



HASM量子机器学习

岳天祥^{1,3,4*}, 吴晨辰^{1,3}, 刘熠², 杜正平¹, 赵娜^{1,3}, 焦毅蒙^{1,3}, 徐喆^{1†}, 史文娇^{1,3}

1. 中国科学院地理科学与资源研究所资源与环境信息系统国家重点实验室, 北京 100101;

2. 北京雁栖湖应用数学研究院, 北京 101408;

3. 中国科学院大学资源与环境学院, 北京 101499;

4. 江西农业大学国土资源与环境学院, 南昌 330045

* 通讯作者, E-mail: yue@lreis.ac.cn

† 通讯作者, E-mail: xuzhe@igsrr.ac.cn

收稿日期: 2022-10-07; 收修改稿日期: 2023-06-05; 接受日期: 2023-07-11; 网络版发表日期: 2023-08-07

可持续发展大数据国际研究中心开放研究计划项目(编号: CBAS2022ORP02)、国家自然科学基金项目(批准号: 41930647, 72221002)和资源与环境信息系统国家重点实验室自主创新项目(编号: KPI005)资助

摘要 传统计算机的进步源于晶体管的小型化和芯片上晶体管数量的增加, 但晶体管的小型化已达到了它的极限水平. 与此同时, 许多实际问题需要超过当今计算机计算能力的巨量计算资源. 近年来, 量子计算的发展为我们解决这一问题带来了曙光. 虽然量子计算可实现相对于传统超算的指数级加速, 但误差问题是实现量子实用优势的严重障碍. 最新研究表明, 量子机器学习是提高量子计算精度的有效途径之一. 事实上, 高精度曲面建模(HASM)方法是一种强化机器学习方法, 并可通过拉格朗日因子法转换为大型稀疏线性系统, 它与Harrow-Hassidim-Lloyd(HHL)量子算法的有机结合, 形成了HASM-HHL量子机器学习算法. HASM在传统计算机上已成功运用于自然系统、自然系统对人类贡献和自然系统变化驱动力等生态环境曲面的空间插值、空间升尺度、空间降尺度、数据融合和模型-数据同化. 实验结果表明, HASM-HHL量子机器学习算法的计算结果达到了传统高精度算法的精度水平; 与此同时, 可实现相对于传统高时效算法的指数级加速. 目前, 基于HASM的传统-量子混合计算平台已有水到渠成之势. 然而, HHL量子算法有很多局限性, 它们是HASM-HHL量子机器学习实用量子优势面临的主要挑战. 为此, 我们提出了发展新型HASM量子计算方法的多套优化方案: (1) 发展更优的大规模稀疏矩阵量子求解方案; (2) 评估量子计算的 cost 问题和 benchmark 问题; (3) 构建HASM传统与量子混合计算通用平台, 实现传统计算与量子计算优势互补; (4) 将优化后的量子算法和传统算法发送到量子计算云平台, 促进用户的广泛应用和积极反馈, 进一步优化有关算法.

关键词 量子计算, 机器学习, 生态环境曲面, 高精度曲面建模, 基本定理, 量子计算优势, 实用量子优势

1 引言

传统的个人计算机和超级计算机都建立在传统计

算原理之上, 运用传统比特来进行计算和处理信息. 传统比特是二进制变量, 一个比特要么是0, 要么是1. 但量子比特可以是0, 可以是1, 也可以是两种状态的混合

中文引用格式: 岳天祥, 吴晨辰, 刘熠, 杜正平, 赵娜, 焦毅蒙, 徐喆, 史文娇. 2023. HASM量子机器学习. 中国科学: 地球科学, 53(9): 1958–1966, doi: [10.1360/SSTe-2022-0319](https://doi.org/10.1360/SSTe-2022-0319)

英文引用格式: Yue T X, Wu C C, Liu Y, Du Z P, Zhao N, Jiao Y M, Xu Z, Shi W J. 2023. HASM quantum machine learning. Science China Earth Sciences, 66(9): 1937–1945, <https://doi.org/10.1007/s11430-022-1144-7>

或叠加; 量子比特还可能纠缠, 也就是说, 当对一个状态进行测量时, 会影响另一个状态. 量子纠缠是当两个或更多量子系统(甚至它们有一定距离时)不能独立描述时出现的一种量子关联. 量子计算的基本单元为量子比特, 其具备纠缠和叠加特性(Markov, 2014; Matthews, 2021). 量子比特在计算时的“天然并行”性, 使其计算速度相比于传统计算机有着无与伦比的优势(Mooij, 2005).

量子力学是量子计算的基础. 量子力学在20世纪初期的20年得到了较快的发展, 并在20世纪20年代后期逐渐成熟并发展成现在状态(Nielsen和Chuang, 2010). 1928年, Hilbert等(1928)提出了一个简单的量子力学模型. 1937年, Turing提出了一种自动机(图灵机), 由一个计算器和分成方块的磁带组成, 磁带上的每个方块或空白或包含多个符号, 这些符号串就是磁带的表达形式; 计算器在逐一扫描磁带方块时, 可改变磁带符号、或在空白方块上打印符号、或将一个方块向左或向右移动、或不做任何事情(Davis, 1958). 1980年, Benioff(1980)为标准图灵机建立了一个量子力学模型. 这些发现使量子计算付诸实践成为可能, 量子计算基于叠加和纠缠等量子特性, 超越了传统计算的局限性(Nimbe等, 2021).

1982年, Feynman发现, 量子力学系统处理信息的能力远强于传统计算机系统, 有可能产生新型高性能计算机. 1985年, Deutsch运用量子的并行性提出了第一个量子算法, 并显示量子算法可以比传统算法更快, 证明了建造量子计算机的必要性. 自第一个量子算法诞生以来, 出现了许多不同类型的量子算法. 例如, 将大整数分解为素数乘积的量子算法(Shor, 1994)、量子搜索算法(Grover, 1997)、量子随机游走算法(Kempe, 2003)、求解大型线性方程组量子算法(Harrow等, 2009)、大数据最小二乘拟合量子算法(Wiebe等, 2012)、大数据分类的支持向量机量子算法(Rebentrost等, 2014)、有容错能力的变分量子特征值求解算法(Peruzzo等, 2014)、神经网络量子算法(Rebentrost等, 2018)和用于解决组合优化和最大分割等难题的量子近似优化算法(Medvidović和Carleo, 2021).

由于传统计算机无法解决摩尔定律难题, “超越摩尔定律策略”激发了对量子算法的进一步探索. 2020年以来, 量子算法出现了许多新的特点. 例如, 将量子比

特作为人工神经元, 设计人工神经网络量子算法, 并在传统计算机上对其进行训练(Chalumuri等, 2020); 通过量子纠缠和量子并行的结合, 研制新量子算法, 解决传统计算机无法解决的Deutsch问题(Zidan等, 2021); 运用传统-量子混合算法计算核结构函数(Mueller等, 2021); 构建量子机器学习方法, 预测国民生产总值增长(Alaminos等, 2022). 证明量子计算优势(quantum computational advantage, QCA)是当今时代量子计算的首要目标之一(Deshpande等, 2022). 量子叠加和量子纠缠是量子计算优势的根源(Khrennikov, 2021).

自Feynman(1982)提出运用传统计算机模拟量子系统会使计算成本指数级增加的猜想以来, 已有许多成功实验案例(Deshpande等, 2022). 例如, 在传统计算机上模拟量子整数分解, 并假定其计算的每一步都有叠加态, 结果显示, 整数分解的量子算法较目前已知的最优传统算法可达到指数级加速(Shor, 1994). Grover(1997)的搜索算法可实现相对于最佳传统算法的二次方加速(Bennett等, 1997). Rønnow等(2014)通过数据模拟实验, 阐明如何定义和测算量子加速. Biamonte等(2017)发现, 如果能找到有效的量子机器学习算法, 小型量子信息处理器可在数据挖掘中找到传统计算机难以找到的统计规律. Arute等(2019)运用可编程超导处理器在量子线路随机抽样中证明了量子计算优势; 实验证明, 在53量子比特处理器上200s内可完成保真度为0.2%的一百万噪音样本, 而传统超算则需要一万年时间. 高斯玻色抽样(Gaussian boson sampling, GBS)是一种相对简单易行的量子计算优势证明方法. Zhong等(2020)的高斯玻色抽样实验表明, 九章光量子计算机在200秒内可完成需要神威太湖之光25亿年才能完成的计算任务. Deshpande等(2022)为传统计算机高斯玻色采样提供了难度证明, 并为通过高斯玻色采样证明量子计算优势提出了新的可编程架构, 从另一个侧面支持了Zhong等(2020)量子计算优势证明实验. Zhu等(2022)在祖冲之2.1上完成了更大规模的量子线路随机采样, 使计算的希尔伯特空间维达到了 2^{60} .

目前, 已有文章开始讨论量子实用优势(practical quantum advantage, PQA)问题, 也就是量子装置可以解决传统超级计算机无法解决的实际问题(Daley等, 2022). 证明量子实用优势, 需要量化量子模拟精度, 需要证明获得的相关问题量子算法求解结果是可信的(Fedorov和Gelfand, 2021).

2 HASM方法

在生态环境信息学研究过程中,我们将一个区域或其生态环境要素格网化表达抽象为数学“曲面”(Yue, 2011). 在联合国生物多样性与生态系统服务政府间科学-政策平台(IPBES)概念体系下(IPBES, 2016), 将地球表层系统及其生态环境要素按自然系统(包括生物多样性、生态系统结构和地形地貌)、自然系统对人类贡献(包括食物供给、淡水供给和环境污染调节等生态系统服务)和自然系统变化驱动力(包括气候变化、土地利用变化、流行病、环境污染和政策法规等)来划分, 并将自然系统曲面、自然系统对人类贡献曲面和自然系统变化驱动力曲面统称为生态环境曲面.

外蕴量和内蕴量是生态环境曲面模拟分析的两个基本概念, 各研究领域的学者采用了不完全一致的术语. 例如, 内蕴量被称为第一类基本量、微观过程信息、局地细节信息或研究对象的内禀属性等; 外蕴量被称为第二类基本量、宏观格局信息、全局梗概信息或研究对象的环境态势等(表1).

许多研究结果表明, 外蕴量(例如, 卫星观测数据和空间模型输出)与内蕴量(例如, 地基观测数据和空间采样)是表达生态环境曲面的两类不同但互补的信息, 它们提供了生态环境曲面信息的不同片段, 任何一方都无法刻画生态环境的时空动态全貌(Yue等, 2016; Ponsar等, 2016). 卫星遥感可以提供地基观测无法获取的空间连续地表信息, 但卫星遥感没有能力直接获取地表微观过程参数信息; 地基观测有能力获取观测点的高精度、高时间分辨率数据, 但由于这些观测点密度太稀, 往往无法达到区域尺度的模拟需求. 卫星遥感可获得土地覆被变化程度和气候的空间关系, 但卫星观测存在着补丁和多云天气引起的数据缺失等问题, 不能形成完整的地表信息(Chambers等, 2007; Emili等, 2011). 如果不能实现内蕴量和外蕴量的有机结合, 仅使用卫星观测数据或地基观测数据, 生态环境曲面模拟结果会误差很大. 例如, 通过卫星遥感影像解译形成的各种全球土地覆被数据集之间有很大差异, 其主要原因之一就是生产这些产品时, 缺乏足够的地基观测数据(Fritz等, 2012). 不管运用哪种支持向量机和参数优化方法, 仅用地面观测数据对矿穴沉陷预测的相对误差都大于20%(Li等, 2014); 仅运用卫星

表 1 各学科领域表达内蕴量和外蕴量的术语

学科领域	内蕴量	外蕴量
数学	第一类基本量	第二类基本量
地理学	微观过程信息	宏观格局信息
生态学	局地细节信息	全局梗概信息
生物学	研究对象的内禀属性	研究对象的环境态势

遥感数据对森林碳储量的综合调查是有错误的(Butt等, 2015). 虽然卫星遥感已经通过测量生态系统结构、组成和功能, 揭示了生物多样性的时空维, 改观了对地球上生命的监测, 但生物多样性的许多方面还不能通过卫星遥感量化, 卫星遥感与地面数据采集的结合有助于实施生物多样性保护(Cavender-Bares等, 2022).

事实上, 生态环境曲面由全局要素和局地要素共同控制(Phillips, 2002), 要想使全球模型有尽可能高的精度, 必须增补地基观测信息(Brill等, 1991). 几何曲面由第一类基本量和第二类基本量共同唯一决定, 第一类基本量是在这个几何曲面之上量测到的信息表达, 第二类基本量是在这个几何曲面之外观测到的信息表达(Somasundaram, 2005). 将卫星观测数据与地面数据相结合, 可大幅度提高生态环境曲面的模拟精度. 例如, 以卫星影像作为辅助数据, 可降低粮食产量监测的误差, 并能较好的预测无地面监测区域的粮食产量(Dobermann和Ping, 2004). 融合气象台站观测数据、地面调查数据、通量塔观测数据和卫星遥感数据, 提高了森林生态系统碳储量模拟结果的精度和稳定性(Chiesi等, 2011). 局地观测和遥感信息的结合可以让人们更全面地认识生物多样性对环境变化的响应(Pereira等, 2013). 融合卫星观测数据和地面观测数据可将水蒸气估算的误差降到一定范围(Srivastava等, 2014). 来自周围环境的外蕴影响和浮游植物物种间的相互作用形成的内蕴影响共同影响浮游植物的群落结构; 外蕴要素解释了浮游植物群落变异的31%, 这些外蕴影响以外的部分是种间相互作用和对外蕴要素变化的反馈机制(Yang等, 2018). 联合国IPBES一直强调土著和本地知识在自然保护决策中的重要性, 然而长期以来全球情景模型忽视了这一点, 因此, 需要发展新的全球自然系统情景(Pereira等, 2020).

上述所有发现都描述了外蕴量和内蕴量两种信息对生态环境曲面建模的重要意义. 然而, 如何采用理论

完备的方法, 实现外蕴量信息与内蕴量信息的有机结合, 是生态环境曲面建模面临的主要挑战(Haber, 2021).

为了解决生态环境曲面建模面临的主要挑战, 我们在21世纪初建立了基于系统论、优化控制论和曲面论的高精度曲面建模(HASM)方法, 实现了内蕴量和外蕴量信息的有机结合, 解决了半个世纪以来困扰生态环境曲面建模的误差问题、多尺度问题和非线性问题(岳天祥等, 2004; Yue等, 2007).

2.1 传统HASM算法原理与应用现状

如果某区域的生态环境要素曲面可表达为 $z=f(x, y)$, 则HASM的数学表达为

$$\left\{ \begin{array}{l} \min \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} - \begin{bmatrix} \mathbf{d}^{(n)} \\ \mathbf{q}^{(n)} \\ \mathbf{p}^{(n)} \end{bmatrix} \right\|, \\ \text{s.t.} \\ \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} = \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \leq \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} \leq \mathbf{k}_3 \end{array} \right. \quad (1)$$

其中 (x, y) 是地理坐标; $f(x, y)$ 为生态环境要素 z 在 (x, y) 处的取值; $\mathbf{z}^{(n+1)}$ 为生态环境要素 z 曲面的 $n+1$ 次迭代($n \geq 0$); $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{C}$ 为对应HASM主方程组三个方程的系数矩阵; $\mathbf{d}^{(n)}$ 、 $\mathbf{q}^{(n)}$ 和 $\mathbf{p}^{(n)}$ 为对应HASM主方程组三个方程的右端项向量, 由生态环境要素 z 曲面的第 n 次迭代 $\mathbf{z}^{(n)}$ 确定; $\mathbf{d}^{(0)}$ 、 $\mathbf{q}^{(0)}$ 和 $\mathbf{p}^{(0)}$ 由生态环境要素 z 曲面的初始场 $\mathbf{z}^{(0)}$ 确定; $\mathbf{S}_1$ 和 $\mathbf{k}_1$ 分别为地面观测等式约束的位置矩阵和观测值向量; $\mathbf{S}_2$ 为不等式控制位置矩阵; $\mathbf{k}_2$ 和 $\mathbf{k}_3$ 分别为先验知识的不等式控制向量.

机器学习方法一般可分为监督机器学习、非监督机器学习和强化机器学习以及混合机器学习(Yue等, 2022). HASM是一种强化机器学习方法, 它由达到目

标曲面的优化算法 $\min \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} - \begin{bmatrix} \mathbf{d}^{(n)} \\ \mathbf{q}^{(n)} \\ \mathbf{p}^{(n)} \end{bmatrix} \right\|$ 和利用地基

观测数据和先验知识控制学习过程的学习规

则 $\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} = \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \leq \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} \leq \mathbf{k}_3 \end{array} \right.$ 构成.

HASM已成功应用于各种空间尺度的生态环境要素曲面建模. 例如, 数字高程模型构建、航天飞机雷达地形测绘任务高程曲面空缺填补、二氧化碳浓度数据融合、碳卫星二氧化碳浓度曲面空缺填补、气候变化模拟分析、人口空间分布动态模拟、生态系统空间分布和生物多样性变化模拟分析、碳储量、食物供给模拟分析和土壤制图等(Yue等, 2015). 相比于其他曲面建模方法, HASM所有应用的精度都有大幅度提高.

通过对HASM理论发展和应用研究的总结提炼, 形成了地球表层系统建模基本定理(FTESM)和生态环境曲面建模基本定理(FTEEM)(Yue等, 2016; 岳天祥等, 2020). FTEEM被表述为(Yue等, 2020): 生态环境曲面由控制地面过程的局地信息和控制宏观格局的全局信息共同唯一决定, 在空间分辨率足够细的条件下, 高精度生态环境曲面可运用集成局地信息和全局信息的恰当方法来构建, 例如高精度曲面建模(HASM)方法. FTEEM是为了适应IPBES术语在FTESM基础上发展形成的. FTESM的陈述为(Yue等, 2016): 地球表层及其环境要素曲面由外蕴量和内蕴量共同唯一决定, 在空间分辨率足够细的条件下, 地球表层及其环境要素的高精度曲面可运用集成外蕴量和内蕴量的恰当方法(例如HASM)来构建.

为了使用有限的观测值或有信息空缺的曲面, 运用有效方法对无数据的点进行填补, 建立了基于FTEEM的空间插值推论和算法, 使空间插值精度大幅度提高. 为了解决许多模型和数据由于空间分辨率太粗而无法用于区域和局地尺度问题研究, 提出了将粗分辨率数据转换为细空间分辨率数据的降尺度算法. 为了节约计算成本, 提出了将细分辨率数据转换为粗分辨率数据的升尺度推论和算法. 为了将表达同一现实对象的多源、多尺度数据和知识集成到一个一致的有用形式, 并提高信息的质量, 使融合结果比单独使用任何一个数据源都有更高精度, 构建了基于FTEEM的数据融合推论和算法. 为了将地面观测数据并入系统模型过程, 并根据地面观测数据调整系统模型的状态变量和参数, 提高系统模型的模拟精度, 发展了基于FTEEM的模型-数据同化算法. 以上成果为建立生态环境曲面建模通用量子机器学习平台奠定了基础.

但需要指出的是, 目前使用传统计算机运行HASM算法过程中存在计算速度慢和大内存需求问题. 为了解决这两个主要问题, 我们发展了预处理共轭

梯度法(HASM-PCG)、多重网格法(HASM-MG)、适应算法(HASM-AM)和平差算法(HASM-AC)等一系列面向传统计算机的高时效算法,使HASM从只能模拟分析2平方公里的小区域问题发展到能够快速模拟分析51000万平方公里的全球问题,大幅度提高了HASM的大数据处理能力(Yue, 2011). 预处理共轭梯度法(PCG)是一种求解大型线性系统的加速技术,它通过引入一个预处理算子,使共轭梯度法以更快的速度收敛;数值实验表明, HASM-PCG算法较其他算法运算速度平均提高254倍(Yue等, 2007). 基于误差平滑和粗网格校正原理的多重网格法(MG)是求解偏微分方程最快的数值方法;数值实验结果表明,在停止误差(绝对误差)为0.18的前提下, HASM-MG运算速度较HASM-PCG进一步提高了91%(Yue等, 2013). HASM-AM首先在较粗的栅格网进行运算,然后对误差较大的栅格进行细化后继续模拟,而对满足精度要求的栅格不再处理,以此达到减小计算量、提高运算速度的目的;黄土高原董志塬的案例研究表明, HASM-AM可使计算成本减小98.6%(Yue等, 2010). HASM-AC采取分而治之的思路,将大数据研究区分割为由35个栅格组成的小单元集合,大幅度减小高性能计算机群每个处理器的计算量,提高了运算速度(Yue和Wang, 2010). 然而,上述这些针对传统计算机的高时效传统算法还没有从根本上解决运算速度慢的问题,亟待发展具有量子实用优势的量子算法.

2.2 HASM-HHL量子机器学习

将HASM传统方法(1)中的向量用对应的量子态取代,转换为HASM量子机器学习算法:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \\ \mathbf{C} \end{bmatrix} \cdot |z^{(n+1)}\rangle - \begin{bmatrix} |d^{(n)}\rangle \\ |q^{(n)}\rangle \\ |p^{(n)}\rangle \end{bmatrix} \right\|, \\ \text{s.t.} \\ \mathbf{S}_1 \cdot |z^{(n+1)}\rangle = |k_1\rangle \\ |k_2\rangle \leq \mathbf{S}_2 \cdot |z^{(n+1)}\rangle \leq |k_3\rangle \end{array} \right. \quad (2)$$

HASM量子机器学习算法可通过拉格朗日因子法转换为大型稀疏线性系统,即设 $\mathbf{W} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{B}^T \mathbf{B} + \beta \mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1)$,

$$|r^{(n)}\rangle = \mathbf{A}^T |d^{(n)}\rangle + \mathbf{B}^T |q^{(n)}\rangle + \beta \mathbf{S}_1^T |k_1\rangle, \text{ 则方程(2)可表达为} \\ \mathbf{W} |z^{(n+1)}\rangle = |r^{(n)}\rangle. \quad (3)$$

在进行生态环境曲面建模过程中,稀疏矩阵 $\mathbf{W}$ 往往规模巨大,这也是使用传统计算机运行HASM时运算速度慢的根源所在. 对于传统计算机来说,求解一个大小为 $N \times N$ 且条件数为 κ 的 s -稀疏矩阵 $\mathbf{A}$ 的矩阵方程 $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ 时,在计算误差为 ϵ 的情况下,表现最佳的传统算法运算时间为 $\mathcal{O}(N s \kappa / \log(\epsilon))$;而使用Harrow-Hasidim-Lloyd(HHL)量子算法求解这样一个矩阵方程时,运算速度可以得到指数级提升,即运算时间被缩小为 $\mathcal{O}(\log(N) s^2 \kappa^2 / \epsilon)$ (Harrow等, 2009). 对比两种算法的运算时间表达式不难发现,矩阵规模 N 越大, HHL量子算法的运算速度优势越明显. 据此,我们将HASM机器学习与HHL量子算法合并,建立了HASM-HHL量子机器学习算法. HASM-HHL可通过量子纠缠和叠加特性实现相对于传统高时效算法的指数级加速;与此同时,其计算结果达到了传统高精度算法的精度水平(Yue等, 2022).

3. 讨论

HHL量子算法由于其量子相位估计算法自身属性具有一定局限性,在与HASM结合运用时尤其需要注意. 使用量子相位估算(quantum phase estimation, QPE)矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征值 λ 是HHL量子算法的核心步骤之一,而在这个过程中需要寻找到一个合适的参数 t 满足 $\lambda t \in [0, 2\pi]$ (Morrell和Wong 2021). 参数 t 的选择直接关系到最后的运算误差大小,而参数 t 过大也会直接导致运算时间的增长,但是在量子计算过程中我们往往并不知道这个参数 t 是如何被选出来,因此也就无法控制由此带来的误差和运算时间过程问题(Shao, 2018). 除此之外,如何减少运算使用的量子电路的深度也是使用HHL量子算法在真机上求解大规模矩阵方程时必须面对的关键问题(Bravo-Prieto等, 2019). 将HHL量子算法与传统矩阵运算结合形成的HHL混合算法(h-HHL)被证实是一个相对有效的方法,可以在Rigetti计算机上完成对 32×32 的矩阵方程的求解(Bravo-Prieto等, 2019),并已能够实现在IBM量子计算机上对 2^{17} 维线性方程的求解(Perelshtein等, 2022). 以上HHL量子

算法的局限性都将成为在未来优化HASM量子机器学习过程中需要着重思考和解决的问题,同时h-HHL量子算法也为后续HASM量子机器学习的优化提供了很好的思路。

我们正处于一个含噪声的量子计算时代,还有许多问题没有解决(Aaronson, 2015)。例如,量子线性求解还没有回答量子态制备与信息读取等问题;大型线性稀疏系统量子算法需要容错量子硬件(Childs等, 2017)。也就是说,虽然量子计算装置在一些计算任务中可以比最快的传统超级计算机快很多,但是为了识别和修正量子硬件噪声引起的误差,需要研发容错结构体系,量子系统的噪声过程是实现量子实用优势的严重障碍。为了解决量子计算的误差问题,已有许多探索性研究。例如, Bacon(2006)提出了去除对量子纠错微结构体系的需求和提供自纠错量子记忆的两个运算符量子纠错(operator quantum error correcting, QEC)子系统。Mandayam和Ng(2012)试图发展近似量子纠错的统一框架。Bravo-Prieto等(2019)提出了变分量子线性求解器(variational quantum linear solver, VQLS),尽管其数值求解精度不如HHL算法,但较低的电路深度与算法的变分性质使其可在含噪音的中型量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)计算机上运行。Cohen等(2022)在量子计算中耦合了量子纠错辅助系统。Bennewitz等(2022)引入了误差降解方法。

最新研究表明,量子机器学习是提高量子计算精度的有效途径之一(Caro等, 2022; Yue等, 2022)。Fawzi等(2022)基于AlphaZero算法,使用三维张量(tensor)进行矩阵存储和运算,并设计了深度强化学习(deep reinforcement learning, DRL)智能体AlphaTensor。该框架利用张量可在GPU上进行运算的提速优势,同时将矩阵乘法过程用基于AlphaZero设计的单玩家博弈过程来表示,为大规模矩阵乘法运算实现了最高23.9%的提速。因此,在后续HASM量子机器学习的优化中,我们也可以思考如何将这一最新深度学习的算法设计成果有效融入进来,大幅度降低运行HASM量子机器学习所需的门电路数,并提高计算精度。

优化HASM量子机器学习的途径可归纳为以下四点: (1) 提出更优的大规模稀疏矩阵量子求解方案; (2) 评估量子计算的成本问题和标杆问题; (3) 发展HASM传统与量子混合计算通用平台,实现传统计算与量子

计算优势互补; (4) 将优化后的量子算法和传统算法发送到量子计算云平台,促进用户的广泛应用和积极反馈,进一步优化有关算法。

参考文献

- 岳天祥, 杜正平, 刘纪远. 2004. 高精度曲面建模与误差分析. 自然科学进展, 14: 300–306
- 岳天祥, 赵娜, 刘羽, 王轶夫, 张斌, 杜正平, 范泽孟, 史文娇, 陈传法, 赵明伟, 宋敦江, 王世海, 宋印军, 闫长青, 李启权, 孙晓芳, 张丽丽, 田永中, 王薇, 王英安, 马胜男, 黄宏胜, 卢毅敏, 王情, 王晨亮, 王玉柱, 鹿明, 周伟, 刘熠, 尹笑哲, 王宗, 包正义, 赵苗苗, 赵亚鹏, 焦毅蒙, Naseer U, 范斌, 李赛博, 杨阳, Wilson J P. 2020. 生态环境曲面建模基本定理及其应用. 中国科学: 地球科学, 50: 1083–1105
- Aaronson S. 2015. Read the fine print. *Nat Phys*, 11: 291–293
- Alaminos D, Salas M B, Fernández-Gómez M A. 2022. Quantum machine learning algorithms: Read the fine print. *Comput Econ*, 59: 803–829
- Arute F, Arya K, Babbush R, Bacon D, Bardin J C, Barends R, Biswas R, Boixo S, Brandao F G S L, Buell D A, Burkett B, Chen Y, Chen Z, Chiaro B, Collins R, Courtney W, Dunsworth A, Farhi E, Foxen B, Fowler A, Gidney C, Giustina M, Graff R, Guerin K, Habegger S, Harrigan M P, Hartmann M J, Ho A, Hoffmann M, Huang T, Humble T S, Isakov S V, Jeffrey E, Jiang Z, Kafri D, Kechedzhi K, Kelly J, Klimov P V, Knysh S, Korotkov A, Kostitsa F, Landhuis D, Lindmark M, Lucero E, Lyakh D, Mandrà S, McClean J R, McEwen M, Megrant A, Mi X, Michielsen K, Mohseni M, Mutus J, Naaman O, Neeley M, Neill C, Niu M Y, Ostby E, Petukhov A, Platt J C, Quintana C, Rieffel E G, Roushan P, Rubin N C, Sank D, Satzinger K J, Smelyanskiy V, Sung K J, Trevithick M D, Vainsencher A, Villalonga B, White T, Yao Z J, Yeh P, Zalcman A, Neven H, Martinis J M. 2019. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574: 505–510
- Bacon D. 2006. Operator quantum error-correcting subsystems for self-correcting quantum memories. *Phys Rev A*, 73: 012340
- Benioff P. 1980. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines. *J Stat Phys*, 22: 563–591
- Bennett C H, Bernstein E, Brassard G, Vazirani U. 1997. Strengths and weaknesses of quantum computing. *SIAM J Comput*, 26: 1510–1523
- Bennewitz E R, Hopfmueller F, Kulchytskyy B, Carrasquilla J, Ronagh P. 2022. Neural error mitigation of near-term quantum simulations.

- [Nat Mach Intell](#), 4: 618–624
- Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, Rebentrost P, Wiebe N, Lloyd S. 2017. Quantum machine learning. [Nature](#), 549: 195–202
- Bravo-Prieto C, LaRose R, Cerezo M, Subasi Y, Cincio L, Coles P J. 2019. Variational quantum linear solver. DOI: 10.48550/arXiv.1909.05820
- Brill K F, Uccellini L W, Manobianco J, Kocin P J, Homan J H. 1991. The use of successive dynamic initialization by nudging to simulate cyclogenesis during GALE IOP 1. [Meteorol Atmos Phys](#), 45: 15–40
- Butt N, Epps K, Overman H, Iwamura T, Fragoso J M V. 2015. Assessing carbon stocks using indigenous peoples' field measurements in Amazonian Guyana. [For Ecol Manage](#), 338: 191–199
- Caro M C, Huang H Y, Cerezo M, Sharma K, Sornborger A, Cincio L, Coles P J. 2022. Generalization in quantum machine learning from few training data. [Nat Commun](#), 13: 4919
- Cavender-Bares J, Schneider F D, Santos M J, Armstrong A, Carnaval A, Dahlin K M, Fatoyinbo L, Hurr G C, Schimel D, Townsend P A, Ustin S L, Wang Z, Wilson A M. 2022. Integrating remote sensing with ecology and evolution to advance biodiversity conservation. [Nat Ecol Evol](#), 6: 506–519
- Chalumuri A, Kune R, Manoj B S. 2020. Training an artificial neural network using qubits as artificial neurons: A quantum computing approach. [Procedia Comput Sci](#), 171: 568–575
- Chambers J Q, Asner G P, Morton D C, Anderson L O, Saatchi S S, Espírito-Santo F D B, Palace M, Souza Jr C. 2007. Regional ecosystem structure and function: Ecological insights from remote sensing of tropical forests. [Trends Ecol Evol](#), 22: 414–423
- Chiesi M, Fibbi L, Genesio L, Gioli B, Magno R, Maselli F, Moriondo M, Vaccari F P. 2011. Integration of ground and satellite data to model Mediterranean forest processes. [Int J Appl Earth Observation Geoinf](#), 13: 504–515
- Childs A M, Kothari R, Somma R D. 2017. Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision. [SIAM J Comput](#), 46: 1920–1950
- Cohen L Z, Kim I H, Bartlett S D, Brown B J. 2022. Low-overhead fault-tolerant quantum computing using long-range connectivity. [Sci Adv](#), 8: eabn1717
- Daley A J, Bloch I, Kokail C, Flannigan S, Pearson N, Troyer M, Zoller P. 2022. Practical quantum advantage in quantum simulation. [Nature](#), 607: 667–676
- Davis M. 1958. Computability and Unsolvability. New York: Dover Publications
- Deshpande A, Mehta A, Vincent T, Quesada N, Hinsche M, Ioannou M, Madsen L, Lavoie J, Qi H, Eisert J, Hangleiter D, Fefferman B, Dhand I. 2022. Quantum computational advantage via high-dimensional Gaussian boson sampling. [Sci Adv](#), 8: eabi7894
- Deutsch D. 1985. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. [Proc R Soc Lond A](#), 400: 97–117
- Dobermann A, Ping J L. 2004. Geostatistical integration of yield monitor data and remote sensing improves yield maps. [Agron J](#), 96: 285–297
- Emili E, Popp C, Wunderle S, Zebisch M, Petitta M. 2011. Mapping particulate matter in alpine regions with satellite and ground-based measurements: An exploratory study for data assimilation. [Atmos Environ](#), 45: 4344–4353
- Fawzi A, Balog M, Huang A, Hubert T, Romera-Paredes B, Barekatin M, Novikov A, R. Ruiz F J, Schrittwieser J, Swirszcz G, Silver D, Hassabis D, Kohli P. 2022. Discovering faster matrix multiplication algorithms with reinforcement learning. [Nature](#), 610: 47–53
- Fedorov A K, Gelfand M S. 2021. Towards practical applications in quantum computational biology. [Nat Comput Sci](#), 1: 114–119
- Feynman R P. 1982. Simulating physics with computers. [Int J Theor Phys](#), 21: 467–488
- Fritz S, McCallum I, Schill C, Perger C, See L, Schepaschenko D, van der Velde M, Kraxner F, Obersteiner M. 2012. Geo-Wiki: An online platform for improving global land cover. [Environ Model Software](#), 31: 110–123
- Grover L K. 1997. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack. [Phys Rev Lett](#), 79: 325–328
- Haber W. 2021. Eco-environmental surface modelling requires integration of both extrinsic and intrinsic informations. [Sci China Earth Sci](#), 64: 185–186
- Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. 2009. Quantum algorithm for linear systems of equations. [Phys Rev Lett](#), 103: 150502
- Hilbert D, von N J, Nordheim L. 1928. Ueber die Grundlagen der Quantenmechanik. [Math Ann](#), 98: 1–30
- IPBES. 2016. The Methodological Assessment Report on Scenarios and Models of Biodiversity and Ecosystem Services. Secretariat of the Intergovernmental Science-Policy Platform on Biodiversity and Ecosystem Services. Bonn. 209–215
- Kempe J. 2003. Quantum random walks: An introductory overview. [Contemp Phys](#), 44: 307–327
- Khrennikov A. 2021. Roots of quantum computing supremacy: Superposition, entanglement, or complementarity? [Eur Phys J Spec Top](#), 230: 1053–1057
- Li L, Wu K, Zhou D W. 2014. Extraction algorithm of mining subsidence information on water area based on support vector machine. [Environ Earth Sci](#), 72: 3991–4000
- Mandayam P, Ng H K. 2012. Towards a unified framework for approximate quantum error correction. [Phys Rev A](#), 86: 012335

- Markov I L. 2014. Limits on fundamental limits to computation. *Nature*, 512: 147–154
- Matthews D. 2021. How to get started in quantum computing. *Nature*, 591: 166–167
- Medvidović M, Carleo G. 2021. Classical variational simulation of the quantum approximate optimization algorithm. *Npj Quantum Information*, 7: 101, <https://doi.org/10.1038/s41534-021-00440-z>
- Mooij H. 2005. The road to quantum computing. *Science*, 307: 1210–1211
- Morrell Jr H J, Wong H Y. 2021. Step-by-step HHL algorithm walkthrough to enhance the understanding of critical quantum computing concepts, DOI: 10.48550/arXiv.2108.09004
- Mueller N, Tarasov A, Venugopalan R. 2021. Computing real time correlation functions on a hybrid classical/quantum computer. *Nucl Phys A*, 1005: 121889
- Nielsen M A, Chuang I L. 2010. Quantum Computation and Quantum Information. New York: Cambridge University Press
- Nimbe P, Weyori B A, Adekoya A F. 2021. Models in quantum computing: A systematic review. *Quantum Inf Process*, 20: 80
- Pereira H M, Ferrier S, Walters M, Geller G N, Jongman R H G, Scholes R J, Bruford M W, Brummitt N, Butchart S H M, Cardoso A C, Coops N C, Dullo E, Faith D P, Freyhof J, Gregory R D, Heip C, Höft R, Hurrut G, Jetz W, Karp D S, McGeoch M A, Obura D, Onoda Y, Pettorelli N, Reyers B, Sayre R, Scharlemann J P W, Stuart S N, Turak E, Walpole M, Wegmann M. 2013. Essential biodiversity variables. *Science*, 339: 277–278
- Pereira L M, and other 32 coauthors. 2020. Developing multiscale and integrative nature-people scenarios using the nature futures framework. *People Nature*, 2: 1172–1195
- Perelshtein M R, Pakhomchik A I, Melnikov A A, Novikov A A, Glatz A, Paraoanu G S, Vinokur V M, Lesovik G B. 2022. Solving large-scale linear systems of equations by a quantum Hybrid Algorithm. *Annalen der Physik*, 534: 2200082
- Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, Yung M H, Zhou X Q, Love P J, Aspuru-Guzik A, O'Brien J L. 2014. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nat Commun*, 5: 4213
- Phillips J D. 2002. Global and local factors in earth surface systems. *Ecol Model*, 149: 257–272
- Ponsar S, Luyten P, Dulière V. 2016. Data assimilation with the ensemble Kalman filter in a numerical model of the North Sea. *Ocean Dyn*, 66: 955–971
- Rebentrost P, Bromley T R, Weedbrook C, Lloyd S. 2018. Quantum Hopfield neural network. *Phys Rev A*, 98: 042308
- Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. 2014. Quantum support vector machine for big data classification. *Phys Rev Lett*, 113: 130503
- Rønnow T F, Wang Z, Job J, Boixo S, Isakov S V, Wecker D, Martinis J M, Lidar D A, Troyer M. 2014. Defining and detecting quantum speedup. *Science*, 345: 420–424
- Shao C. 2018. Reconsider HHL algorithm and its related quantum machine learning algorithms. DOI: 10.48550/arXiv.1803.01486.
- Shor P W. 1994. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. In: *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. New York. 124–134
- Somasundaram D. 2005. *Differential Geometry*. Harrow: Alpha Science International Ltd
- Srivastava P K, Han D, Rico-Ramirez M A, Bray M, Islam T, Gupta M, Dai Q. 2014. Estimation of land surface temperature from atmospherically corrected LANDSAT TM image using 6S and NCEP global reanalysis product. *Environ Earth Sci*, 72: 5183–5196
- Turing A M. 1937. On computable numbers, with an application to the Entscheidungs-problem. *Proc London Mathemat Soc*, 42: 230–265
- Wiebe N, Braun D, Lloyd S. 2012. Quantum algorithm for data fitting. *Phys Rev Lett*, 109: 050505
- Yang W, Zheng Z, Zheng C, Lu K, Ding D, Zhu J. 2018. Temporal variations in a phytoplankton community in a subtropical reservoir: An interplay of extrinsic and intrinsic community effects. *Sci Total Environ*, 612: 720–727
- Yue T X, Liu Y, Du Z P, Wilson J, Zhao D Y, Wang Y, Zhao N, Shi W J, Fan Z M, Zhao X M, Zhang Q, Huang H S, Wu Q Y, Zhou W, Jiao Y M, Xu Z, Li S B, Yang Y, Fu B J. 2022. Quantum machine learning of eco-environmental surfaces. *Sci Bull*, 67: 1031–1033
- Yue T X, Liu Y, Zhao M W, Du Z P, Zhao N. 2016. A fundamental theorem of Earth's surface modelling. *Environ Earth Sci*, 75: 751
- Yue T X, Wang S H. 2010. Adjustment computation of HASM: A high-accuracy and high-speed method. *Int J Geogr Inf Sci*, 24: 1725–1743
- Yue T X, Zhang L L, Zhao N, Zhao M W, Chen C F, Du Z P, Song D J, Fan Z M, Shi W J, Wang S H, Yan C Q, Li Q Q, Sun X F, Yang H, Wilson J, Xu B. 2015. A review of recent developments in HASM. *Environ Earth Sci*, 74: 6541–6549
- Yue T X, Zhao N, Yang H, Song Y J, Du Z P, Fan Z M, Song D J. 2013. A multi-grid method of high accuracy surface modeling and its validation. *Trans GIS*, 17: 943–952
- Yue T X. 2011. *Surface Modelling: High Accuracy and High Speed Methods*. New York: CRC Press
- Yue T X, Chen C F, Li B L. 2010. An adaptive method of high accuracy surface modeling and its application to simulating elevation surfaces. *Trans GIS*, 14: 615–630
- Yue T X, Du Z P, Song D J, Gong Y. 2007. A new method of surface modeling and its application to DEM construction. *Geomorphology*,

91: 161–172

Zhong H S, Wang H, Deng Y H, Chen M C, Peng L C, Luo Y H, Qin J, Wu D, Ding X, Hu Y, Hu P, Yang X Y, Zhang W J, Li H, Li Y, Jiang X, Gan L, Yang G, You L, Wang Z, Li L, Liu N L, Lu C Y, Pan J W. 2020. Quantum computational advantage using photons. [Science](#), 370: 1460–1463

Zhu Q, Cao S, Chen F, Chen M C, Chen X, Chung T H, Deng H, Du Y, Fan D, Gong M, Guo C, Guo C, Guo S, Han L, Hong L, Huang H L, Huo Y H, Li L, Li N, Li S, Li Y, Liang F, Lin C, Lin J, Qian H, Qiao

D, Rong H, Su H, Sun L, Wang L, Wang S, Wu D, Wu Y, Xu Y, Yan K, Yang W, Yang Y, Ye Y, Yin J, Ying C, Yu J, Zha C, Zhang C, Zhang H, Zhang K, Zhang Y, Zhao H, Zhao Y, Zhou L, Lu C Y, Peng C Z, Zhu X, Pan J W. 2022. Quantum computational advantage via 60-qubit 24-cycle random circuit sampling. [Sci Bull](#), 67: 240–245

Zidan M, Eleuch H, Abdel-Aty M. 2021. Non-classical computing problems: Toward novel type of quantum computing problems. [Results Phys](#), 21: 103536

(责任编辑: 李新)