子系统塌缩,这使得量子机器学习的状态读取需要额外的时间与空间消耗,从而进一步消耗了量子加速带来的优势^[220]。除此之外,量子算法本身的设计还没有完全成熟,一些通过将欧几里得空间的经典信息简单地换为希尔伯特空间中的量子态矢量表示、进而将经典算法变化为量子机器学习算法的工作在实际设备上也存在一些潜在的实现问题。因此,如何设计一种有效的量子机器学习算法去克服或者绕过当前存在的挑战,并在真实量子计算设备上充分挖掘出潜在的量子优势,仍然是当前量子机器学习算法研究中一个十分重要的问题。此外,值得一提的是,Schuld 等人^[221]则对当前量子机器学习领域所流行的“量子加速”和“战胜经典机器学习”等叙事表达了批判性的观点,他们认为盲目以量子优势作为目标可能会将研究者的焦点限制在极少数问题上,而忽视了有关量子机器学习更重要、更有意义的研究。

4.1.2 混合框架的设计

目前,对混合量子-经典框架以及其中参数化量子线路的设计仍处于探索阶段。对于混合量子-经典框架来说,量子与经典部分在算法中的划分以及相应量子与经典数据的分层方式并没有明确的标准与定论。主要的混合框架层次划分方案存在两类,一类是完全的量子机器学习模型(即参数化量子线路)构成量子处理器部分,模型中的训练数据为量子态数据,经典计算机仅负责通过优化器训练量子机器学习模型中的可学习参数,梯度与模型参数信息为经典数据,目前绝大部分主流模型都采用这种层次划分^[75],因此本文也着重介绍这一类算法与模型;另一类的模型一部分是基于量子处理器的量子模型,其他层次结构仍然为经典模型,量子机器学习模型只对整个模型的某一层或者某一部分进行替换,因此模型中的梯度、参数信息以及经典模型部分的训练数据等都是经典数据,量子数据只存在于量子线路所在的一小部分^[222-223]。第二类方案出现较第一类更晚,由于量子部分较少,模拟与训练相对简单,可以更快地投入实际应用,但相应的,其中的量子优势也较难挖掘,更多作为一种基于当前可用量子资源较少情况下的设计方案。

事实上,这些方案与参数化量子线路都有着密切的联系。作为混合量子-经典框架中的重要量子

机器学习模型,参数化量子线路由于具备噪声耐受的性质,是目前最适合在NISQ处理器上实现量子优势的量子机器学习模型,也因此,参数化量子线路对线路规模也带来了限制,以充足量子比特资源寻求量子优势的研究受到了忽视,即便参数化量子线路更容易实现量子算法的实用化,如何保证量子神经网络具备经典神经网络的普适逼近能力,以及如何有效解决参数化量子线路中存在的硬件噪声、线路参数初始化、非线性缺失以及贫瘠高原等问题^[102],都是在未来应该重视研究的问题,而混合框架也会随着这些问题的突破迎来新的改变。

4.2 数据编码

量子态的制备和测量也是量子机器学习中的一个重要技术难题。在量子计算中,信息以量子态的形式存在,量子态的制备过程需要精确的控制和操作。然而,由于量子态极其脆弱,微小的误差和噪声都可能导致制备失败或结果偏差。同时,量子态的测量过程具有固有的概率性,无法像经典计算那样直接读取精确的结果。每次测量都会破坏量子态,因此需要进行大量重复测量以获得统计意义上的结果,这增加了计算的复杂性和时间成本。在早期量子机器学习的研究中,人们并没有对量子态编码给予较多的关注。然而,作为量子机器学习中连接经典与量子系统的必要过程,数据编码在整个算法与模型的实现中发挥着重要的桥梁作用,也因此近年来的研究过程中逐渐得到了重视。一方面,不同的数据编码方式将制备出具有不同结构的量子态,这种差异往往会导致算法学习到不同的决策边界。Schuld^[161]曾指出:如果在量子机器学习算法所定义的损失函数中包含一个正则化项,则其最小值将由量子态的数据编码完全定义,换句话说,数据编码的有效性也许将决定量子机器学习算法学习能力的上限。另一方面,制备量子态本身所需要的线路资源和时间消耗也会导致量子机器学习算法真正训练前就占用一部分线路深度,而这与NISQ处理器中为避免噪声错误而要求的低深度线路是存在冲突的。目前尚不存在一种能将经典信息完整映射到量子态中、同时又能充分体现量子信息承载优势的通用数据编码方式,也还不存在能够作为基线被广泛使用的公共量子数据集。此外,对于一些特殊的数据,如半结构化数据甚至一些计算结果等,有时也需要采用特殊的方式进行编码和预处理,这也是在量子机器学习的数据编码中需要重点关注的问题。因此,量子机器学习中的数据编码领域中还存在诸多

难题值得更加深入的研究。

4.3 量子神经网络设计与优化

对于当前的NISQ处理器而言,基于混合量子-经典框架的量子机器学习模型相比于纯量子的完全相干训练和学习策略更加适用。一方面,基于混合量子-经典框架的量子机器学习模型规避了当前量子设备线路资源不足和噪声过大的问题,仅将其中一部分模型交予参数化量子线路进行计算;另一方面,该模型中的参数化量子线路内所含参数作为经典信息是可训练且易于存储于经典计算机上的,这使得对于一个给定的输入与优化目标,可以很方便地通过经典的优化方式来训练线路参数,使得量子机器学习模型完成学习行为。

然而,目前许多量子机器学习模型都面临贫瘠高原问题,这意味着模型在训练过程中需要指数级的大量测量才能找到损失最小化的优化方向。这种损失梯度随着系统规模的扩大而呈现出指数级消失的现象可能与量子线路的梯度优化以及初始时的随机化过程相关,而Cerezo等人^[224]认为这更本质来源于维度灾难。与经典领域中由激活函数引起权重缩小所造成的梯度消失不同,非噪声诱导的贫瘠高原是随着量子比特数的增加而产生的,因此并不会像经典神经网络那样随网络层数的增加而产生^[225]。一些工作试图通过设计浅层的量子神经网络来避免贫瘠高原,量子卷积神经网络就是一个典型的尝试^[142,144,166,226]。

更值得警惕的是,贫瘠高原也被证明与参数化量子线路的表达能力和量子比特间的纠缠度直接相关^[227-229]。一方面,量子线路的表达能力越强,成本函数偏导的方差上限越小,结合成本梯度的无偏性,这意味着高表达能力的量子神经网络将更难训练;而另一方面,量子神经网络中可见单元和隐藏单元之间的纠缠过剩也会使信息存储在层与层之间的相关性中,进而阻碍训练。这些关系可能是反直觉的,因为过去提出的对于量子神经网络的评价指标正是主要集中在表达能力和纠缠能力方面。事实上,Schuld等人^[221]也指出,即使抛开可能产生的贫瘠高原,高表达能力的神经网络也有可能陷入到过拟合之中。因此,更全面的评价体系和指导标准对于目前在量子门的选择和排布上较为随意的量子神经网络仍然是重要且紧迫的。

此外,量子神经网络等模型的可扩展性也是研究者容易忽略的问题。最近已经有一些专门面向可扩展性的研究,但是当前已有的方法大多都还是基

于理论证明或者小规模实验,对于将实证结果推广到更大的问题规模会有怎样的表现,我们仍然知之甚少。随着量子比特规模增加而出现的贫瘠高原可能会限制量子模型的可扩展性,这种影响不仅限于参数化量子线路,包括量子核方法在内的其他量子机器学习方法同样也会出现指数集中^[230]。因此,如何针对当前存在的贫瘠高原现象,设计出在现实维度具备可扩展性的量子神经网络,这些都是当前的量子机器学习研究仍需要重视的问题。

4.4 容错量子机器学习

量子噪声和量子纠错技术是量子机器学习面临的主要障碍和困难之一。当前的 NISQ 处理器中,量子比特的操作过程会受到环境噪声的影响,导致量子态的退相干和误差积累。这种噪声和误差使得量子计算难以维持足够长的时间来完成复杂的计算任务。包括 Aaronson^[231] 在内的一些研究者指出,当前的量子计算技术尚未成熟,特别是在量子机器学习领域,许多所谓的突破性进展在实际操作中仍面临巨大障碍。例如,量子计算机的错误率较高,量子纠错技术尚未成熟,使得复杂的量子计算任务难以在现实中执行。Aaronson 等人^[232] 强调,当前的 NISQ 处理器在处理复杂计算时容易受到噪声和误差的影响,这大大限制了它们的实际应用能力。容错量子机器学习是指量子机器学习模型在执行过程中采用如逻辑比特^[19] 与量子噪声缓释^[233-235] 等的技术来缓解量子噪声的干扰,从而保证算法的鲁棒性与正确性。但在现阶段, NISQ 计算硬件在被噪声淹没前所能执行的量子门数量有限,这或使量子比特在计算过程中存在较大规模的浪费,从而对量子计算机的计算精度和效率造成影响。另一方面,量子计算机的物理系统对于噪声、干扰等非常敏感。因此研究针对噪音干扰问题的容错量子机器学习技术是必不可少的。量子计算与机器学习相结合的量子机器学习方法可以进一步提升信息处理的能力,增强智能数据挖掘的潜能。若其进一步结合容错技术,将有望提高量子机器学习方法处理实际应用问题的能力。当前,如何充分利用含噪量子计算的软硬件资源,研究出能够满足实际任务需求的容错量子机器学习技术,是量子机器学习在实用化进程中必须解决的一项瓶颈问题,对科学研究与工程产业方面都具有重要影响。

4.5 量子人工智能安全

依靠量子机器学习技术为云计算、物联网等应用提供安全保障是量子人工智能安全领域的重要内

容。由于量子设备本身的复杂性与特殊性,在本地客户端进行量子计算机平台搭建将面临着许多成本与维护上的困难,因此一个较为可行的方案是基于云服务的方式,由量子计算服务供应商向用户提供量子计算服务。目前云计算已经广泛应用于医疗、金融、交通等领域,其中的隐私保护问题日益受到研究人员的重视。用户在基于云服务使用量子计算机执行机器学习任务的同时,迫切希望个人隐私信息得以保障、算法和数据不被泄露,所以量子人工智能安全将成为一个重要的研究内容。对于经典隐私保护机器学习而言,现使用的技术主要有差分隐私、同态加密、安全多方计算等,这些技术对训练数据、训练模型以及预测结果都具备隐私保护的作用。但这些方案普遍存在计算复杂度高、效率低的问题,且随着量子计算和量子机器学习技术的飞速发展,依赖于传统密码学原理的隐私保护机器学习方案将受到冲击。例如,Shor 算法将对基于大整数分解问题的 RSA 算法造成本质威胁^[217] 并对传统隐私保护机器学习的安全性提出挑战。目前,越来越多的研究者认识到该问题的重要性,并在隐私保护量子机器学习方面做出了一些开拓性的工作,随着量子云平台的兴起,盲量子计算技术无疑具有重要的研究价值。潘建伟院士^[236] 带领研究团队证明了盲量子计算在仅有经典设备的本地具备可实现的能力。随着多服务器盲量子计算难题的解决^[237],使得量子服务器之间即使允许通信也能使得用户在完成委托计算的同时保证数据的安全,并有一系列可以支撑云服务的盲量子计算方案被相继提出^[238-239],也解决了中间人攻击和拒绝服务攻击等问题。Sheng 等人^[240] 提出一种称为“安全多方计算”的方法,它允许多个参与方在保护他们的私有数据的同时,共同训练一个量子机器学习模型。他们使用量子比特来代表数据,并利用量子通信和量子门操作来确保计算过程中的数据保密性和模型安全性。Park 等人^[241] 介绍了一种基于同态加密的方法,实现了在不泄露敏感数据的情况下进行量子机器学习。他们采用了一种新型的量子人工智能安全通信方式,使得量子机器学习过程中的通信量最小化,从而提高了计算效率。Li 等人^[242] 提出量子委托权益证明共识机制(QD-PoS),构建基于 QDPoS 的量子区块链方案,可有效抵抗量子计算机对区块链的攻击。与此同时,该团队基于量子签名、量子纠缠图态和量子投票等设计了一个完整的量子区块链方案,首次实现基于委托权益证明的量子共识机制提高了效率。图 8 对量子

人工智能安全领域的研究内容进行归纳,量子机器学习方法是其中的纽带,它使得量子器件在量子人工智能安全领域展现出重要作用。综上所述,随着

量子机器学习技术的不断发展,量子人工智能安全在未来必然会受到更多的关注,具有广泛的应用场景。

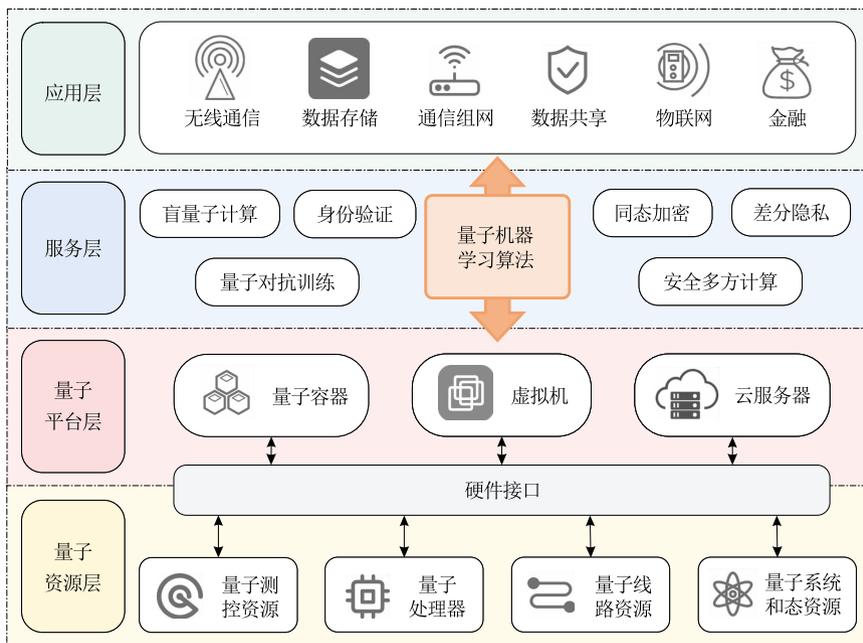


图 8 量子人工智能安全

4.6 量子机器学习应用

如何将量子机器学习应用于实际产业与工程中并充分发挥其固有的“量子优势”,是科学界长期关注的课题。量子机器学习特有的叠加、纠缠、干涉等量子效应可以在一些特定问题上带来经典计算机难以模拟的加速。与此同时,它还具备识别特定环境或场景下的数据模式的能力,在生物化学、物理模拟、自然语言处理、计算机视觉等领域均有广泛的应用前景。目前,量子处理器中的量子比特数目已经从最初的数个比特增长到了 1121 量子比特(2023 年底),并仍在以可观的速度进行更新迭代。人们普遍认为当量子比特数突破万位时,实用量子机器学习方法将有可能出现,而这个目标在不远的将来极有希望实现。随着量子计算技术的不断成熟,量子机器学习将逐步进入实用化阶段,量子机器学习的应用也将逐渐走向大数据化与大模型化。以 GPT-4 (Generative Pre-trained Transformer 4) 等为代表的多模态大语言模型为例,虽然这些模型都表现出了人工智能在处理人类语言上的巨大潜力,但它们仍旧是不可解释的黑盒模型。而自然语言处理的环节与量子力学存在着天然的类比关系^[243],伴随着量子计算的指数级加速,量子自然语言处理在足够的量子计算设备支撑下所构造的大语言模型可能拥

有更出色的表现,并更具有可解释性。

5 总 结

本文对面向 NISQ 处理器的量子机器学习研究进行了综述。首先从量子机器学习算法、混合量子-经典框架、参数化量子线路和量子神经网络这四个方面对量子机器学习领域的国内外研究进行了总结。并基于此提出了量子机器学习系统的层次架构,将量子机器学习划分为原理层、计算层和应用层。其中,以量子力学基础物理量及性质、量子系统和量子演化以及量子计算与机器学习结合机理等底层原理作为主要内容的原理层是层次架构的基石;由数据信息、数据编码、线路模型和优化方式这四个方面构成的计算层是架构的核心;应用层则作为上层设计,代表着量子机器学习的实用性进程。接着,本文讨论了面向 NISQ 处理器的量子机器学习所面临的科学问题与发展趋势。我们认为随着量子机器学习和量子器件的发展,未来量子机器学习面临的挑战在以下六个层面:量子机器学习的优势极限、数据编码、量子神经网络设计与优化、容错量子机器学习、量子人工智能安全和量子机器学习应用。最后,本文对量子机器学习进行总结。

参 考 文 献

- [1] Montanaro A. Quantum algorithms: An overview. *npj Quantum Information*, 2016, 2(1): 1-8
- [2] Zhang S, Li L. A brief introduction to quantum algorithms. *CCF Transactions on High Performance Computing*, 2022, 4(1): 53-62
- [3] Deutsch D. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1985, 400(1818): 97-117
- [4] Yao A C C. Quantum circuit complexity//*Proceedings of the 1993 IEEE 34th Annual Foundations of Computer Science*. Palo Alto, USA, 1993: 352-361
- [5] Chuang I L, Gershenfeld N, Kubinec M. Experimental implementation of fast quantum searching. *Physical Review Letters*, 1998, 80(15): 3408-3411
- [6] Preskill J. Quantum computing and the entanglement frontier. *arXiv preprint arXiv:1203.5813*, 2012
- [7] Arute F, Arya K, Babbush R, et al. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 2019, 574(7779): 505-510
- [8] Zhong H S, Wang H, Deng Y H, et al. Quantum computational advantage using photons. *Science*, 2020, 370(6523): 1460-1463
- [9] Wu Y, Bao W S, Cao S, et al. Strong quantum computational advantage using a superconducting quantum processor. *Physical Review Letters*, 2021, 127(18): 180501
- [10] Google Quantum AI and Collaborators. Quantum error correction below the surface code threshold. *Nature*, 2024, online
- [11] Anschuetz E R, Hu H Y, Huang J L, et al. Interpretable quantum advantage in neural sequence learning. *PRX Quantum*, 2023, 4(2): 020338
- [12] Villarrubia G, De Paz J F, Chamoso P, et al. Artificial neural networks used in optimization problems. *Neurocomputing*, 2018, 272: 10-16
- [13] Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, et al. Quantum machine learning. *Nature*, 2017, 549(7671): 195-202
- [14] Huang H Y, Broughton M, Cotler J, et al. Quantum advantage in learning from experiments. *Science*, 2022, 376(6598): 1182-1186
- [15] Gong M, Wang S, Zha C, et al. Quantum walks on a programmable two-dimensional 62-qubit superconducting processor. *Science*, 2021, 372(6545): 948-952
- [16] Boixo S, Isakov S V, Smelyanskiy V N, et al. Characterizing quantum supremacy in near-term devices. *Nature Physics*, 2018, 14(6): 595-600
- [17] McClean J R, Boixo S, Smelyanskiy V N, et al. Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 4812
- [18] Huang H Y, Broughton M, Mohseni M, et al. Power of data in quantum machine learning. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 2631
- [19] Google Quantum AI. Suppressing quantum errors by scaling a surface code logical qubit. *Nature*, 2023, 614(7949): 676-681
- [20] Lloyd S, Weedbrook C. Quantum generative adversarial learning. *Physical Review Letters*, 2018, 121(4): 040502
- [21] Schuld M, Killoran N. Quantum machine learning in feature Hilbert spaces. *Physical Review Letters*, 2019, 122(4): 040504
- [22] Arrazola J M, Bergholm V, Brádler K, et al. Quantum circuits with many photons on a programmable nanophotonic chip. *Nature*, 2021, 591(7848): 54-60
- [23] Madsen L S, Laudenbach F, Askarani M F, et al. Quantum computational advantage with a programmable photonic processor. *Nature*, 2022, 606(7912): 75-81
- [24] Kandala A, Mezzacapo A, Temme K, et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature*, 2017, 549(7671): 242-246
- [25] Bravyi S, Gosset D, König R. Quantum advantage with shallow circuits. *Science*, 2018, 362(6412): 308-311
- [26] Havlíček V, Córcoles A D, Temme K, et al. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature*, 2019, 567(7747): 209-212
- [27] Liu Y, Arunachalam S, Temme K. A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning. *Nature Physics*, 2021, 17(9): 1013-1017
- [28] Svore K, Geller A, Troyer M, et al. Q# enabling scalable quantum computing and development with a high-level DSL//*Proceedings of the Real World Domain Specific Languages Workshop*. Vienna, Austria, 2018: 1-10
- [29] Schuld M, Bocharov A, Svore K M, et al. Circuit-centric quantum classifiers. *Physical Review A*, 2020, 101(3): 032308
- [30] Monroe C, Campbell W C, Duan L M, et al. Programmable quantum simulations of spin systems with trapped ions. *Reviews of Modern Physics*, 2021, 93(2): 025001
- [31] Deng D L, Li X, Sarma S D. Quantum entanglement in neural network states. *Physical Review X*, 2017, 7(2): 021021
- [32] Ren W, Li W, Xu S, et al. Experimental quantum adversarial learning with programmable superconducting qubits. *Nature Computational Science*, 2022, 2(11): 711-717
- [33] Shi J, Wang W, Lou X, et al. Parameterized Hamiltonian learning with quantum circuit. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2022, 45(5): 6086-6095
- [34] Zhao R X, Shi J, Li X. QKSAN: A quantum kernel self-attention network. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2024, 46(12): 10184-10195
- [35] Deng Y H, Gong S Q, Gu Y C, et al. Solving graph problems using Gaussian boson sampling. *Physical Review Letters*, 2023, 130(19): 190601

- [36] Broughton M, Verdon G, McCourt T, et al. TensorFlow quantum: A software framework for quantum machine learning. arXiv preprint arXiv:2003.02989, 2020
- [37] Chu J, He X, Zhou Y, et al. Scalable algorithm simplification using quantum AND logic. *Nature Physics*, 2023, 19(1): 126-131
- [38] Bourassa J E, Alexander R N, Vasmer M, et al. Blueprint for a scalable photonic fault-tolerant quantum computer. *Quantum*, 2021, 5: 392
- [39] Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, 2018, 2: 79
- [40] Shi J, Li Z, Lai W, et al. Two end-to-end quantum-inspired deep neural networks for text classification. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 35(4): 4335-4345
- [41] Shi J, Tang Y, Lu Y, et al. Quantum circuit learning with parameterized boson sampling. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2021, 35(2): 1965-1976
- [42] Cerezo M, Verdon G, Huang H Y, et al. Challenges and opportunities in quantum machine learning. *Nature Computational Science*, 2022, 2(9): 567-576
- [43] Hoefler T, Häner T, Troyer M. Disentangling hype from practicality: On realistically achieving quantum advantage. *Communications of the ACM*, 2023, 66(5): 82-87
- [44] Chen S, Cotler J, Huang H Y, et al. The complexity of NISQ. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 6001
- [45] Zhang R, Wang J, Jiang N, et al. Quantum support vector machine based on regularized Newton method. *Neural Networks*, 2022, 151: 376-384
- [46] Eisert J. Entangling power and quantum circuit complexity. *Physical Review Letters*, 2021, 127(2): 020501
- [47] Acampora G, Chiatto A, Vitiello A. Genetic algorithms as classical optimizer for the quantum approximate optimization algorithm. *Applied Soft Computing*, 2023, 142: 110296
- [48] Fan F, Shi Y, Guggemos T, et al. Hybrid quantum-classical convolutional neural network model for image classification. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2024, 35(12): 18145-18159
- [49] Pan F, Chen K, Zhang P. Solving the sampling problem of the sycamore quantum circuits. *Physical Review Letters*, 2022, 129(9): 090502
- [50] Shi Jin-Jing, Xiao Zi-Meng, Li Xue-Long, et al. Progress in quantum machine learning. *Communications of the CCF*, 2023, 19(8): 69-76 (in Chinese)
(石金晶, 肖子萌, 李学龙等. 量子机器学习进展. *中国计算机学会通讯*, 2023, 19(8): 69-76)
- [51] Kak S C. Quantum neural computing. *Advances in Imaging and Electron Physics*, 1995, 94: 259-313
- [52] Smith G D, Steele N C, Albrecht R F, et al. An artificial neuron with quantum mechanical properties//*Proceedings of the Artificial Neural Nets and Genetic Algorithms*. Norwich, UK, 1998: 482-485
- [53] Altaisky M V. Quantum neural network. arXiv preprint arXiv: quant-ph/0107012, 2001
- [54] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, 2009, 103(15): 150502
- [55] Che Y, Gneiting C, Liu T, et al. Topological quantum phase transitions retrieved through unsupervised machine learning. *Physical Review B*, 2020, 102(13): 134213
- [56] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning. arXiv preprint arXiv:1307.0411, 2013
- [57] Aïmeur E, Brassard G, Gambs S. Quantum speed-up for unsupervised learning. *Machine Learning*, 2013, 90: 261-287
- [58] Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. Quantum support vector machine for big data classification. *Physical Review Letters*, 2014, 113(13): 130503
- [59] Gong C, Dong Z, Gani A, et al. Quantum k -means algorithm based on trusted server in quantum cloud computing. *Quantum Information Processing*, 2021, 20: 1-22
- [60] Wiebe N, Granade C, Ferrie C, et al. Hamiltonian learning and certification using quantum resources. *Physical Review Letters*, 2014, 112(19): 190501
- [61] Liu J G, Wang L. Differentiable learning of quantum circuit born machines. *Physical Review A*, 2018, 98(6): 062324
- [62] Mitarai K, Negoro M, Kitagawa M, et al. Quantum circuit learning. *Physical Review A*, 2018, 98(3): 032309
- [63] Yu C H, Gao F, Lin S, et al. Quantum data compression by principal component analysis. *Quantum Information Processing*, 2019, 18: 1-20
- [64] Chen S, Cotler J, Huang H Y, et al. Exponential separations between learning with and without quantum memory//*Proceedings of the 2021 IEEE 62nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)*. Denver, USA, 2022: 574-585
- [65] Dang Y, Jiang N, Hu H, et al. Image classification based on quantum K -Nearest-Neighbor algorithm. *Quantum Information Processing*, 2018, 17: 1-18
- [66] Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. Quantum principal component analysis. *Nature Physics*, 2014, 10(9): 631-633
- [67] Wiebe N, Kapoor A, Svore K. Quantum algorithms for nearest-neighbor methods for supervised and unsupervised learning. arXiv preprint arXiv:1401.2142, 2014
- [68] Anguita D, Ridella S, Rivieccio F, et al. Quantum optimization for training support vector machines. *Neural Networks*, 2003, 16(5/6): 763-770
- [69] Jerbi S, Fiderer L J, Poulsen Nautrup H, et al. Quantum machine learning beyond kernel methods. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 517
- [70] Li W, Deng D L. Recent advances for quantum classifiers. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2022, 65(2): 220301
- [71] Wiebe N, Kapoor A, Svore K M. Quantum deep learning. arXiv preprint arXiv:1412.3489, 2014

- [72] Alchieri L, Badalotti D, Bonardi P, et al. An introduction to quantum machine learning: From quantum logic to quantum deep learning. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3: 1-30
- [73] Zhang Y H, Di Ventura M. Transformer quantum state: A multipurpose model for quantum many-body problems. *Physical Review B*, 2023, 107(7): 075147
- [74] Huang H L, Xu X Y, Guo C, et al. Near-term quantum computing techniques: Variational quantum algorithms, error mitigation, circuit compilation, benchmarking and classical simulation. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2023, 66(5): 250302
- [75] Cerezo M, Arrasmith A, Babbush R, et al. Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 2021, 3(9): 625-644
- [76] Nielsen M A, Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2010
- [77] Bang J, Lim J, Kim M S, et al. Quantum learning machine. arXiv preprint arXiv:0803.2976, 2008
- [78] Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, 2014, 5(1): 4213
- [79] Bauer B, Wecker D, Millis A J, et al. Hybrid quantum-classical approach to correlated materials. *Physical Review X*, 2016, 6(3): 031045
- [80] Dallaire-Demers P L, Killoran N. Quantum generative adversarial networks. *Physical Review A*, 2018, 98(1): 012324
- [81] Hu L, Wu S H, Cai W, et al. Quantum generative adversarial learning in a superconducting quantum circuit. *Science Advances*, 2019, 5(1): eaav2761
- [82] Zeng J, Wu Y, Liu J G, et al. Learning and inference on generative adversarial quantum circuits. *Physical Review A*, 2019, 99(5): 052306
- [83] Situ H, He Z, Wang Y, et al. Quantum generative adversarial network for generating discrete distribution. *Information Sciences*, 2020, 538: 193-208
- [84] Huang H L, Du Y, Gong M, et al. Experimental quantum generative adversarial networks for image generation. *Physical Review Applied*, 2021, 16(2): 024051
- [85] Li J, Topaloglu R O, Ghosh S. Quantum generative models for small molecule drug discovery. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, 2021, 2: 1-8
- [86] Herr D, Obert B, Rosenkranz M. Anomaly detection with variational quantum generative adversarial networks. *Quantum Science and Technology*, 2021, 6(4): 045004
- [87] Bravo-Prieto C. Quantum autoencoders with enhanced data encoding. *Machine Learning: Science and Technology*, 2021, 2(3): 035028
- [88] Huang R, Tan X, Xu Q. Learning to learn variational quantum algorithm. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2022, 34(11): 8430-8440
- [89] Cross A. The IBM Q experience and QISKit open-source quantum computing software//APS March Meeting Abstracts. Los Angeles, USA, 2018: L58-003
- [90] Bergholm V, Izaac J, Schuld M, et al. PennyLane: Automatic differentiation of hybrid quantum-classical computations. arXiv preprint arXiv:1811.04968, 2018
- [91] Guo J, Lou H, Yu J, et al. isQ: An integrated software stack for quantum programming. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, 2023, 4: 1-16
- [92] Guo J, Ying M. Software pipelining for quantum loop programs. *IEEE Transactions on Software Engineering*, 2022, 49(4): 2815-2828
- [93] Li R, Wu B, Ying M, et al. Quantum supremacy circuit simulation on Sunway TaihuLight. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems*, 2019, 31(4): 805-816
- [94] Ying M. *Foundations of Quantum Programming*. San Francisco, USA: Morgan Kaufmann, 2024
- [95] Ying M. Floyd-hoare logic for quantum programs. *ACM Transactions on Programming Languages and Systems*, 2012, 33(6): 1-49
- [96] Ying M, Ying S, Wu X. Invariants of quantum programs: Characterisations and generation. *ACM SIGPLAN Notices*, 2017, 52(1): 818-832
- [97] Ying M, Yu N, Feng Y, et al. Verification of quantum programs. *Science of Computer Programming*, 2013, 78(9): 1679-1700
- [98] Ying M, Feng Y. *Model Checking Quantum Systems: Principles and Algorithms*. Cambridge: Cambridge University Press, 2021
- [99] Li G, Zhou L, Yu N, et al. Projection-based runtime assertions for testing and debugging quantum programs. *Proceedings of the ACM on Programming Languages*, 2020, 4(OOPSLA): 1-29
- [100] Ying M. Model checking for verification of quantum circuits// *Proceedings of the Formal Methods: The 24th International Symposium (FM 2021)*. Virtual, Springer International Publishing, 2021: 23-39
- [101] Shi J, Xiao Z, Shi H, et al. QuanTest: Entanglement-guided testing of quantum neural network systems. *ACM Transactions on Software Engineering and Methodology*, 2024, Online
- [102] Sim S, Johnson P D, Aspuru-Guzik A. Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms. *Advanced Quantum Technologies*, 2019, 2(12): 1900070
- [103] Hubregtsen T, Pichlmeier J, Stecher P, et al. Evaluation of parameterized quantum circuits: On the relation between classification accuracy, expressibility, and entangling capability. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3: 1-19
- [104] Benedetti M, Lloyd E, Sack S, et al. Parameterized quantum circuits as machine learning models. *Quantum Science and Technology*, 2019, 4(4): 043001

- [105] Ostaszewski M, Grant E, Benedetti M. Structure optimization for parameterized quantum circuits. *Quantum*, 2021, 5: 391
- [106] Patel R B, Ho J, Ferreyrol F, et al. A quantum Fredkin gate. *Science Advances*, 2016, 2(3): e1501531
- [107] Benedetti M, Grant E, Wossnig L, et al. Adversarial quantum circuit learning for pure state approximation. *New Journal of Physics*, 2019, 21(4): 043023
- [108] Delgado A, Hamilton K E. Unsupervised quantum circuit learning in high energy physics. *Physical Review D*, 2022, 106(9): 096006
- [109] Watabe M, Shiba K, Chen C C, et al. Quantum circuit learning with error backpropagation algorithm and experimental implementation. *Quantum Reports*, 2021, 3(2): 333-349
- [110] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S. A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv:1411.4028*, 2014
- [111] Xue C, Chen Z Y, Wu Y C, et al. Effects of quantum noise on quantum approximate optimization algorithm. *Chinese Physics Letters*, 2021, 38(3): 030302
- [112] Guerreschi G G, Matsuura A Y. QAOA for Max-Cut requires hundreds of qubits for quantum speed-up. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 6903
- [113] Shaydulin R, Wild S M. Exploiting symmetry reduces the cost of training QAOA. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, 2021, 2: 1-9
- [114] Liu H L, Wu Y S, Wan L C, et al. Variational quantum algorithm for the Poisson equation. *Physical Review A*, 2021, 104(2): 022418
- [115] Mohseni N, Navarrete-Benlloch C, Byrnes T, et al. Deep recurrent networks predicting the gap evolution in adiabatic quantum computing. *Quantum*, 2023, 7: 1039
- [116] McClean J R, Romero J, Babbush R, et al. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. *New Journal of Physics*, 2016, 18(2): 023023
- [117] Xia R, Kais S. Hybrid quantum-classical neural network for calculating ground state energies of molecules. *Entropy*, 2020, 22(8): 828
- [118] Yu C H, Gao F, Wen Q Y. An improved quantum algorithm for ridge regression. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2019, 33(3): 858-866
- [119] Tang E. Quantum principal component analysis only achieves an exponential speedup because of its state preparation assumptions. *Physical Review Letters*, 2021, 127(6): 060503
- [120] Qiang X, Wang Y, Xue S, et al. Implementing graph-theoretic quantum algorithms on a silicon photonic quantum walk processor. *Science Advances*, 2021, 7(9): eabb8375
- [121] Brokowski T J, Chowdhury F T, Smith L D, et al. Spin chemistry simulation via hybrid-quantum machine learning// *Proceedings of the 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)*. Broomfield, USA, 2022: 867-868
- [122] Li Q, Huang Y, Jin S, et al. Quantum spectral clustering algorithm for unsupervised learning. *Science China Information Sciences*, 2022, 65(10): 200504
- [123] Wang Z, Wei S, Long G L, et al. Variational quantum attacks threaten advanced encryption standard based symmetric cryptography. *Science China Information Sciences*, 2022, 65(10): 200503
- [124] McCulloch W S, Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *The Bulletin of Mathematical Biophysics*, 1943, 5: 115-133
- [125] Schmidhuber J. Deep learning in neural networks: An overview. *Neural Networks*, 2015, 61: 85-117
- [126] Najafabadi M M, Villanustre F, Khoshgoftaar T M, et al. Deep learning applications and challenges in big data analytics. *Journal of Big Data*, 2015, 2(1): 1-21
- [127] Kemker R, McClure M, Abitino A, et al. Measuring catastrophic forgetting in neural networks// *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. 2018, 32(1): 3390-3398
- [128] Fisher M P A. Quantum cognition: The possibility of processing with nuclear spins in the brain. *Annals of Physics*, 2015, 362: 593-602
- [129] Hameroff S, Penrose R. Orchestrated reduction of quantum coherence in brain microtubules: A model for consciousness. *Mathematics and Computers in Simulation*, 1996, 40(3/4): 453-480
- [130] Behrman E C, Nash L R, Steck J E, et al. Simulations of quantum neural networks. *Information Sciences*, 2000, 128(3/4): 257-269
- [131] Gupta S, Zia R K P. Quantum neural networks. *Journal of Computer and System Sciences*, 2001, 63(3): 355-383
- [132] Maeda M, Suenaga M, Miyajima H. Qubit neuron according to quantum circuit for XOR problem. *Applied Mathematics and Computation*, 2007, 185(2): 1015-1025
- [133] Schuld M, Sinayskiy I, Petruccione F. The quest for a quantum neural network. *Quantum Information Processing*, 2014, 13: 2567-2586
- [134] Schuld M, Sinayskiy I, Petruccione F. Simulating a perceptron on a quantum computer. *Physics Letters A*, 2015, 379(7): 660-663
- [135] Farhi E, Neven H. Classification with quantum neural networks on near term processors. *arXiv preprint arXiv:1802.06002*, 2018
- [136] Zhou N, Hu Y, Gong L, et al. Quantum image encryption scheme with iterative generalized Arnold transforms and quantum image cycle shift operations. *Quantum Information Processing*, 2017, 16: 1-23
- [137] Killoran N, Bromley T R, Arrazola J M, et al. Continuous-variable quantum neural networks. *Physical Review Research*, 2019, 1(3): 033063
- [138] Steinbrecher G R, Olson J P, Englund D, et al. Quantum optical neural networks. *npj Quantum Information*, 2019, 5(1): 60

- [139] Beer K, Bondarenko D, Farrelly T, et al. Training deep quantum neural networks. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 808
- [140] Skolik A, McClean J R, Mohseni M, et al. Layerwise learning for quantum neural networks. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3: 1-11
- [141] Abbas A, Sutter D, Zoufal C, et al. The power of quantum neural networks. *Nature Computational Science*, 2021, 1(6): 403-409
- [142] Cong I, Choi S, Lukin M D. Quantum convolutional neural networks. *Nature Physics*, 2019, 15(12): 1273-1278
- [143] Bausch J. Recurrent quantum neural networks. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2020, 33: 1368-1379
- [144] Pesah A, Cerezo M, Wang S, et al. Absence of barren plateaus in quantum convolutional neural networks. *Physical Review X*, 2021, 11(4): 041011
- [145] Tang Y, Yan J. GraphQNTK: Quantum neural tangent kernel for graph data. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2022, 35: 6104-6118
- [146] Yan G, Tang Y, Yan J. Towards a native quantum paradigm for graph representation learning: A sampling-based recurrent embedding approach//*Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. Washington, USA, 2022: 2160-2168
- [147] Li Q, Gkoumas D, Sordani A, et al. Quantum-inspired neural network for conversational emotion recognition//*Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. Palo Alto, USA, 2021, 35(15): 13270-13278
- [148] Zhang P, Niu J, Su Z, et al. End-to-end quantum-like language models with application to question answering//*Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*. New Orleans, USA, 2018: 5666-5678
- [149] Shi J, Chen T, Lai W, et al. Pretrained quantum-inspired deep neural network for natural language processing. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2024, 54(10): 5973-5985
- [150] Zhang Y, Song D, Zhang P, et al. A quantum-inspired multimodal sentiment analysis framework. *Theoretical Computer Science*, 2018, 752: 21-40
- [151] Jiang Y, Zhang P, Gao H, et al. A quantum interference inspired neural matching model for ad-hoc retrieval//*Proceedings of the 43rd International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*. Virtual Event, China, 2020: 19-28
- [152] Guo Guang-Can. Research status and future of quantum information technology. *SCIENTIA SINICA Informationis*, 2020, 50(9): 1395-1406(in Chinese)
(郭光灿. 量子信息技术研究现状与未来. *中国科学: 信息科学*, 2020, 50(9): 1395-1406)
- [153] Everett III H. "Relative state" formulation of quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, 1957, 29(3): 454-462
- [154] Hasegawa Y. Quantum thermodynamic uncertainty relation for continuous measurement. *Physical Review Letters*, 2020, 125(5): 050601
- [155] Wei Shi-Jie, Wang Tao, Ruan Dong, et al. Quantum Computing. *SCIENTIA SINICA Informationis*, 2017, 47(10): 1277-1299(in Chinese)
(魏世杰, 王涛, 阮东等. 量子算法的一些进展. *中国科学: 信息科学*, 2017, 47(10): 1277-1299)
- [156] Albash T, Lidar D A. Adiabatic quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(1): 015002
- [157] Huang Yi-Ming, Lei Hang, Li Xiao-Yu. A survey on quantum machine learning. *Chinese Journal of Computers*, 2018, 41(1): 145-163(in Chinese)
(黄一鸣, 雷航, 李晓瑜. 量子机器学习算法综述. *计算机学报*, 2018, 41(1): 145-163)
- [158] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. Quantum random access memory. *Physical Review Letters*, 2008, 100(16): 160501
- [159] Li Xiao-Yu, Zhu Qin-Sheng, Yu Lian-Hui, et al. Research of quantum machine learning datasets. *Information Technology & Standardization*, 2023, (1): 19-25(in Chinese)
(李晓瑜, 朱钦圣, 余莲会等. 量子机器学习数据集研究. *信息技术与标准化*, 2023, (1): 19-25)
- [160] Schuld M, Petruccione F. *Supervised Learning with Quantum Computers*. Berlin, Germany: Springer, 2018
- [161] Schuld M. Supervised quantum machine learning models are kernel methods. *arXiv preprint arXiv:2101.11020*, 2021
- [162] LaRose R, Coyle B. Robust data encodings for quantum classifiers. *Physical Review A*, 2020, 102(3): 032420
- [163] Parrish R M, Hohenstein E G, McMahon P L, et al. Quantum computation of electronic transitions using a variational quantum eigensolver. *Physical Review Letters*, 2019, 122(23): 230401
- [164] Yuan X. A quantum-computing advantage for chemistry. *Science*, 2020, 369(6507): 1054-1055
- [165] Moussa C, Wang H, Bäck T, et al. Unsupervised strategies for identifying optimal parameters in quantum approximate optimization algorithm. *EPJ Quantum Technology*, 2022, 9(1): 11
- [166] Wei S J, Chen Y H, Zhou Z R, et al. A quantum convolutional neural network on NISQ devices. *AAPPS Bulletin*, 2022, 32: 1-11
- [167] Mengoni R, Di Pierro A. Kernel methods in quantum machine learning. *Quantum Machine Intelligence*, 2019, 1(3-4): 65-71
- [168] Schuld M, Petruccione F. *Machine Learning with Quantum Computers*. Berlin, Germany: Springer, 2021
- [169] Peters E, Caldeira J, Ho A, et al. Machine learning of high dimensional data on a noisy quantum processor. *npj Quantum Information*, 2021, 7(1): 161
- [170] Tillmann M, Dakić B, Heilmann R, et al. Experimental boson sampling. *Nature Photonics*, 2013, 7(7): 540-544

- [171] Conti C. Training Gaussian boson sampling by quantum machine learning. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3(2): 26
- [172] Jašek J, Jiráková K, Bartkiewicz K, et al. Experimental hybrid quantum-classical reinforcement learning by boson sampling: How to train a quantum cloner. *Optics Express*, 2019, 27(22): 32454-32464
- [173] Shankar S, Towsley D. Variational boson sampling// *Proceedings of the Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*. Grenoble, France, 2022
- [174] Wang Y, Li G, Wang X. A hybrid quantum-classical Hamiltonian learning algorithm. *Science China Information Sciences*, 2023, 66(2): 129502
- [175] Wierichs D, Izaac J, Wang C, et al. General parameter-shift rules for quantum gradients. *Quantum*, 2022, 6: 677
- [176] Li J, Yang X, Peng X, et al. Hybrid quantum-classical approach to quantum optimal control. *Physical Review Letters*, 2017, 118(15): 150503
- [177] Bolduc E, Knee G C, Gauger E M, et al. Projected gradient descent algorithms for quantum state tomography. *npj Quantum Information*, 2017, 3(1): 44
- [178] Andrei N. *Nonlinear Conjugate Gradient Methods for Unconstrained Optimization*. Berlin, Heidelberg: Springer International Publishing, 2020
- [179] Berahas A S, Nocedal J, Takáč M. A multi-batch L-BFGS method for machine learning// *Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems*. Barcelona, Spain, 2016: 1063-1071
- [180] Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization. *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, 2014
- [181] Sweke R, Wilde F, Meyer J, et al. Stochastic gradient descent for hybrid quantum-classical optimization. *Quantum*, 2020, 4: 314
- [182] Kerenidis I, Prakash A. Quantum gradient descent for linear systems and least squares. *Physical Review A*, 2020, 101(2): 022316
- [183] Reberstrost P, Schuld M, Wossnig L, et al. Quantum gradient descent and Newton's method for constrained polynomial optimization. *New Journal of Physics*, 2019, 21(7): 073023
- [184] Schuld M, Bergholm V, Gogolin C, et al. Evaluating analytic gradients on quantum hardware. *Physical Review A*, 2019, 99(3): 032331
- [185] Outeiral C, Strahm M, Shi J, et al. The prospects of quantum computing in computational molecular biology. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2021, 11(1): e1481
- [186] Li R Y, Di Felice R, Rohs R, et al. Quantum annealing versus classical machine learning applied to a simplified computational biology problem. *npj Quantum Information*, 2018, 4(1): 14
- [187] Cheng Z, Du J, Zhang L, et al. Building quantum mechanics quality force fields of proteins with the generalized energy-based fragmentation approach and machine learning. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2022, 24(3): 1326-1337
- [188] Hong Z, Wang J, Qu X, et al. Quantum convolutional neural network on protein distance prediction// *Proceedings of the 2021 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*. Shenzhen, China, 2021: 1-8
- [189] von Lilienfeld O A. Quantum machine learning in chemical compound space. *Angewandte Chemie International Edition*, 2018, 57: 4164-4169
- [190] Li W, Huang Z, Cao C, et al. Toward practical quantum embedding simulation of realistic chemical systems on near-term quantum computers. *Chemical Science*, 2022, 13: 8953-8962
- [191] Wieder M, Fass J, Chodera J D. Fitting quantum machine learning potentials to experimental free energy data: Predicting tautomer ratios in solution. *Chemical Science*, 2021, 12: 11364-11381
- [192] Sajjan M, Li J, Selvarajan R, et al. Quantum machine learning for chemistry and physics. *Chemical Society Reviews*, 2022, 51: 6475-6573
- [193] Xia R, Kais S. Quantum machine learning for electronic structure calculations. *Nature Communications*, 2018, 9(1): 4195
- [194] Terashi K, Kaneda M, Kishimoto T, et al. Event classification with quantum machine learning in high-energy physics. *Computing and Software for Big Science*, 2021, 5: 1-11
- [195] Wu S L, Chan J, Guan W, et al. Application of quantum machine learning using the quantum variational classifier method to high energy physics analysis at the LHC on IBM quantum computer simulator and hardware with 10 qubits. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 2021, 48(12): 125003
- [196] Wu S L, Sun S, Guan W, et al. Application of quantum machine learning using the quantum kernel algorithm on high energy physics analysis at the LHC. *Physical Review Research*, 2021, 3(3): 033221
- [197] Wu S L, Yoo S. Challenges and opportunities in quantum machine learning for high-energy physics. *Nature Reviews Physics*, 2022, 4(3): 143-144
- [198] Chen S Y C, Wei T C, Zhang C, et al. Quantum convolutional neural networks for high energy physics data analysis. *Physical Review Research*, 2022, 4(1): 013231
- [199] Orús R, Mugel S, Lizaso E. Quantum computing for finance: Overview and prospects. *Reviews in Physics*, 2019, 4: 100028
- [200] El Bouchti A, Tribis Y, Nahhal T, et al. Forecasting financial risk using quantum neural networks// *Proceedings of the 2018 Thirteenth International Conference on Digital Information Management (ICDIM)*. Berlin, Germany, 2018: 386-390

- [201] Kerenidis I, Prakash A, Szilágyi D. Quantum algorithms for portfolio optimization//Proceedings of the 1st ACM Conference on Advances in Financial Technologies. Zurich, Switzerland, 2019: 147-155
- [202] Yao X W, Wang H, Liao Z, et al. Quantum image processing and its application to edge detection: Theory and experiment. *Physical Review X*, 2017, 7(3): 031041
- [203] Gupta H, Varshney H, Sharma T K, et al. Comparative performance analysis of quantum machine learning with deep learning for diabetes prediction. *Complex & Intelligent Systems*, 2022, 8(4): 3073-3087
- [204] Li Y C, Zhou R G, Xu R Q, et al. A quantum deep convolutional neural network for image recognition. *Quantum Science and Technology*, 2020, 5(4): 044003
- [205] Wang Z, Xu M, Zhang Y. Review of quantum image processing. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2022, 29(2): 737-761
- [206] Geng A, Moghiseh A, Redenbach C, et al. A hybrid quantum image edge detector for the NISQ era. *Quantum Machine Intelligence*, 2022, 4(2): 15
- [207] Yang C H H, Qi J, Chen S Y C, et al. Decentralizing feature extraction with quantum convolutional neural network for automatic speech recognition//Proceedings of the ICASSP 2021-2021 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). Toronto, Canada, 2021: 6523-6527
- [208] Nguyen T, Paik I, Sagawa H, et al. Quantum machine learning with quantum image representations//Proceedings of the 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE). Broomfield, USA, 2022: 851-854
- [209] Hur T, Kim L, Park D K. Quantum convolutional neural network for classical data classification. *Quantum Machine Intelligence*, 2022, 4(1): 3
- [210] Zhou N R, Zhang T F, Xie X W, et al. Hybrid quantum-classical generative adversarial networks for image generation via learning discrete distribution. *Signal Processing: Image Communication*, 2023, 110: 116891
- [211] Wu S, Li J, Zhang P, et al. Natural language processing meets quantum physics: A survey and categorization//Proceedings of the 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing. Online, Punta Cana, Dominican Republic, 2021: 3172-3182
- [212] Zhang Peng, Ma Xin-Dian, Song Da-Wei. A survey of quantum language models. *SCIENTIA SINICA Informationis*, 2018, 48(11): 1467-1486(in Chinese)
(张鹏, 马鑫典, 宋大为. 量子语言模型研究综述. *中国科学: 信息科学*, 2018, 48(11): 1467-1486)
- [213] Di Sipio R, Huang J H, Chen S Y C, et al. The dawn of quantum natural language processing//Proceedings of the ICASSP 2022-2022 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP). Singapore, 2022: 8612-8616
- [214] Zhang P, Hui W, Wang B, et al. Complex-valued neural network-based quantum language models. *ACM Transactions on Information Systems*, 2022, 40(4): 1-31
- [215] Shah S M A, Ge H, Haider S A, et al. A Quantum spatial graph convolutional network for text classification. *Computer Systems Science & Engineering*, 2021, 36(2): 369-382
- [216] Abbaszade M, Salari V, Mousavi S S, et al. Application of quantum natural language processing for language translation. *IEEE Access*, 2021, 9: 130434-130448
- [217] Shor P W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM Review*, 1999, 41(2): 303-332
- [218] Grover L K. A fast quantum mechanical algorithm for database search//Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing. Philadelphia PA, USA, 1996: 212-219
- [219] Li Z, Liu X, Xu N, et al. Experimental realization of a quantum support vector machine. *Physical Review Letters*, 2015, 114(14): 140504
- [220] Du Y, Tu Z, Yuan X, et al. Efficient measure for the expressivity of variational quantum algorithms. *Physical Review Letters*, 2022, 128(8): 080506
- [221] Schuld M, Killoran N. Is quantum advantage the right goal for quantum machine learning?. *PRX Quantum*, 2022, 3(3): 030101
- [222] Ovalle-Magallanes E, Avina-Cervantes J G, Cruz-Aceves I, et al. Hybrid classical-quantum convolutional neural network for stenosis detection in X-ray coronary angiography. *Expert Systems with Applications*, 2022, 189: 116112
- [223] Bhatta S, Dang J. Multiclass seismic damage detection of buildings using quantum convolutional neural network. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, 2024, 39(3): 406-423
- [224] Cerezo M, Larocca M, García-Martín D, et al. Does provable absence of barren plateaus imply classical simulability? Or, why we need to rethink variational quantum computing. *arXiv preprint arXiv:2312.09121*, 2023
- [225] Larocca M, Thanasilp S, Wang S, et al. A review of barren plateaus in variational quantum computing. *arXiv preprint arXiv:2405.00781*, 2024
- [226] Henderson M, Shakya S, Pradhan S, et al. Quantum convolutional neural networks: Powering image recognition with quantum circuits. *Quantum Machine Intelligence*, 2020, 2(1): 2
- [227] Holmes Z, Sharma K, Cerezo M, et al. Connecting ansatz expressibility to gradient magnitudes and barren plateaus. *PRX Quantum*, 2022, 3(1): 010313
- [228] Patti T L, Najafi K, Gao X, et al. Entanglement devised barren plateau mitigation. *Physical Review Research*, 2021, 3(3): 033090
- [229] Ortiz Marrero C, Kieferová M, Wiebe N. Entanglement-induced barren plateaus. *PRX Quantum*, 2021, 2(4): 040316

- [230] Thanasilp S, Wang S, Cerezo M, et al. Exponential concentration in quantum kernel methods. *Nature Communications*, 2024, 15(1): 5200
- [231] Aaronson S. How much structure is needed for huge quantum speedups?. *arXiv preprint arXiv:2209.06930*, 2022
- [232] Aaronson S, Chia N H, Lin H H, et al. On the quantum complexity of closest pair and related problems. *arXiv preprint arXiv:1911.01973*, 2019
- [233] Endo S, Benjamin S C, Li Y. Practical quantum error mitigation for near-future applications. *Physical Review X*, 2018, 8(3): 031027
- [234] van den Berg E, Mineev Z K, Kandala A, et al. Probabilistic error cancellation with sparse Pauli-Lindblad models on noisy quantum processors. *Nature Physics*, 2023, 19(8): 1116-1121
- [235] Kim Y, Eddins A, Anand S, et al. Evidence for the utility of quantum computing before fault tolerance. *Nature*, 2023, 618(7965): 500-505
- [236] Huang H L, Zhao Q, Ma X, et al. Experimental blind quantum computing for a classical client. *Physical Review Letters*, 2017, 119(5): 050503
- [237] Li Q, Chan W H, Wu C, et al. Triple-server blind quantum computation using entanglement swapping. *Physical Review A*, 2014, 89(4): 040302
- [238] Li Q, Liu C, Peng Y, et al. Blind quantum computation where a user only performs single-qubit gates. *Optics & Laser Technology*, 2021, 142: 107190
- [239] Li Q, Li Z, Chan W H, et al. Blind quantum computation with identity authentication. *Physics Letters A*, 2018, 382(14): 938-941
- [240] Sheng Y B, Zhou L. Distributed secure quantum machine learning. *Science Bulletin*, 2017, 62(14): 1025-1029
- [241] Park H, Kim P, Kim H, et al. Efficient machine learning over encrypted data with non-interactive communication. *Computer Standards & Interfaces*, 2018, 58: 87-108
- [242] Li Q, Wu J, Quan J, et al. Efficient quantum blockchain with a consensus mechanism QDPoS. *IEEE Transactions on Information Forensics and Security*, 2022, 17: 3264-3276
- [243] Zeng W, Coecke B. Quantum algorithms for compositional natural language processing. *arXiv preprint arXiv:1608.01406*, 2016



SHI Jin-Jing, Ph. D. , professor. Her research interests include quantum computing and quantum machine learning.

XIAO Zi-Meng, M. S. candidate. His research interests include quantum computing and quantum machine learning.

WANG Wen-Xuan, Ph. D. candidate. Her research interests include quantum computing and quantum machine learning.

ZHANG Shi-Chao, Ph. D. , professor. His research interests include big data processing and artificial intelligence.

LI Xue-Long, Ph. D. , professor. His research interests include image processing, and artificial intelligence.

Background

Quantum machine learning belongs to the area of quantum artificial intelligence which has become a frontier discipline of key concern both domestically and internationally, and it explores the efficient parallel processing and comprehensive application methods of quantum computation in artificial intelligence, expected to break through the problems of poor interpretability and difficulty deriving optimal solutions faced by the field of artificial intelligence. This review article provides an overview of the research and developments in quantum machine learning. From the perspective of the quantum machine learning system framework, we establish a hierarchical structure model for the quantum machine learning system, summarize the scientific problems and challenges

faced by the field of quantum machine learning based on the development characteristics of quantum artificial intelligence at the current stage and analyze the future development trends in this area. It holds significant importance in promoting the deployment of quantum science and technology development strategy in China.

This article was funded by the National Natural Science Foundation of China under Grant No. 62272483, the Natural Science Foundation for Distinguished Young Scholars of Hunan Province under Grant No. 2023JJ10078 and the Postgraduate Scientific Research Innovation Project of Hunan Province under Grant No. CX20240266.