



基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法

王芙蓉 杨帆 张亚 李世中 王鹤峰

Matrix low-rank approximate quantum algorithm based on singular value decomposition

Wang Fu-Rong Yang Fan Zhang Ya Li Shi-Zhong Wang He-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 150201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210411

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210411>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

强散射过程中基于奇异值分解的光学传输矩阵优化方法

Transmission matrix optimization based on singular value decomposition in strong scattering process

物理学报. 2018, 67(10): 104202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172688>

新型缩减矩阵构造加快特征基函数法迭代求解

New reduced matrix construction accelerated iterative solution of characteristic basis function method

物理学报. 2019, 68(17): 170201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190572>

核磁共振量子信息处理研究的新进展

New research progress of nuclear magnetic resonance quantum information processing

物理学报. 2018, 67(22): 220301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180754>

金刚石氮空位中心自旋量子调控

Quantum control of nitrogen-vacancy center in diamond

物理学报. 2018, 67(12): 120302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180755>

基于Tikhonov正则化参数矩阵的激光吸收光谱燃烧场二维重建光路设计方法

Development of beam arrangement design for tunable diode laser absorption tomography reconstruction based on Tikhonov regularization parameter matrix

物理学报. 2020, 69(22): 227801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201144>

量子计算与量子模拟

Quantum computation and quantum simulation

物理学报. 2018, 67(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180710>

基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法*

王芙蓉^{1) #} 杨帆^{2) #} 张亚^{1) †} 李世中¹⁾ 王鹤峰³⁾

1) (中北大学机电工程学院, 太原 030051)

2) (清华大学物理系, 北京 100084)

3) (西安交通大学理学院, 西安 710049)

(2021年3月3日收到; 2021年3月29日收到修改稿)

在大数据时代, 高效的数据处理至关重要, 量子计算具有平行计算能力, 为方便处理数据提供了新的解决途径. 本文提出了一个基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法, 复杂度为 $O[\log(pq)]$. 在核磁共振量子计算系统完成了算法的原理演示, 选择一个 8×8 维的图像矩阵, 实现共振跃迁算法的哈密顿量 \mathcal{H} 的时间演化, 用量子态层析法分别读出密度矩阵的不同成分, 对密度矩阵进行重构, 保真度为 99.84%, 在误差范围内验证了本文提出的矩阵低秩近似量子算法的正确性. 而通过奇异值分解计算低秩矩阵的经典算法的复杂度是 $O[\text{poly}(pq)]$, 量子算法与经典算法相比, 实现了指数加速.

关键词: 低秩近似, 奇异值分解, 量子计算, 共振跃迁

PACS: 02.10.Yn, 03.67.Lx, 07.05.Kf, 07.05.Pj

DOI: 10.7498/aps.70.20210411

1 引言

随着互联网的技术不断提高, 大数据时代正在到来. 矩阵作为处理大数据的基本工具之一, 常被用于解决许多实际问题. 大多数情况下, 矩阵表示在空间和时间复杂度上会随着数据的规模呈二次方增长, 这导致数据处理困难. 因此, 去除冗余信息, 只保留有用的信息, 构造低秩矩阵, 快速高效地近似一个目标矩阵, 可提高机器学习和数据管理的效率. 目前, 低秩矩阵已被广泛用于模式识别^[1]、图像压缩和检测^[2,3]、图像处理^[4,5]、人脸识别^[6]等应用领域.

矩阵的低秩近似是一种稀疏表示形式, 可以在保持原矩阵的诸多性质同时, 减少冗余和噪声, 降低了数据的存储空间和计算复杂度. 常用的矩阵

低秩近似方法包括: 低秩矩阵恢复^[7], 主成分分析法 (PCA)^[8]、非负矩阵分解 (NMF)^[9]、奇异值分解 (SVD)、核映射中的核主成分分析 (KPCA) 和拉普拉斯特征映射 (LE) 等.

2014年, Tipping 和 Bishop^[10] 采用 PCA 方法降秩, 他们将图像分割成 8×8 个不重叠的块, 进行均匀量化将比特平均分配, 用变换后的前 4 个主成分对整个图像进行重构, 模型似然度最大化后, 将数据分配给重构误差最小的分量进行图像编码, 最终的比特率为 0.5 比特/像素, 误差为 6.2×10^{-2} . 与 PCA 法相比, KPCA 法既可以保持全局属性又可以获取非线性信息. 2017年, 徐梦珂^[11] 提出基于二维核主成分分析法的拉普拉斯特征映射 (2D-KPCA+LE) 算法进行人脸识别. 在此方法中, 用 2D-PCA 算法训练样本去相关性, 之后利用核主成分分析法提取非线性特征, 最后用拉普拉斯特征映

* 山西省研究生教育创新项目 (批准号: 2020SY344)、国家重点研发计划 (批准号: 2017YFA0303700)、国家自然科学基金 (批准号: 11774197) 和广东省重点基础研究发展计划 (批准号: 2018B030325002) 资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: zy@nuc.edu.cn

射再一次降秩, 其算法识别率高, 计算复杂度低. 2001年, Tsuge S^[12]等提出将 NMF^[13]应用于逐项文档矩阵中文档向量的降秩. NMF 将非负矩阵分解为两个非负矩阵, 将分解后的矩阵之一视为基本向量. 通过将文档向量投影到由这些基本向量形成的较低维空间上来实现降秩. 大多矩阵的低秩近似方法都避免不了求解特征值或奇异值分解, 因此研究基于奇异值分解的低秩近似方法是提高大数据处理效率的一个核心问题.

量子计算基于量子力学原理, 利用量子叠加性、量子纠缠等特性进行计算, 在处理特定问题时相比经典计算能指数加速. 利用叠加态原理, 将某些类型的数据存入量子系统所需要的物理资源也远小于经典系统. 近年来, 许多求解线性代数问题的量子算法被提出, 例如量子线性方程组算法^[14]、量子支持向量机^[15]、量子主成分分析^[16]、量子奇异值分解算法^[17]等, 也提出了许多量子数据存储、读取的方案. 在某些情况下, 这些量子算法和方案在时间复杂度或空间复杂度上, 相比经典计算机有着指数级优势. 目前只拥有中等规模、带噪声的量子计算机, 大多数基于通用量子计算模型的量子算法还无法实现. 利用有限的物理资源对量子算法进行验证, 是目前量子计算的重要研究方向.

本文提出了一种量子低秩近似算法, 该方法保留了图像数据的主要成分而去掉那些相对不重要或者由噪声引入的成分, 利用主成分分析的原理, 实现了对图像数据矩阵“奇异值分解”、“奇异值过滤”、“矩阵重构”的步骤, 相比于经典计算, 本量子算法复杂度有指数加速. 首次利用该量子算法替代了以往的相位估计算法, 大量地减少了对辅助比特的需求, 成功地实现了对图像矩阵的低秩近似, 验证了算法的正确性.

2 理论

2.1 矩阵的低秩近似与奇异值分解

设 \mathbf{A} 是一个秩为 r 的任意矩阵, 若 r 远小于 \mathbf{A} 的行数和列数, 则称 \mathbf{A} 是低秩矩阵. 给定一个秩为 r 的矩阵 \mathbf{A} , 欲求其最近似矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$, 该问题可形式化为

$$\begin{aligned} \min_{\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{m \times n}} \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_F, \\ \text{s.t. rank}(\tilde{\mathbf{A}}) = k. \end{aligned} \quad (1)$$

其中 k 是近似矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 的秩, $k \leq r$.

任何实矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 都可以分解为

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \quad (2)$$

其中, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 和 $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 都是么正矩阵, $\mathbf{\Sigma}$ 是对角元为从大到小依次排列的奇异值 σ_i 的对角矩阵. 对矩阵 \mathbf{A} 进行奇异值分解后, 将矩阵 $\mathbf{\Sigma}$ 中的 $r - k$ 个最小的奇异值置零获得矩阵 $\mathbf{\Sigma}_k$, 仅保留最大的 k 个奇异值, 则

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{U}_k \mathbf{\Sigma}_k \mathbf{V}_k^T \quad (3)$$

(3) 式就是 (1) 式的最优解 (Eckart-Young-Mirsky 定理), 其中 \mathbf{U}_k 和 \mathbf{V}_k 分别是 (2) 式中前 k 列组成的矩阵^[18].

2.2 量子低秩近似算法

假设对于矩阵 $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{p \times q}$, 有 1 个量子操作黑箱 (oracle) \mathbf{O}_A :

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_A |i\rangle |j\rangle |0\rangle &= |i\rangle |j\rangle |a_{ij}\rangle, \\ \forall i \in \{1, \dots, p\}, \forall j \in \{1, \dots, q\}. \end{aligned} \quad (4)$$

即给定 i 和 j , \mathbf{O}_A 能给出矩阵 \mathbf{A} 对应的元素值. 考虑到一般图像在量子态上的编码方式, 使用振幅编码制备如下量子态:

$$|\psi_A\rangle = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q a_{ij} |i\rangle |j\rangle. \quad (5)$$

以上是将图像制备成量子态的过程, 也就是初始化的过程. 该步可利用量子随机存储器 (QRAM)^[19,20], 采用 $O[\log(pq)]$ 个步骤实现, 当然也可以采用其他初始化方法^[21].

对于矩阵 \mathbf{A} 的奇异值分解:

$$\mathbf{A}_{m \times n} = \mathbf{U}_{m \times r} \mathbf{S}_{r \times r} \mathbf{V}_{r \times n}^T, \quad (6)$$

若只选取由大到小前 r' 个大于阈值 τ 的奇异值重构出低秩近似矩阵 \mathbf{A}' , 则有

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \sum_{i=r'+1}^r \mathbf{u}_i \mathbf{s}_i \mathbf{v}_i^T = \frac{1}{2} [\mathbf{A} + F(\mathbf{A})], \quad (7)$$

其中, F 作用于矩阵 \mathbf{A} 时, 会将第 $r' + 1$ 到 r 个成分 $\mathbf{u}_i \mathbf{s}_i \mathbf{v}_i^T$ 奇异值取反, 而其他不发生改变. 初始化完成后的量子态:

$$|\psi_A\rangle = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q a_{ij} |i\rangle |j\rangle = \sum_{k=1}^r \sigma_k |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle, \quad (8)$$

则 F 可以利用相位估计算法^[22] 和阈值 τ 对应的反相算符 \mathbf{O}_τ 高效实现. 相位估计算法可以总结为以

下算符:

$$U_{\text{PE}}(\mathbf{A}) = \left(\mathbf{F}_T^\dagger \otimes \mathbf{I}^B \right) \left(\sum_{\tau=0}^{T-1} |\tau\rangle\langle\tau|^C \otimes e^{i\mathbf{A}\tau t_0/T} \right) \times \left(\mathbf{H}^{\otimes t} \otimes \mathbf{I}^B \right), \quad (9)$$

其中寄存器 B 和 C 分别用来存储厄米矩阵 \mathbf{A} 的本征值的估计值和量子态 $|\psi\rangle$, \mathbf{F}_T^\dagger 是量子傅里叶变换算符的逆算符, $\mathbf{H}^{\otimes t}$ 是 t 比特 Hadamard 门. \mathbf{O}_τ 可以认为是一个量子过滤器算符,

$$\mathbf{O}_\tau = \left(-\sum_{i=1}^{\tau'} |i\rangle\langle i| + \sum_{j=\tau'+1}^{2^n-1} |j\rangle\langle j| \right)^C \otimes \mathbf{I}^B, \quad (10)$$

即对寄存器 C 中所有量子态二进制表示小于 τ 的态相位取反, 而其他则不变.

(7) 式需要计算两个矩阵的差, 早期的酉算子乘积量子计算模型无法直接计算^[23], 利用对偶量子计算 (DQC)^[24–26], 可以在量子计算机上实现 (7) 式, 对偶量子计算在包括计算空间和辅助比特的大空间中是酉的, 酉演化算符可以写成:

$$U_{\text{DQC}} = \mathbf{H} \otimes \mathbf{I} (|0\rangle\langle 0| \otimes U_0 + |1\rangle\langle 1| \otimes U_1) \mathbf{H} \otimes \mathbf{I}, \quad (11)$$

之后对辅助量子比特进行测量, 当测量结果为 0 时, 就得到了非么正算符 $(U_0 + U_1)/2$ 作用在量子态上的结果.

对于初始态 $|\psi_{\mathbf{A}}\rangle = \sum_{k=1}^r \sigma_k |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle$, 由于 \mathbf{A} 大多是非厄米矩阵, 相位估计前需要先厄米化. 显然, $|\mathbf{u}_k\rangle$ 是矩阵 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ 的本征态, 而 $|\mathbf{v}_k\rangle$ 是矩阵 $\mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}$ 的本征态, 且有共同的本征值 $\lambda_k = \sigma_k^2$. 因此可以利用厄米矩阵 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ 来实现. 矩阵 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ 可以通过预先计算得到, 也可以通过 QRAM 制备量子态 $|\psi_{\mathbf{A}}\rangle$ 后, 对量子态求偏迹, 其密度矩阵为 $\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger}$ ^[27]:

$$\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger} = \text{tr}_j (|\psi_{\mathbf{A}}\rangle\langle\psi_{\mathbf{A}}|) = \sum_{i,i'=1}^p \sum_{j=1}^q a_{ij} a_{i'j}^* |i\rangle\langle i'|, \quad (12)$$

其中 $\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger}$ 是与厄米矩阵 $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ 对应的密度矩阵, 二者矩阵元相同, 仅相差一个常数.

综上, 量子图像低秩近似算法可以概括如下.

输入 图像矩阵 \mathbf{A} 对应的量子态 $|\psi_{\mathbf{A}}\rangle$ 、么正演化算符 $e^{-i\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger} t_0}$ 、阈值 τ 对应的反相算符 \mathbf{O}_τ .

输出 \mathbf{A} 矩阵的低秩近似矩阵 \mathbf{A}' 对应的量子态 $|\psi_{\mathbf{A}'}\rangle = \sum_{k=1}^{r'} \sigma_k |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle$.

算法步骤

1) 在 3 个量子寄存器上准备初始态:

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle^R (|0\rangle|0\rangle \cdots |0\rangle)^C (|\psi_{\mathbf{A}}\rangle)^B. \quad (13)$$

2) 对初始态运行量子相位估计算法, 其中么正演化算符为 $e^{-i\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger} t_0}$. 通过求偏迹制备出密度算符 $\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger}$, 再根据 Lloyd 等^[16] 在 2014 年提出的方法, 用 $\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger}$ 有效地实现算符 $e^{-i\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger} t_0}$, 之后得到量子态:

$$|\psi_1\rangle = U_{\text{PE}}(\rho_{\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger}) |\psi_0\rangle = |0\rangle^R \sum_{k=1}^r \sigma_k |\sigma_k^2\rangle^C |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle. \quad (14)$$

3) 利用 DQC 实现 (7) 式. 令 $U_0 = I$, $U_1 = \mathbf{O}_{\tau^2}$, 得到:

$$|\psi_2\rangle = U_{\text{DQC}} |\psi_1\rangle = |0\rangle^R \sum_{k=1}^{r'} \sigma_k |\sigma_k^2\rangle^C |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle + |1\rangle^R \sum_{l=r'+1}^r \sigma_l |\sigma_l^2\rangle^C |\mathbf{u}_l\rangle |\mathbf{v}_l\rangle, \quad (15)$$

其中前 r' 个奇异值 σ_k 大于等于设定的阈值 τ .

4) 运行步骤 2) 的逆运算, 并测量寄存器 R . 当测量结果为 0 时, 忽略寄存器 R 和 C , 剩余部分就是所需要的低秩近似矩阵 \mathbf{A}' 对应的量子态 $|\psi_{\mathbf{A}'}\rangle$:

$$|\psi_3\rangle = \sum_{k=1}^{r'} \sigma_k |\mathbf{u}_k\rangle |\mathbf{v}_k\rangle = |\psi_{\mathbf{A}'}\rangle. \quad (16)$$

现在分析这一算法的复杂度. 利用 QRAM 制备初始态 $|\psi_0\rangle$, 需要的时间是 $O[\log(pq)]$. 相位估计算法中, 一般有 $t_0 = O(\kappa/\varepsilon)$. 考虑到目标是奇异值大于 τ 的部分, 则 $O(\kappa) = O(\sigma_{\max}/\tau)$. 对于低秩近似问题, 通常要求近似后的矩阵和初始矩阵差别

很小, 即 $\frac{\sum_{i=1}^{r'} \sigma_i}{\sum_{j=1}^r \sigma_j} \approx 1$, κ 通常不随矩阵维度呈

多项式增长. 相位估计算法的复杂度一般是 $O[t_0^2 \varepsilon^{-1} \log(pq)]$. 而该算法中相位估计算法中 ε 的大小对于远离阈值 τ 的奇异值几乎不产生影响, 只会对接近 τ 的部分产生误差, 因此常数误差不会对大多数被过滤的成分产生影响, 不影响算法输出的低秩性. 综上所述, 该量子低秩近似算法的复杂度为 $O[\log(pq)]$. 作为对比, 经典计算机解决基于奇异值分解的低秩近似问题需要的时间是 $O[\text{poly}(pq)]$. 本量子算法的复杂度有指数提高.

2.3 代替相位估计算法的共振跃迁量子算法

本文的量子低秩近似算法, 在实验上实现有以下困难. 首先是制备初始态 $|\psi_A\rangle$. 在有 QRAM 的情况下, 可以高效的制备初始态, 但目前为止还没有真正实现 QRAM 功能的量子器件, 因此要选择其他方式制备. 其次是相位估计算法需要一个额外的寄存器存放本征值的估计值, 需要大量的量子比特, 这也是所有基于相位估计的算法的共同问题, 使得目前在硬件上实现该类算法非常困难; 除此, 实现密度算符 ρ_{AA^\dagger} 和演化算符 $e^{-i\rho_{AA^\dagger}t_0}$ 也需要大量的辅助比特. 在设计算法时, 通常假设拥有足够多的比特资源, 只考虑时间复杂度的优势, 但目前量子计算机仍在研发当中, 很难提供足够多的比特资源.

针对以上问题, 分别提出了对应的解决方案: 1) 利用梯度下降优化脉冲 (GRAPE)^[28,29], 将量子态从赝纯态演化到初始态 $|\psi_A\rangle$, 算法直接从初始态 $|\psi_A\rangle$ 开始, 而制备该初始态的方式不会影响到本文算法的正确性. 2) 为了减少量子比特数, 选择量子共振跃迁算法来替代相位估计算法以减少辅助比特的数量, 只用一个辅助比特即可实现这一步骤.

相位估计在该问题中的作用是先区分目标奇异向量 (需要保留的) 和非目标奇异向量 (不需要保留的), 以便之后通过测量进行筛选, 量子共振跃迁算法也可以实现对特定的量子态的选择. 这里, 对量子共振跃迁算法简单介绍 (图 1).

在两个原本独立的量子系统中, 产生了比较微弱 (相比系统本身的能量) 的相互作用, 例如两个分子距离逐渐靠近等, 若两个系统的一些能级能量

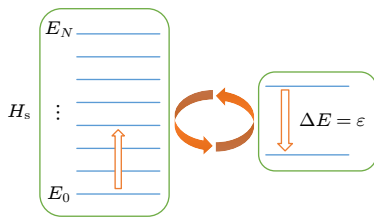


图 1 共振跃迁. 一个本征值未知的系统与另一个二能级辅助系统存在相互作用. H_s 是左边系统的哈密顿量, 假设 $E_0 = 0$. 当辅助系统的激发态能级 ϵ 接近任意特征值 E_i 时, 两个系统之间会发生共振跃迁

Fig. 1. Resonant transition. A system with unknown eigenvalues interacts with another two-level auxiliary system. H_s is the Hamiltonian of the system on the left. Assuming $E_0 = 0$, when the excited state energy level ϵ of the auxiliary system is close to any eigenvalue E_i , a resonance transition will occur between the two systems.

接近, 则部分能量会在两个系统的这些能级上跃迁. 基于这一物理现象, Wang^[30] 设计了一种算法, 并在核磁量子计算平台上成功计算了 2 比特低能等效水分子哈密顿量的基态^[31]. 该算法的步骤如下.

1) 将量子态初始化到 $|0\rangle \otimes |\Phi\rangle$.

2) 模拟哈密顿量 \mathcal{H} 并进行时间演化, \mathcal{H} 具体形式由下式给出:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}\epsilon\sigma_z \otimes \mathbf{I} + \mathbf{H}_T + c\sigma_x \otimes \mathbf{B}, \quad (17)$$

其中, σ 是泡利算符, c 是两个系统的相互作用强度, \mathbf{B} 是相互算作算符, 需要求解的系统哈密顿量为 \mathbf{H}_s , 在 \mathbf{H}_T 中引入参考点, $\mathbf{H}_T = \epsilon_0|0\rangle\langle 0| \otimes |\Phi\rangle\langle \Phi| + |1\rangle\langle 1| \otimes \mathbf{H}_s$, 其中 $|\Phi\rangle$ 是初始态.

3) 演化一段时间后测量第 1 个辅助比特, 若发生共振, 则测量结果可能为 1 或 0. 当结果为 1 时得到目标态. 结果为 0 时重复上一步, 再测量, 直到测量结果为 1.

理论上共振跃迁算法可以替代相位估计算法, 利用较少的辅助比特实现目标. 以图 2(a) 的校徽为例, 利用共振跃迁算法进行数值模拟, 结果如图 2(b)—(d) 所示.

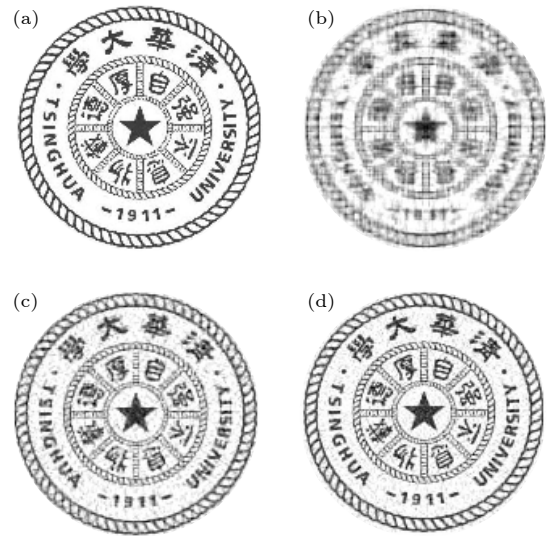


图 2 共振跃迁量子算法数值模拟 (a) 300×300 的原图像; (b), (c), (d) 分别是前 10, 30, 50 个奇异值恢复的图像. 50 个奇异值已经可以很好地恢复图像, 可以辨认校徽的细节、文字

Fig. 2. Numerical simulation of resonance transition by quantum algorithm. Panel (a) is the original image of 300×300 . Panels (b), (c) and (d) are the images recovered by the first 10, 30 and 50 singular values respectively. 50 singular values can be a good restoration of the image, the details and words of the school emblem are legible.

从数值模拟的结果来看, 共振跃迁量子算法可以很好地实现预期目标.

3 实验演示及结果分析

3.1 实验参数和步骤

为了减少量子比特数, 首先选择 1 个 8×8 维的图像矩阵, 并预先进行厄米化, 表示该矩阵需要的量子比特数是 3. 之后利用共振跃迁算法, 只需要 1 个辅助比特, 共计需要 4 量子比特, 可以在核磁共振量子计算平台进行演示. 原始矩阵 M 是由图 3 所示数字 1 的灰度图像在 Matlab 中对应的 8×8 维实矩阵:

$$\begin{bmatrix} 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 132 & 164 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 126 & 106 & 144 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 185 & 140 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 178 & 140 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 178 & 140 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 170 & 128 & 255 & 255 & 255 \\ 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 & 255 \end{bmatrix}, \quad (18)$$

考虑到辅助比特只有 1 个, 令阈值 $\tau = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ 并对 M 厄米化后得到 A .

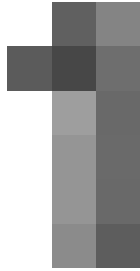


图 3 数字 1 的灰度图像, 共 8×8 个像素

Fig. 3. A grayscale image of the number 1, with a total of 8×8 pixels.

本次实验平台是核磁共振量子计算平台, 实验中使用 ^{13}C 标记的巴豆酸作为 4 比特样品, 溶解在 d_6 -丙酮中, 整个过程中 ^1H 解耦. 该分子的结构和参数如图 4 所示. C1—C4 表示 4 个量子位, 选择 C1 作为辅助量子位. 弱耦合近似下的内部哈密顿量为

$$H_{\text{int}} = -\sum_{i=1}^4 \pi v_i \sigma_z^i + \sum_{i<j}^4 \frac{\pi}{2} J_{ij} \sigma_z^i \sigma_z^j, \quad (19)$$

图中 v_i 为化学位移, J_{ij} 为第 i 和第 j 个核之间的耦合强度. 实验在室温 ($T = 296.5 \text{ K}$) 下的 Bruker DRX 400-MHz 谱仪上进行. 实验过程如下.

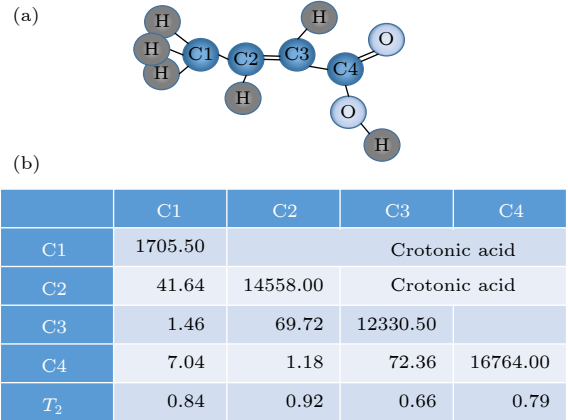


图 4 ^{13}C 标记巴豆酸的分子结构和参数. C1 是辅助量子比特, C2—C4 是目标量子比特. 在整个实验中, ^1H 是解耦的. 对角元素和非对角元素是化学位移和 J 耦合 (单位: Hz). 最下面是相干弛豫时间 T_2 (单位: s).

Fig. 4. Molecular structure and parameters of crotonic acid are labeled ^{13}C . C1 is the auxiliary qubit and C2—C4 is the target qubit. ^1H is decoupled throughout the experiment. The diagonal and off-diagonal elements are chemical shifts and J coupling (in Hertz). At the bottom is the coherent relaxation time T_2 (in seconds).

第 1 步 制备赝纯态. 这里使用的是空间平均法 [32–34], 即利用梯度磁场和多个么正演化算符实现, 当然也可以采用其他方法 [35,36]. 完成后密度算符有如下形式:

$$|\rho_{0000}\rangle = \frac{1-\epsilon}{16} I_{16} + \epsilon |0000\rangle\langle 0000|, \quad (20)$$

其中单位矩阵 I 不产生有效信号, 极化度 $\epsilon \approx 10^{-5}$. 制备赝纯态后, 利用 GRAPE 将量子态从 $|0000\rangle$ 演化到需要的态 $|0\rangle \otimes |\psi_A\rangle$, 完成初始态的制备.

第 2 步 实现共振跃迁算法的哈密顿量 \mathcal{H} 的时间演化. 利用形状脉冲能够实现时间演化算符 $e^{-i\mathcal{H}t_0}$, 其中 \mathcal{H} 由 (17) 式给出, 考虑到这里的目标态是初始态的一个很好的近似, 令 $c = 0.01$, $B = I^{\otimes 3}$, $H_s = A$, $\epsilon = 1$ 并且 $\epsilon_0 = \sigma_1 - 1$. 将演化算符多次作用在初始态上, 也就是让 $|0\rangle \otimes |\psi_A\rangle$ 在 \mathcal{H} 下演化一段时间.

最后, 利用量子态层析方法对密度矩阵进行读出 [37–41], 需要用到多个读出脉冲分别读出密度矩阵的不同成分, 最后对密度矩阵重构.

本实验的简要流程如图 5 所示.

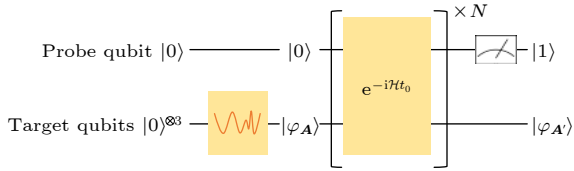


图 5 简要量子电路图. 制备好赝纯态后, 将经过 GRAPE 优化好的形状脉冲作用于第 2 个寄存器, 完成初始化. 之后将时间演化算符 $e^{-i\mathcal{H}t_0}$ 作用于初始态 N 次, 再测量第 1 个比特, 结果为 $|1\rangle$ 时得到目标态 $|\psi_{A'}\rangle$

Fig. 5. A brief quantum circuit diagram. After the pseudomorphic state is prepared, the shape pulse optimized by GRAPE is applied to the second register to complete the initialization. Then, the time evolution operator $e^{-i\mathcal{H}t_0}$ is applied to the initial state for N times, and the first bit is measured. When the result is $|1\rangle$, the target state $|\psi_{A'}\rangle$ is obtained.

3.2 实验结果及分析

对实验读出数据进行处理并重构密度矩阵后得到的结果如图 6 所示, 另一个奇异向量可以通过完全相同的方法获得, 只需要交换厄米化时矩阵 M 与 M^\dagger 的顺序. 通过第 1 个奇异值对应的奇异向量对图像进行重构, 从图 6 能看出实验结果和理论值符合得很好.

通过计算保真度 F 来定量判断实验结果的准确性:

$$F(\rho, \sigma) = \frac{|\text{tr}(\rho\sigma)|}{\sqrt{\text{tr}(\rho^2)\text{tr}(\sigma^2)}}, \quad (21)$$

其中 ρ 和 σ 分别是实验值和理论值, 得到保真度为 99.84%.

实验结果与理论计算的误差主要来源于两方

面. 一方面是核磁共振谱仪有一定的涨落, 导致脉冲会有一些误差, 这是由于实验设备造成的. 除此之外, 在制备初始态、实现时间演化算符 $e^{-i\mathcal{H}t_0}$ 时, 均利用了梯度下降算法优化脉冲, 每个优化后的脉冲与目标存在很小的误差. 综合以上两点, 实验结果在误差范围内验证了本文提出的量子矩阵低秩近似算法的正确性.

4 总结

本文提出了一个基于奇异值分解的矩阵低秩近似量子算法. 对于矩阵 $A \in \mathbb{R}^{p \times q}$, 求解其低秩矩阵 $A' \in \mathbb{R}^{p \times q}$, 在经典计算机上计算耗时一般是 $O[\text{poly}(pq)]$, 而本文的量子算法, 在量子计算机上只需要耗时 $O[\log(pq)]$ 即可解决该问题, 对比经典计算机有指数加速.

本文第 2 节中提出的算法用到了相位估计, 在比特数较多的情况下, 量子主成分分析、量子推荐算法等量子算法都可以实现同样的目标, 在时间复杂度上基本相同. 实验中利用了共振跃迁的算法, 在这一类问题中等效替代了相位估计算法, 大大减少了对辅助比特的需求, 只通过 1 个辅助比特, 保留 1 个奇异值就较好地恢复了图像, 这是其他基于相位估计的算法目前不能实现的.

以数字 1 的灰度图像在 Matlab 中对应的矩阵为原始矩阵, 在核磁量子计算平台求解了该矩阵的低秩近似并展示了近似后的矩阵对应的图像. 实验结果和理论值相比保真度为 99.84%, 充分证明了本文算法的正确性.

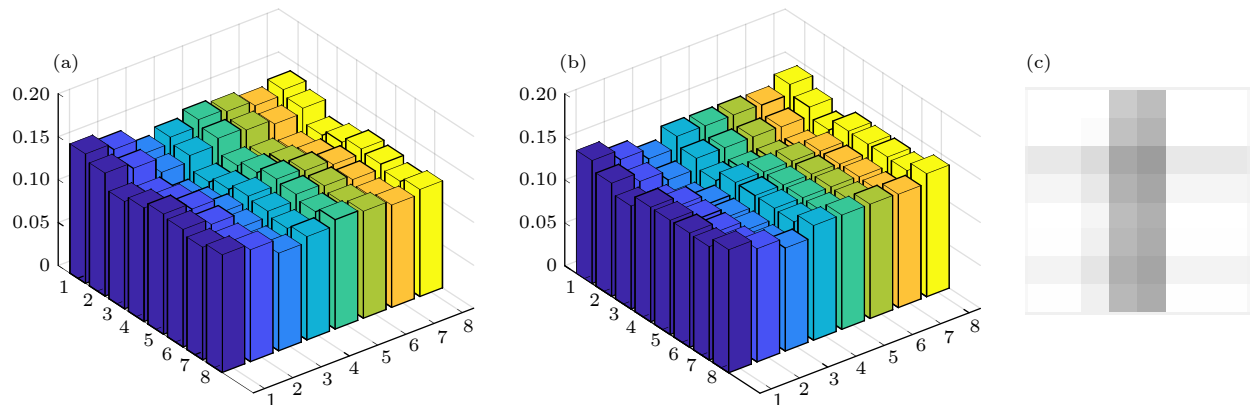


图 6 (a) 通过实验得到的密度矩阵; (b) 理论计算的结果; (c) 最大的奇异值恢复的矩阵对应图像; 由于辅助比特是 $|1\rangle$ 时才给出有意义的结果, 所以这里只考虑其为 $|1\rangle$ 的子空间, 忽略其余部分

Fig. 6. (a) Density matrix obtained by experiment; (b) the result of theoretical calculation; (c) the corresponding image of the matrix with the maximum singular value recovery. Since the auxiliary bit is $|1\rangle$ and gives a meaningful result, only consider subspaces whose values are $|1\rangle$ and the rest are ignored.

在降维、图像处理等多个机器学习相关领域, 矩阵的低秩近似问题具有重要意义. 本文提出的量子算法只需要少量的辅助量子比特即可在 $O[\log(pq)]$ 时间内给出一个矩阵的低秩近似, 在解决经典算法耗时久的问题的同时大大减少了对量子比特资源的需求, 对量子计算机的实际应用有重要的意义.

感谢清华大学物理系龙桂鲁教授、南京师范大学计算机与电子信息学院段博佳老师提供的宝贵意见.

参考文献

- [1] Seghouane A K, Shokouhi N, Koch I 2019 *IEEE Trans. Image Process.* **28** 3274
- [2] Does M D, Olesen J L, Harkins K D, Teresa S D, Gochberg D F, Jespersen S N, Shemesh N 2019 *Magn. Reson. Med.* **81** 3503
- [3] Viviani R, Gr N G, Spitzer M 2005 *Hum. Brain Mapp.* **24** 109
- [4] Chan T H, Jia K, Gao S, Lu J, Zeng Z, Ma Y 2015 *IEEE Trans. Image Process.* **24** 5017
- [5] Zhang L, Lukac R, Wu X L 2009 *IEEE Trans. Image Process.* **18** 16
- [6] Huang Yan, Liao G, Xiang Y, Zhang L, Li J 2019 *IEEE Trans. Image Process.* **29** 2244
- [7] Donoho D L 2006 *IEEE Trans. Inform. Theory.* **52** 1289
- [8] Yang J, Zhang D, Frangi A F, Yang J Y 2004 *IEEE Trans. Pattern Anal.* **26** 131
- [9] Lin J, Bao W S, Zhang S, Wang X 2019 *Phys. Lett. A* **383** 2862
- [10] Tipping M, Bishop C 2014 *Neural Comput.* **11** 443
- [11] Xu M K 2017 *M. S. Thesis* (Guiyang: Guizhou University) (in Chinese) [徐梦珂 2017 硕士学位论文 (贵阳: 贵州大学)]
- [12] Tsuge S, Shishibori M, Kuroiwa S, Kita K 2001 *IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics Tucson, AZ, USA, October 7–10, 2001* p960
- [13] Lee D D, Seung H S 1999 *Nature* **401** 788
- [14] Harrow A, Hassidim A, Lloyd S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 150502
- [15] Reberstro P, Mohseni M, Lloyd S 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 130503
- [16] Lloyd S, Mohseni M, Reberstro P 2014 *Nat. Phys.* **10** 108
- [17] Reberstro P, Steffens A, Marvian I, Lloyd S 2018 *Phys. Rev. A* **97** 012327
- [18] Zhou Z H 2016 *Machine Learning* (Beijing: Tsinghua University Press) p235 (in Chinese) [周志华 2016 机器学习 (北京: 清华大学出版社) 第235页]
- [19] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 160501
- [20] Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L 2008 *Phys. Rev. A* **78** 052310
- [21] Li H S, Fan P, Xia H, Peng H, Long G L 2020 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **63** 280311
- [22] Kitaev A Yu 1995 arXiv: 9511026 v1 [quant-ph]
- [23] Benioff P 1980 *J. Statist. Phys.* **22** 563
- [24] Long G L 2006 *Commun. Theor. Phys.* **45** 825
- [25] Long G L, Liu Y 2008 *Commun. Theor. Phys.* **50** 1303
- [26] Long G L 2011 *Int. J. Theor. Phys.* **50** 1305
- [27] Schuld M, Sinayskiy I, Petruccione F 2016 *Phys. Rev. A* **94** 022342
- [28] Khaneja N, Reiss T, Kehlet C 2005 *J. Magn. Reson.* **172** 296
- [29] Ryan C A, Negrevergne C, Laforest M, Knill E, Laflamme R 2008 *Phys. Rev. A* **78** 012328
- [30] Wang H 2016 *Phys. Rev. A* **93** 052334
- [31] Li Z, Liu X, Wang H, Ashhab S, Cui J, Chen H, Peng X, Du J 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122** 090504
- [32] Cory D G, Price M D, Havel T F 1998 *Physica D* **120** 82
- [33] Hou S Y, Sheng Y B, Feng G R 2014 *Sci. Rep.* **4** 6857
- [34] Li H, Gao X, Xin T 2017 *Sci. Bull.* **62** 497
- [35] Xin T, Hao L, Hou S Y, Feng G R, Long G L 2019 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **62** 960312
- [36] Wen J W, Qiu X C, Kong X Y, Chen X Y, Yang F, Long G L 2020 *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **63** 230321
- [37] Lee J S 2002 *Phys. Lett. A* **305** 349
- [38] Feng G, Xu G Long G 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 190501
- [39] Leskowitz G M, Mueller L J 2004 *Phys. Rev. A* **69** 052302
- [40] Feng G, Long G L, Laflamme R 2013 *Phys. Rev. A* **88** 022305
- [41] Li J, Huang S, Luo Z, Li K, Lu D, Zeng B 2017 *Phys. Rev. A* **96** 032307

Matrix low-rank approximate quantum algorithm based on singular value decomposition*

Wang Fu-Rong^{1) #} Yang Fan^{2) #} Zhang Ya^{1) †}
Li Shi-Zhong¹⁾ Wang He-Feng³⁾

1) (*School of Mechatronics Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China*)

2) (*Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

3) (*Department of Applied Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

(Received 3 March 2021; revised manuscript received 29 March 2021)

Abstract

In the era of big data, efficient data processing is crucial. Quantum computing has the capability of parallel computing, which provides a new solution for convenient data processing. We propose a matrix low-rank approximate quantum algorithm based on singular value decomposition with a complexity of $O[\text{poly}(pq)]$. We conduct the principle demonstration of the algorithm in the NMR quantum computing system. In the experiment, ^{13}C labeled cromaric acid is used as a four-bit sample, dissolved in d6-acetone, and ^1H is decoupled in the whole process. In the case of a large number of bits, quantum principal component analysis, quantum recommendation algorithm, and other quantum algorithms can achieve the same goal, and their time complexities are basically the same. In this paper, the resonance transition algorithm is used to effectively replace the phase estimation algorithm in this kind of problem, which greatly reduces the need of auxiliary bits. Only one auxiliary bit is used and a singular value is retained to better restore the image, which is currently unable to be achieved by other algorithms based on phase estimation. Firstly, an 8×8 -dimensional image matrix is selected, and the pseudo-pure state is prepared by using the spatial averaging method. The quantum state reaches the target state by using gradient descent pulse to complete the preparation of the initial state. Then the shape pulse is used to apply the time-evolution operator to the initial state several times to realize the time evolution of the Hamiltonian \mathcal{H} of the resonance transition algorithm. Finally, the quantum state chromatography is used to read out the different components of the density matrix and reconstruct the density matrix. The experimental results are analyzed by quantum state chromatography, and the experimental values are in agreement with the theoretical ones. The fidelity is 99.84%, and the error comes mainly from the experimental equipment and the gradient pulse's optimization algorithm. This verifies the correctness of the matrix low-rank approximate quantum algorithm proposed in this paper within the error range. For the classical algorithm, it usually takes $O[\text{poly}(pq)]$ to solve the low-rank matrix on the classical computer. Compared with the classical algorithm, the quantum algorithm achieves exponential acceleration.

Keywords: low rank approximation, singular value decomposition, quantum computing, resonant transition

PACS: 02.10.Yn, 03.67.Lx, 07.05.Kf, 07.05.Pj

DOI: 10.7498/aps.70.20210411

* Project supported by the Graduate Education Innovation Program of Shanxi Province, China (Grant No. 2020SY344), the National Key R&D Program of China (Grant No. 2017YFA0303700), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11774197), and the Key Basic Research and Development Program of Guangdong Province, China (Grant No. 2018B030325002).

These authors contributed equally.

† Corresponding author. E-mail: zy@nuc.edu.cn