

## 激光与光电子学进展

## 基于紧凑型编码与多项式核的量子分类器研究

贾瑞虹\*, 杨光, 聂敏, 刘原华, 张美玲

西安邮电大学通信与信息工程学院 (人工智能学院), 陕西 西安 710121

**摘要** 核方法在机器学习中有广泛的应用。量子计算与核方法结合,可以有效解决经典核方法中当特征空间变大时计算成本随之增加的问题。研究表明,基于核方法构建的最小化量子电路可以可靠地在含噪声的中型量子设备上执行。目前已提出的一些基于量子核方法的分类器在充分映射数据以及电路架构等方面仍存在一定的缺陷。因此,提出了一种基于多项式核函数的紧凑型量子分类器。首先通过引入多项式核函数,提升了非线性数据的分类迭代速率,从而提升了分类效率;在此基础上进一步提出紧凑型振幅编码,将量子态相对应相位的数据标签编码。相比于已有的量子核方法分类器,所提模型的量子电路的编码位数可以从 5 个量子比特减少到 3 个量子比特,而且,所提模型将已有方法中的双量子位测量简化为单量子位测量。此外,该模型在测量阶段的量子电路参数达到了最优方差,可以有效节省计算资源开销。实验仿真表明,所提分类器模型中的期望值更接近理论值,且获得了更高的分类精度,同时该模型具有较低的纠缠度,有效降低了整个准备工作的开销。

**关键词** 量子信息处理; 核方法; 紧凑型振幅编码; 纠缠度

中图分类号 O413

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP223345

## Quantum Classifier Based on Compact Encoding and Polynomial Kernel

Jia Ruihong\*, Yang Guang, Nie Min, Liu Yuanhua, Zhang Meiling

School of Communication and Information Engineering & School of Artificial Intelligence,  
Xi'an University of Posts & Telecommunications, Xi'an 710121, Shaanxi, China

**Abstract** Kernel method has a wide range of applications in machine learning. The combination of quantum computing and kernel method can effectively solve the problem of increasing computational costs in classical kernel method when the feature space becomes larger. Researches show that the minimized quantum circuits based on kernel method can be reliably executed on noisy intermediate-scale quantum devices. Some classifiers based on the quantum kernel method that have been proposed so far still have certain defects in terms of fully mapping data and circuit architecture. Therefore, we propose a compact quantum classifier based on polynomial kernel functions. First, a polynomial kernel function is introduced to increase the classification iteration rate of nonlinear data, thereby improve the classification efficiency. On this basis, a compact amplitude encoding is further proposed to encode the data labels corresponding to the quantum state. Compared with the existing quantum kernel method classifier, the number of coding bits of the quantum circuit of the proposed model can be reduced from 5 qubits to 3 qubits, and the two-qubit measurement in the existing method is simplified to a single-qubit measurement in the proposed model. In addition, the model achieves the optimal variance of the quantum circuit parameters in the measurement stage, which can effectively save computing resource overhead. Experimental simulations show that the expected value in the proposed classifier model is closer to the theoretical one, and higher classification accuracy is obtained. At the same time, the model has a low degree of entanglement, which effectively reduces the overhead of the entire preparation work.

**Key words** quantum information and processing; kernel method; compact amplitude encoding; entanglement

## 1 引言

量子机器学习是量子信息处理与机器学习相结合

的新方向,它利用量子计算在处理数据方面的优势来改善经典机器学习算法<sup>[1]</sup>。在经典的机器学习中,核方法通过非线性映射将原始数据嵌入到高维特征空

收稿日期: 2023-01-05; 修回日期: 2023-03-03; 录用日期: 2023-03-15; 网络首发日期: 2023-03-25

基金项目: 国家自然科学基金(61971348)、陕西省自然科学基金基础研究计划(2021JM-464)

通信作者: hongrjia@163.com

间,再利用通用的线性学习器在这个新的空间分析和处理数据。核方法在机器学习领域应用十分广泛,如支持向量机、高斯过程等<sup>[2-3]</sup>。然而,当映射空间较大时,核函数计算成本也随之增加,故经典的核方法受到限制。量子计算和核方法在数学结构上十分相似,即将数据信息映射到高维空间来处理而无须计算<sup>[4]</sup>。通常将量子计算和经典核方法相结合的思路称为量子核方法。量子核方法为量子计算解决一系列机器学习问题提供了全新的视角,近年来受到了极大的关注<sup>[5-10]</sup>。尤其是文献[5]提出将量子希尔伯特空间作为数据的特征空间,从而正式建立了核方法与量子计算之间的联系。文献[6]中利用量子状态空间作为特征空间,实现了两种量子分类算法:量子变分分类器和量子核评估器。而文献[7]在量子计算机上构建了一系列参数化么正电路来证明量子核加速。

近年,Schuld等<sup>[11]</sup>通过一个小型的干涉电路,实现了基于距离的监督型量子分类器。该分类器通过给定的标签数据集,尽可能地分类未知数据。其中引入的量子干涉电路通过一种基于训练数据和测试数据之间的转移概率振幅(状态重叠)的实部的核来实现分类。将经典数据编码为指定形式的量子态之后,再通过阿达玛(H)门干涉训练和测试数据集,收集被投影到特定子空间的后选择状态,通过投影测量以统计数据,最终实现分类。该分类器仅考虑了状态重叠的实部,不适用于任意的量子态。因此,设计适用于任意量子态的分类器对于深入研究量子核方法具有重要意义。

为充分利用量子计算机在希尔伯特空间中有效操纵量子态的能力,Blank等<sup>[12]</sup>也提出了一种基于距离的量子分类器,其内核基于量子态保真度。同时,构造了一个简单且系统的量子电路,用于实现训练数据和测试数据之间的量子态保真度的任意加功率和,并将此作为距离测度。该分类器是通过将训练和测试数据编码为振幅形式的量子态,并对其应用交换测试(swap-test)<sup>[13]</sup>来实现的。因此将此分类器称为swap-test分类器。相比于文献[11]中的分类器,此分类器可以将特征充分映射于任意纯态,也不需要额外的后处理操作,提升了噪声存在时的精度,而不依赖于量子纠错码。此外,文献[14]将量子态之间的平方重叠作为相似性度量研究二分类的最小成分,还将swap-test分类器拓展到集成学习等方面。然而,基于交换测试的分类器在电路架构、量子位测量等方面,特别是纠缠度方面仍存在一定的冗余。

本文提出了一种基于多项式核函数的紧凑型分类器。通过引入多项式核函数,提升量子分类器对非线性数据的分类速率,进而提升分类精度。此外,通过紧凑型振幅编码来优化电路结构,证明了紧凑型分类器的单量子位干涉电路可以考虑到量子态的虚部。标签信息编码在量子电路中隐式执行,将两组数据编码到一个量子寄存器,去除了用于准备标签寄存器的状态

准备子程序,从而减少了索引量子位元的数量,故实现了单量子位测量。另外,明确计算了获得固定成功概率的重复测量次数,表明了分类器在量子电路方面达到了最优方差,可以最小化计算开销。该紧凑型量子分类器模型具有较低的纠缠度,可以进一步简化状态准备工作。

## 2 基于量子核方法的 swap-test 分类器原理

### 2.1 经典核方法

传统核方法是将输入空间中的数据点映射到高维特征空间的分类算法,因为数据在高维空间更易区分。核方法利用核技巧避免计算高维空间中的坐标,而在特征空间中简单计算输入空间的数据点的核。对于数据集  $D = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{x}_N, \mathbf{y}_N)\}$ , 其中  $\mathbf{x}_i$  为第  $i$  项数据;  $\mathbf{y}_i$  为对应  $i = 1, \dots, N$  的标签, 设  $\phi: F \rightarrow F'$ , 表示从输入空间  $F$  映射到特征空间  $F'$ , 即  $\mathbf{x} \rightarrow |\phi(\mathbf{x})\rangle$ 。由于实际应用中的特征空间维度会很大,通过核方法中的核函数,可以隐式地引入特征映射在模式识别方面的优势。核函数一般定义为数据在特征空间中的内积,其形式为

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle, \quad (1)$$

式中:  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  为映射数据在特征空间中的内积;  $\phi(\mathbf{x}_i)$  和  $\phi(\mathbf{x}_j)$  分别对应映射后的特征,且  $i \neq j$ 。核函数必须满足半正定性,即对于数量为  $l$  的实数  $c_1, \dots, c_l$ , 需满足  $\sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) c_i c_j \geq 0$ 。因此在核方法中无须显示

特征映射,只需定义核函数的形式即可。一方面,计算核函数比计算特征空间中每个数据的坐标更方便,另一方面,无须在算法的任何阶段计算  $\phi(\mathbf{x}_i)$ 。

### 2.2 量子核方法

量子计算和核方法有相似的工作原理,即将信息映射到高维空间进行处理。这种相似性在训练生成量子模型<sup>[15]</sup>、揭示量子机器学习和度量学习的关系<sup>[16]</sup>等领域很有帮助。从量子计算角度出发,量子特征映射  $\mathbf{x} \rightarrow |\phi(\mathbf{x})\rangle$  对应于状态准备电路,通过一个编码电路  $U(\mathbf{x})$  将经典数据  $\mathbf{x}$  编码到某个量子态上,表示为

$$U(\mathbf{x})|0\dots 0\rangle = |\phi(\mathbf{x})\rangle. \quad (2)$$

此外,还需进一步考虑一个模型电路  $W: W|0\dots 0\rangle = |\omega\rangle$ 。该模型电路在特征希尔伯特空间中指定了一个线性模型的超平面。若特征态  $|\phi(\mathbf{x})\rangle$  正交于  $|\omega\rangle$ , 则  $\mathbf{x}$  位于决策边界上,当二者内积为正(负)时,  $\mathbf{x}$  位于边界的左侧(右侧)。

通过一些常用的编码方式来展示特征编码与量子核函数的关系。首先,基态编码将长度为  $n$  的二进制字符串编码为  $n$  个量子比特的量子态,比如当经典数据  $\mathbf{x} = 1001$  时,对应得到的量子态形式就是  $|1001\rangle$ 。

计算基态对应  $2^n$  维希尔伯特空间的标准基向量  $|i\rangle$ , 特征编码电路形式为

$$U: \mathbf{x} \rightarrow |i\rangle, \quad (3)$$

将每个输入数据从一个标准正交基映射为一个量子态, 对应核函数形式为  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ , 表示一个二维相似度量, 对于两个相同的输入, 它为非零值。

而振幅编码是将一个  $N$  维数据编码到一个  $n$  量子比特的量子态,  $n = \log_2 N$ , 则

$$U: \mathbf{x} \rightarrow |\phi(\mathbf{x})\rangle = \sum_{i=1}^N x_i |i\rangle, \quad (4)$$

式中,  $|i\rangle$  为希尔伯特空间中第  $i$  个计算基。经典数据构成了一个量子态的振幅, 所以需满足归一化条件  $|\mathbf{x}|^2 = 1$ 。振幅编码对应一个线性核  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \phi(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x}')\rangle$ 。此外, 通过稍微修改振幅编码, 可以实现多项式核。取一个振幅编码量子态的  $d$  个副本,

$$U: \mathbf{x} \rightarrow |\phi(\mathbf{x})\rangle \otimes \dots \otimes |\phi(\mathbf{x})\rangle, \quad (5)$$

式中,  $\otimes$  表示张量积运算。对应核形式为  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle \phi(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x}')\rangle \dots \langle \phi(\mathbf{x})|\phi(\mathbf{x}')\rangle = (\mathbf{x}^T \mathbf{x}')^d$ 。量子计算机操纵高维向量的能力为多项式核提供了一种自然的量子算法, 可以利用式(5)中的核技巧来构建多项式核。在原空间中优化非线性多项式核变成了优化  $d$  维张量积空间中的线性超平面。与经典的核机器相比, 在计算内积方面的指数型量子优势允许量子核机器在高维空间中直接执行核计算。

此外, 张量积编码将输入数据的每个特征编码在一个单独量子位的振幅中。例如将  $\mathbf{x}_i, i = 1, 2, \dots, N$  编码为  $|\phi(\mathbf{x}_i)\rangle = \cos(\mathbf{x}_i)|0\rangle + \sin(\mathbf{x}_i)|1\rangle$  形式, 其特征编码电路形式为

$$U: \mathbf{x} \rightarrow \begin{bmatrix} \cos(\mathbf{x}_1) \\ \sin(\mathbf{x}_1) \end{bmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{bmatrix} \cos(\mathbf{x}_N) \\ \sin(\mathbf{x}_N) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

对应的余弦核为  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \prod_{i=1}^N \cos(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i)$ 。

### 2.3 swap-test 分类器

swap-test 分类器<sup>[12]</sup>将训练和测试数据之间的量子态保真度作为内核, 其状态准备工作要求将带有标签的训练数据编码为索引、数据和标签寄存器中的特定格式。同时, 它需要在一个单独的输入寄存器上完成测试数据的状态准备。图 1 为一个基于量子态保真度

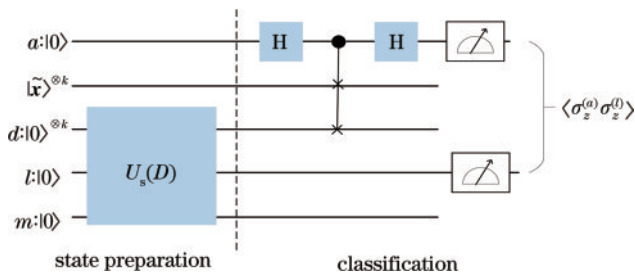


图 1 swap-test 分类器的电路结构

Fig. 1 Circuit structure of swap-test classifier

的幂数为  $k$  的核实现 swap-test 分类器的量子电路, 主要包括量子态的准备过程和分类两部分。第 1 个寄存器为辅助量子位; 第 2 个寄存器包含测试数据个数为  $k$  的副本; 第 3 个寄存器为数据量子位; 第 4 个寄存器是标签量子位; 最后一个寄存器对应索引量子位。先通过  $U_s(D)$  生成分类算法所需的输入态, 再利用交换测试和双量子位测量产生最终分类结果。图 1 中:  $a$  为辅助量子位;  $|\tilde{\mathbf{x}}\rangle^{\otimes k}$  为训练数据的数量为  $k$  的副本的量子态形式;  $d:|0\rangle^{\otimes k}$  为训练数据对应的量子态;  $l$  为标签量子位;  $m$  为索引量子位。

先对经典数据作一些必要的预处理(归一化或补零), 再利用振幅编码[式(4)]将经典数据编码为量子态形式。用密度矩阵形式来表示初始态有助于了解 swap-test 分类器的核函数。初始态的形式为

$$\rho = |0\rangle\langle 0| \otimes \sum_{j=1}^N \left[ w_j (\tilde{\rho} \otimes \rho_j)^{\otimes k} |y_j\rangle\langle y_j| \otimes |j\rangle\langle j| \right], \quad (7)$$

式中:  $\rho_j$  和  $\tilde{\rho}$  分别为训练和测试数据对应的密度矩阵形式; 标签  $y_j$  由标签量子位的计算基表示; 权重  $w$  是均匀的,  $w_j = 1/N$ ;  $\otimes k$  表示  $k$  次运算。根据初始基态, 分类器所需的量子态是通过一系列由索引量子位控制的受控交换门准备的。因此交换测试的基本思想是应用量子分叉<sup>[17]</sup>技术创建一个纠缠态, 将每个由索引量子位基态标记的子空间编码为一个不同的训练数据。应用交换测试为

$$v = H^{(a)} \cdot \prod_{m=1}^k S_{\text{swap}}(t_m, d_m | a = 1) \cdot H^{(a)}, \quad (8)$$

式中:  $H^{(a)}$  为作用在辅助量子位上的门;  $S_{\text{swap}}(t_m, d_m | a = 1)$  为受控交换门, 当辅助量子位状态为  $a$  时, 则交换测试和训练数据为第  $m$  个副本。然后, 双量子位可观测量  $\sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(l)}$  的测量结果为

$$\langle \sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(l)} \rangle = \sum_{j=1}^N (-1)^{y_j} w_j \text{Tr}(\tilde{\rho} \rho_j)^k, \quad (9)$$

式中: 上标  $a$  和  $l$  分别对应作用于辅助量子位和标签量子位的算符;  $\text{Tr}(\cdot)$  表示对应密度矩阵的迹。由式(9)可得出 swap-test 分类器的核函数  $k(\mathbf{x}_j, \tilde{\mathbf{x}}) = \text{Tr}(\tilde{\rho} \rho_j)^k$ 。当训练数据、测试数据都为纯态时,  $\tilde{\rho} = |\tilde{\mathbf{x}}\rangle\langle \tilde{\mathbf{x}}|$ ,  $\rho_j = |\mathbf{x}_j\rangle\langle \mathbf{x}_j|$ , 核函数  $k(\mathbf{x}_j, \tilde{\mathbf{x}}) = \left| \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_j \rangle \right|^{2k}$ , 为量子保真度的  $k$  次幂。最后, 测试数据分配到的新标签为

$$\tilde{y} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \text{sgn} \left[ \sum_{j=1}^N (-1)^{y_j} w_j \text{Tr}(\tilde{\rho} \rho_j)^k \right] \right\}. \quad (10)$$

式中,  $\text{sgn}(\cdot)$  表示符号函数, 大于 0 为 1, 小于 0 为 -1。

## 3 紧凑型分类器

### 3.1 紧凑型振幅编码

传统的振幅编码方式是将数据编码为量子态的振幅形式, 而紧凑型振幅编码的主要思想是利用标签将

数据编码为量子态概率振幅的实部和虚部,因为观测值中的  $\cos(\varphi)$  和  $\sin(\varphi)$  有相同的符号,而状态重叠的实部和虚部具有相反的符号。swap-test 量子分类器中的 H 门可以用任意单量子比特旋转门来代替。初始态变为

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^N \sqrt{w_j} |0\rangle \left[ \sin(\theta_0 e^{i\varphi} |\tilde{\mathbf{x}}\rangle / 2) \right]^{\otimes k} \cdot \left[ \cos(\theta_0 |\mathbf{x}_j\rangle / 2) \right]^{\otimes k} |y_j\rangle |j\rangle, \quad (11)$$

式中:  $|\mathbf{x}_k\rangle$  和  $|\tilde{\mathbf{x}}\rangle$  分别为经典训练数据和测试数据编码后的量子态形式;  $w_j$  为权重;  $|y_j\rangle$  和  $|j\rangle$  分别为标签和索引编码后的量子态形式;  $k$  为测试数据样本数量。量子电路末尾的 H 门也可以被绕布洛赫球  $y$  轴的任意旋转  $R_y(\theta_1) = \cos(\theta_1/2) \mathbf{I} - i \sin(\theta_1/2) \sigma_y$  替代。此门之后可添加围绕  $z$  轴的旋转,但由于在  $\sigma_z$  中测量,因此可以忽略,不会影响测量结果。对双量子位期望值的测量为

$$\langle \sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(l)} \rangle = \sum_{j=1}^N (-1)^{y_j} w_j \cdot [\cos(\theta_0) \cos(\theta_1) - \sin(\theta_0) \sin(\theta_1)] \times [\cos(\varphi) \operatorname{Re} \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_j \rangle - \sin(\varphi) \operatorname{Im} \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_j \rangle]^k, \quad (12)$$

表明状态重叠的虚部也有助于分类器分类。取  $\theta_0 = \pi/2, \theta_1 = -\pi/2$ , 则期望值为

$$\langle \sigma_z^{(a)} \sigma_z^{(l)} \rangle = \sum_{j=1}^N (-1)^{y_j} w_j \cdot [\cos(\varphi) \operatorname{Re} \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_j \rangle - \sin(\varphi) \operatorname{Im} \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_j \rangle]^k, \quad (13)$$

也可以通过对辅助量子位使用单量子位旋转  $R_z(\varphi) = \cos(\varphi/2) \mathbf{I} - i \sin(\varphi/2) \sigma_z$  得到。在式(13)中,当期望值中  $\cos(\varphi)$  和  $\sin(\varphi)$  符号相同时,状态的实部和虚部贡献了相反的符号。因此可以用标签 +1 和 -1 将数据编码为量子态概率振幅的实部和虚部,从而进行二分类。两个  $N$  维的实向量  $\mathbf{x}_p^+ = (\mathbf{x}_{1p}^+, \dots, \mathbf{x}_{Np}^+)^T$  和  $\mathbf{x}_p^- = (\mathbf{x}_{1p}^-, \dots, \mathbf{x}_{Np}^-)^T$  带有对应的标签,可以加载为量子态,表示为

$$|\mathbf{x}_p\rangle = \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_{jp}^+ + \mathbf{x}_{jp}^-) |j\rangle, \quad (14)$$

式中,  $\|\mathbf{x}_p^+\|^2 + \|\mathbf{x}_p^-\|^2 = 1$ , 满足归一化条件。式(14)表明两个  $N$  维向量被编码为  $\log_2 N$  个量子位。两个量子位之间的状态重叠,一部分用常规振幅编码为  $N$  维实向量  $\tilde{\mathbf{x}}$ , 另一部分用紧凑型振幅编码为两个  $N$  维实向量  $\mathbf{x}_p^+$  和  $\mathbf{x}_p^-$ , 表示为

$$\langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_p \rangle = 1/\sqrt{2} (\langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_p^+ \rangle + i \langle \tilde{\mathbf{x}} | \mathbf{x}_p^- \rangle). \quad (15)$$

### 3.2 基于紧凑型编码和多项式核函数的分类器原理

swap-test 分类器考虑到了状态准备的虚部,对于

设计适用于任意量子态的分类器具有重要意义。然而其在电路结构方面仍存在一定冗余,且电路本身具有较高的纠缠度。可以通过所提紧凑型振幅编码和多项式核函数来优化这一问题。紧凑型量子分类器的电路架构如图 2 所示。

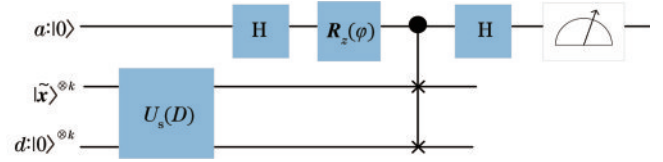


图 2 紧凑型量子分类器的电路架构

Fig. 2 Circuit structure of compact quantum classifier

首先准备其初始态,将数据集  $D$  编码为

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{N/2} \sqrt{w_j} \left( |0\rangle |\mathbf{x}_j\rangle_c^{\otimes k} + e^{-i\varphi} |\tilde{\mathbf{x}}\rangle^{\otimes k} \right) |j\rangle, \quad (16)$$

式中,下标  $c$  表示状态是由紧凑型振幅编码准备的,且权重  $\sum_{j=1}^{N/2} w_j = 1$ 。由于标签信息可以隐式编码,对应相位  $e^{-i\varphi}$  通过单量子比特旋转门加入到辅助量子位上,因此该初始态更容易准备。同时,由于两个训练数据被编码在一个量子寄存器上,求和项的数量减少一半,故索引寄存器的数量也减少一半。状态准备过程如图 3 所示,其中:  $\sum_{j=0}^{N/2-1} \sqrt{w_j} |j\rangle$  是关于权重和索引的量子位;  $|\mathbf{x}_0\rangle^{\otimes k}$  是首个数据对应的量子位;  $|\mathbf{x}_{N/2}\rangle^{\otimes k}$  是第  $N/2$  个数据对应的量子位。

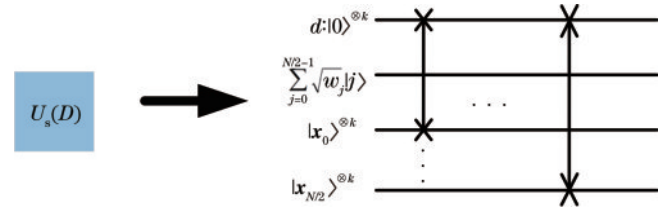


图 3 状态准备过程架构图

Fig. 3 Circuit structure of state preparation process

状态准备过程将带有标签的训练数据编码为索引和数据寄存器中的特定格式,同时,测试数据的准备过程也在一个单独的寄存器上完成。而辅助量子位则作为交换测试中的控制量子位,在状态准备之后,利用控制交换门交换训练和测试数据。通过训练和测试数据的多个副本,就可以设计出多项式核函数。对训练和测试数据数量为  $k$  的副本进行交换测试,纠缠形式为

$$|\psi\rangle \xrightarrow{H^{\otimes k} C_{\text{c-swap}}} \sum_{j=1}^{N/2} (\sqrt{w_j}/2) (|0\rangle |\varphi_+\rangle + |1\rangle |\varphi_-\rangle) |j\rangle, \quad (17)$$

式中:  $C_{\text{c-swap}}$  表示控制交换操作;  $|\varphi_{\pm}\rangle = |\tilde{\mathbf{x}}\rangle^{\otimes k} |\mathbf{x}_j\rangle^{\otimes k} \pm |\mathbf{x}_j\rangle^{\otimes k} |\tilde{\mathbf{x}}\rangle^{\otimes k}$ 。算法的其余部分只需要一个 H 门和  $\sigma_z$  中的辅助量子位的测量。再通过 H 门作用于新输入和

训练输入的副本,产生一个新量子态:

$$|\psi_f\rangle = \sum_{j=1}^{N/2} \sqrt{w_j} \cdot \left[ |0\rangle \left( |x_j\rangle_c^{\otimes k} + e^{i\varphi} |\tilde{x}\rangle^{\otimes k} \right) + |1\rangle \left( |x_j\rangle_c^{\otimes k} - e^{i\varphi} |\tilde{x}\rangle^{\otimes k} \right) \right]. \quad (18)$$

最后通过投影测量方法来完成分类。根据交换运算符的特征态对应的特征值,可以对观测值的期望进行分解。因此投影测量可以描述为给定密度矩阵  $\rho = \tilde{\rho} \otimes \sum_j w_j \rho_j \otimes |y_j\rangle \langle y_j|$ , 获得特征值  $\lambda$  的测量结果的概率,表示为

$$P_r[\lambda] = \text{Tr} \left( \rho \sum_{i|\lambda_i=\lambda} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| \right) = \frac{1}{2} \cdot \left\langle \text{Tr}[\rho \lambda (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{S})] + \text{Tr} \left\{ [\text{Tr}_r(\rho) - \rho_\lambda] (\mathbf{I} \otimes \mathbf{I} - \mathbf{S}) \right\} \right\rangle, \quad (19)$$

式中:  $\text{Tr}_r(\cdot)$  为标签量子位元上的偏迹;  $\rho_\lambda = \text{Tr}_r(\rho |l_\lambda\rangle \langle l_\lambda|) = \tilde{\rho} \otimes \sum_{n|y_n=l_\lambda} w_n \rho_n$  且  $l_\lambda = (1 - \lambda)/2$ ,  $n$  为数据所需要的量子位数;  $\mathbf{S}$  为交换运算符。简化式(19)得到

$$P_r[\lambda] = \frac{1}{2} \left[ 1 + \sum_{j|y_j=l_\lambda} w_j \text{Tr}(\tilde{\rho} \rho_n) - \sum_{j|y_j \neq l_\lambda} w_j \text{Tr}(\tilde{\rho} \rho_j) \right] = \frac{1}{2} \left[ 1 + \lambda \sum_j (-1)^{y_j} w_j \langle \tilde{\rho}, \rho_j \rangle \right]. \quad (20)$$

因此可以通过投影测量来描述分类器的输出。测量辅助量子位处于  $|0\rangle$  的概率为

$$P_r(0) = \sum_{j=1}^{N/2} w_j \left( 2 + e^{-i\varphi} \langle x_j | \tilde{x} \rangle^k + e^{i\varphi} \langle \tilde{x} | x_j \rangle_c^k \right), \quad (21)$$

利用等式  $k_j = \langle \tilde{x} | x_j \rangle_c^k$ , 式(21)可以改写为

$$P_r(0) = \sum_{j=1}^{N/2} w_j \left[ 1 + \cos(\varphi) \text{Re}(k_j) - \sin(\varphi) \text{Im}(k_j) \right], \quad (22)$$

相似地,辅助量子位为  $|1\rangle$  时的概率为

$$P_r(1) = \sum_{j=1}^{N/2} w_j \left[ 1 - \cos(\varphi) \text{Re}(k_j) + \sin(\varphi) \text{Im}(k_j) \right]. \quad (23)$$

因此,在辅助量子位上测量  $\sigma_z$  的期望值为

$$\langle \sigma_z^{(a)} \rangle = \sum_{j=1}^{N/2} w_j \left[ \cos(\varphi) \text{Re}(k_j) - \sin(\varphi) \text{Im}(k_j) \right], \quad (24)$$

通过设定  $\cos(\varphi) = \sin(\varphi) = 1/\sqrt{2}$ , 利用式(11),期望值可以写为

$$\langle \sigma_z^{(a)} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N/2} w_j \left( \langle \tilde{x} | x_j^+ \rangle^k - \langle \tilde{x} | x_j^- \rangle^k \right). \quad (25)$$

紧凑型量子分类器可以通过单量子位测量得到分类结果,意味着其可以绕开原始分类器的训练方式,以

提升后选择的概率,同时,可以降低量子电路的尺寸和深度。通过在辅助量子位的两个计算基态之间引入一个可控的相对相位,并使用紧凑的振幅编码,可以去除了用于标签和索引的量子位。编码训练集的量子操作由  $\log_2 N$  个量子位控制的  $N$  个量子门缩减为由  $(\log_2 N) - 1$  个量子位控制的  $N/2$  个门。少用一个受控的量子位元可以进一步将量子电路的深度减少一半<sup>[18]</sup>。因此,编码训练数据集  $x_j$  的操作次数减少了  $1/4$ 。

## 4 性能分析与仿真

首先通过一些常用数据集的分类结果验证引入的多项式核函数在分类速率与精度等方面的优势;然后证明该分类模型在测量阶段能达到最优方差,可以有效节约计算资源;最后,从量子纠缠的角度出发,证明紧凑型振幅编码使得分类器具有较低的纠缠度。

### 4.1 量子分类器分类结果分析

在一些常用的数据集上,通过紧凑型量子分类器和 swap-test 分类器的实验对比分析验证所提模型的性能。首先在量浆平台上,利用 half\_moon 数据集对比两种分类器的期望值。结果如图 4 所示,当期望值为正(纵坐标大于 0 的部分)时,测试数据为 +1 类;当期望值为负(纵坐标小于 0 的部分)时,测试数据为 -1 类,紧凑型分类器的期望值更接近理论期望值,意味着理论上紧凑型分类器可以得到更准确的分类精度。与理论值之间的差异是量浆平台模拟真实的量子设备上的系统与环境相互作用产生的非相干噪声导致的。

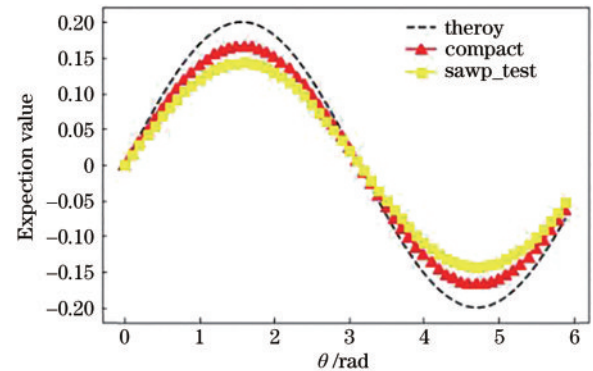


图 4 两种分类器期望值与理论期望值的比较

Fig. 4 Comparison between the expected values of two classifiers and the theory expected value

通过分析 half\_moon、circular、Iris 和 BreastCancer<sup>[19]</sup> 4 种数据集的分类迭代过程,比较线性核、余弦核以及多项式核函数对分类过程的影响。由图 5 可知,相比其余两种核函数,基于多项式核函数的分类器迭代速率和精度都更优。在同一迭代周期内,多项式核的分类精确度也明显高于线性核与余弦核,且在较短的迭代周期内达到了最优精度。

通过一些简单构造数据集对基于多项式核函数的紧凑型分类器进行分类验证,以观察决策边界。图 6

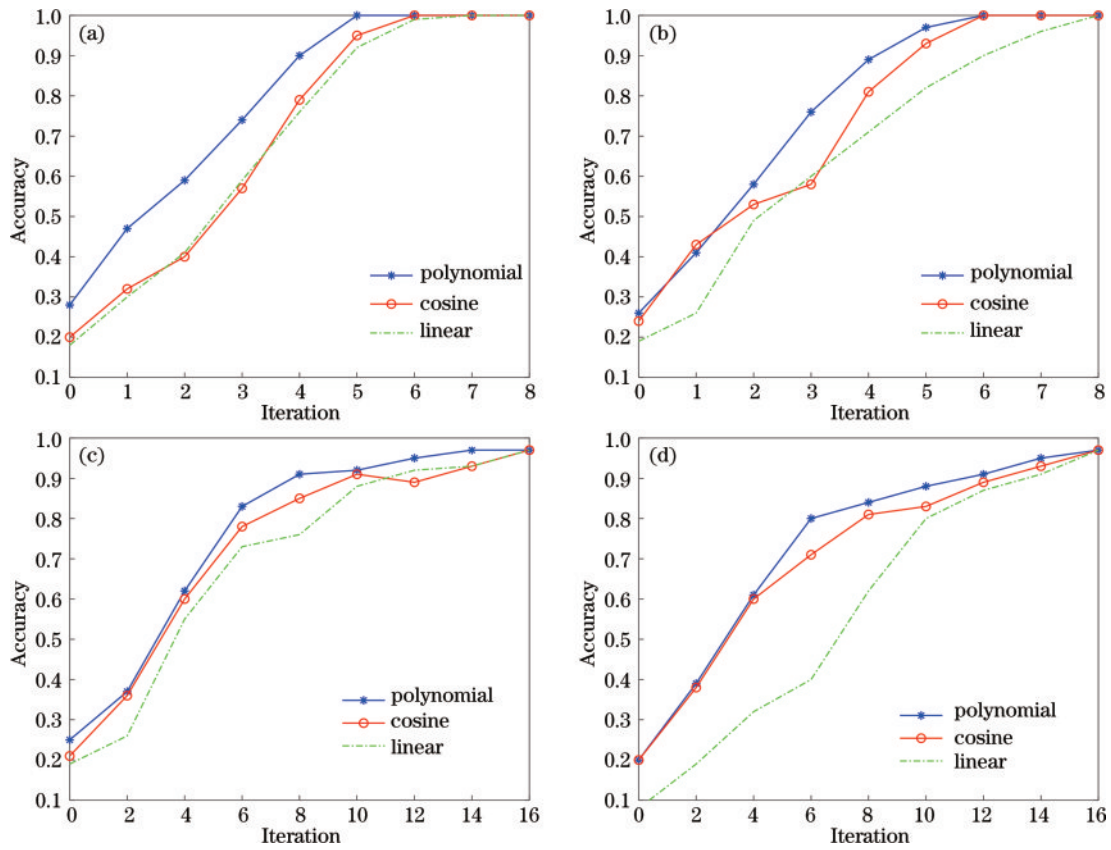


图 5 原始余弦核、线性核紧凑型 and 多项式核紧凑型的数据集分类迭代过程。(a) half\_moon 数据集; (b) circular 数据集; (c) Iris 数据集; (d) BreastCancer 数据集

Fig. 5 Iterative process of dataset classification for original cosine kernel, linear kernel compact and polynomial kernel compact. (a) Half-moon dataset; (b) circular dataset; (c) Iris dataset; (d) BreastCancer dataset

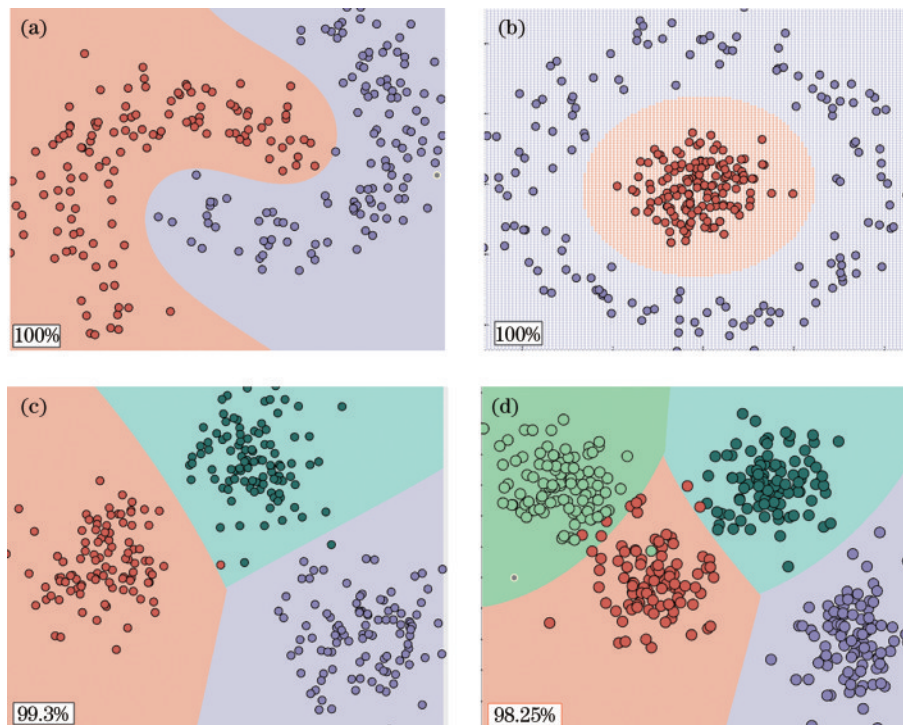


图 6 构造数据集的分类边界。(a)(b)不同形式的二分类;(c)三分类;(d)四分类

Fig. 6 Decision boundary of constructed dataset. (a) (b) Different forms of binary classification; (c) three-way classification; (d) four-tape classification

中每类数据都有 500 个训练样本和 300 个测试样本。由图 6 可知,对于多分类任务,该模型仍可以达到较高的准确率。同时,该模型也很容易学习二维小型基准数据集的决策边界。

上述 4 类常用数据集的分类结果如表 1 所示,紧凑型量子分类器的期望值更接近理论值,且分类准确度也优于 swap-test 分类器。同时,引入的多项式核方法可以显著提升分类的迭代过程,并且更容易学习到数据集的分类边界。

表 1 4 类数据集的分类结果  
Table 1 Classification results of four types datasets

Classifier	Half-moon	Circular	Iris	BreastCancer
Swap-test	1.00	1.00	0.96	0.94
Compact	1.00	1.00	0.98	0.97

## 4.2 紧凑型分类器的开销分析

分类结果是通过测量可观测值的期望值来进行评估的。因此,为了获得可靠的统计数据,多次重复同一实验不可避免。然而,由于量子力学的测量假设和量子不可克隆定理,必须为算法的每一次执行创建一个相同的输入状态。准备任意量子态的计算成本取决于要编码的数据结构,特别是对于含噪中型量子(NISQ)计算,减少重复次数是必要的。因此可以通过计算紧凑型分类器的测量次数,观察其分类效果是否达到最优。重复次数可以用切比雪夫不等式计算

$$P_r[|\mu - \langle E \rangle| \geq \epsilon] \leq \sigma^2 / (m\epsilon^2), \quad (26)$$

式中: $\mu$ 是  $m$  次实验得到的平均值; $\langle E \rangle$ 为要评估的期望值; $\sigma^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ ,为方差。分类时,只采用期望值的符号,所以精度可以表示为

$$\epsilon = \langle E \rangle / c, \quad (27)$$

式中,常数  $c > 1$ 。故所需重复的次数为

$$m = O(\sigma^2 / \langle E \rangle^2), \quad (28)$$

式中, $O(\cdot)$ 通常用于复杂度的表示,是一种大 O 表示法。由式(24), $\langle (\sigma_z^{(a)})^2 \rangle = \langle I \rangle = 1$ ,因此方差为  $1 - \langle (\sigma_z^{(a)})^2 \rangle$ 。为得到最小方差,需要最大  $f(\theta_0, \theta_1, \varphi) = \langle \sigma_z^{(a)} \rangle^2$ 。为简单起见,设置  $\theta_0 = \pi/2$ ,目标函数为

$$\left| \sum_{j=1}^{N/2} w_j \sin(\theta_1) \cos(\varphi) k(\mathbf{x}_j, \tilde{\mathbf{x}}) \right|^2. \quad (29)$$

当  $|\sin(\theta_1) \cos(\varphi)| = 1$  时,  $\theta_1$  和  $\varphi$  可以最大化。 $\sin(\theta_1) = 1$  以及  $\cos(\varphi) = -1$  相当于将辅助量子位上的最终量子门设为 H 门,这也与所叙紧凑型量子分类器电路结构相匹配。故基于多项式核函数的紧凑型分类器可以通过最少的期望值测量次数达到同样的分类效果,进一步节约额外的计算资源。将此分类算法推广到 NISQ 计算机也是极具优势的。

## 4.3 纠缠度分析

理清量子优势的来源对于进一步的研究至关重要。纠缠作为一种量子资源,它允许开发更有效的算法和协议。基于施密特系数平方的纯态纠缠的数值度量,表明了分类器状态准备的复杂性与纠缠度有关,这些度量与状态初始化所需的门的数量直接相关<sup>[20-22]</sup>。通过纠缠和状态准备之间的关系可以更好地理解状态的初始化复杂性<sup>[23]</sup>。较低的纠缠度在状态准备过程中需要更少的纠缠门。因此对纠缠度的分析有助于凸显紧凑型分类器在状态准备过程中的优势。使用 Meyer-Wallach 测度<sup>[24]</sup>来测量纠缠,可以计算出一个与状态的平均单量子位纯度线性相关的值:

$$Q(|\psi\rangle) = 2 \left[ 1 - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \text{Tr}(\rho_k^2) \right], \quad (30)$$

式中, $\rho_k$ 是将  $|\psi\rangle$  划分为一个量子位和  $n-1$  个量子位后得到的单量子位密度矩阵。主要使用 Iris 和 BreastCancer 数据集来比较紧凑型 and swap-test 分类器的 Meyer-Wallach 纠缠。数据集采用不同的特征大小:Iris 有 4 个特征;BreastCancer 有 32 个特征。通过差值来比较纠缠度,差值表示为

$$\Delta = Q_s(|\psi_f\rangle) - Q_c(|\psi_f\rangle). \quad (31)$$

式中, $Q_c(|\psi_f\rangle)$ 和  $Q_s(|\psi_f\rangle)$ 分别为紧凑型 and swap-test 分类器的纠缠差值。

由于 Iris 数据集不是二分类,故采用“Setosa”和“Virginica”两类数据集,以观察纠缠结构的影响。图 7 为两类数据集的纠缠度差值。

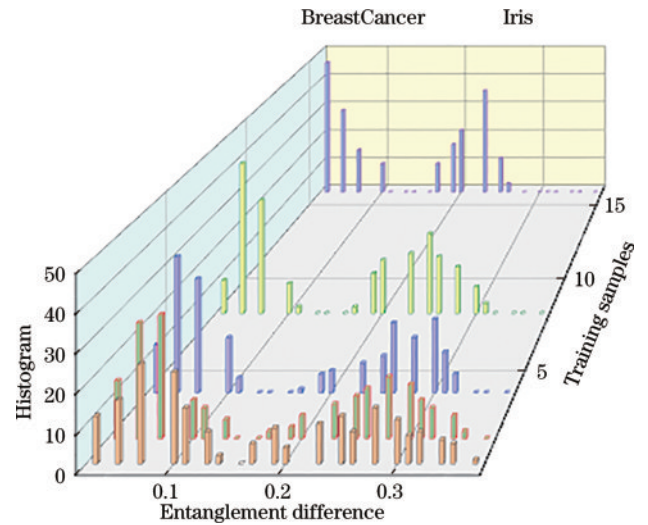


图 7 紧凑型和非紧凑型 swap-test 分类器之间的纠缠度差值  
Fig. 7 Entanglement difference between compact and non-compact swap-test classifiers

由图 7 可以看出,在样本大小相同的情况下,紧凑型分类器的纠缠度始终低于非紧凑型,二者的纠缠度差值总是正的,也可以说明紧凑型分类器在纠缠方面更节省资源。

对两类数据集分别取个数为 1、2、4、8、16 的数据,并计算每个集合的纠缠度差值,使用平均值进行统计描述,纠缠度差值会随着数据寄存器量子位数的增加而减少,如图 8 所示。图 8 也表明了 Iris 和 BreastCancer 数据的纠缠度差值与数据量之间的关系,可以看出,随着数据量的增加,纠缠度差值进一步减少。这意味着可以将紧凑型分类器推广到海量数据分类场景。

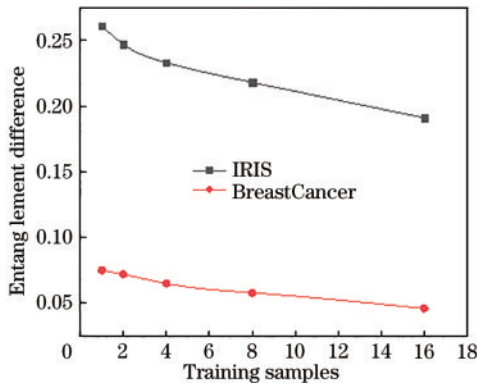


图 8 纠缠度差值与数据量的关系

Fig. 8 Relationship between entanglement difference and data amount

通过对 Iris 和 BreastCancer 数据集分类的纠缠度分析,可以看出紧凑型量子分类器可以用更少的纠缠来完成分类任务。当纠缠度较低时,可以找到一个更少纠缠操作的近似。但是,状态准备工作中的近似误差会影响决策边界的分类。在 NISQ 时代,由于近似而引起的分类误差小于由于硬件缺陷和退相干而引起的分类误差,那么通过减少纠缠度来降低状态准备的复杂性将是十分有益的。

## 5 结 论

提出了一种基于紧凑型振幅编码和多项式核函数的量子分类器,其量子电路尺寸小于现有的基于核方法的量子分类器,可以作为 NISQ 时代的潜在应用。引入的多项式核函数使非线性数据的分类速率以及准确率都有一定的提升,对之后设计更复杂的核函数具有重要意义。紧凑型振幅编码技术将每个类中的一个训练数据点编码为一个计算基态的概率振幅的实部和虚部,由于训练数据的标签信息是隐式编码,因此不需要按照以前方法中的要求使用单独的量子寄存器来显式地编码标签信息。标签寄存器的去除进一步将以前方法中所要求的双量子位测量方案改为单量子位测量。此外,还证明了紧凑型分类器在电路参数方面达到了最优方差,可以进一步节省整个状态准备工作的开销。实验结果表明,该分类器模型的期望值更接近理论值,且分类迭代速率与分类精度也优于已有分类器。最后,相比于已有分类器,紧凑型量子分类器具有较低的纠缠度,可以进一步优化状态准备工作。

## 参 考 文 献

- [1] Schuld M, Sinayskiy I, Petruccione F. An introduction to quantum machine learning[J]. Contemporary Physics, 2015, 56(2): 172-185.
- [2] 侯伟, 王继芬, 何欣龙. 基于支持向量机建模的重质矿物油光谱模式识别[J]. 激光与光电子学进展, 2021, 58(6): 0630001.  
Hou W, Wang J F, He X L. Spectral pattern recognition of heavy mineral oil using support vector machine modeling[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2021, 58(6): 0630001.
- [3] 张彬, 万生鹏, 张思军, 等. 基于支持向量机的室内定位系统研究[J]. 激光与光电子学进展, 2022, 59(16): 1615005.  
Zhang B, Wan S P, Zhang S J, et al. Indoor positioning system based on support vector machine[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2022, 59(16): 1615005.
- [4] Schuld M. Supervised quantum machine learning models are kernel methods[EB/OL]. (2021-01-26)[2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2101.11020>.
- [5] Schuld M, Killoran N. Quantum machine learning in feature Hilbert spaces[J]. Physical Review Letters, 2019, 122(4): 040504.
- [6] Havlíček V, Córcoles A D, Temme K, et al. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces[J]. Nature, 2019, 567(7747): 209-212.
- [7] Liu Y C, Arunachalam S, Temme K. A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning [J]. Nature Physics, 2021, 17(9): 1013-1017.
- [8] Hubregtsen T, Wierichs D, Gil-Fuster E, et al. Training quantum embedding kernels on near-term quantum computers[EB/OL]. (2021-05-05)[2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2105.02276>.
- [9] Glick J R, Gujarati T P, Córcoles A D, et al. Covariant quantum kernels for data with group structure[EB/OL]. (2021-05-07)[2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2105.03406>.
- [10] Huang H Y, Broughton M, Mohseni M, et al. Power of data in quantum machine learning[J]. Nature Communications, 2021, 12: 2631.
- [11] Schuld M, Fingerhuth M, Petruccione F. Implementing a distance-based classifier with a quantum interference circuit[J]. EPL (Europhysics Letters), 2017, 119(6): 60002.
- [12] Blank C, Park D K, Rhee J K K, et al. Quantum classifier with tailored quantum kernel[J]. Npj Quantum Information, 2020, 6(1): 1-7.
- [13] Buhrman H, Cleve R, Watrous J, et al. Quantum fingerprinting[J]. Physical Review Letters, 2001, 87(16): 167902.
- [14] Park D K, Blank C, Petruccione F. The theory of the quantum kernel-based binary classifier[J]. Physics Letters A, 2020, 384(21): 126422.
- [15] Liu J G, Wang L. Differentiable learning of quantum circuit born machines[J]. Physical Review A, 2018, 98(6): 062324.
- [16] Lloyd S, Schuld M, Ijaz A, et al. Quantum embeddings for machine learning[EB/OL]. (2020-01-10) [2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2001.03622>.



- [17] Barenco A, Bennett C H, Cleve R, et al. Elementary gates for quantum computation[J]. *Physical Review. A, Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 1995, 52(5): 3457-3467.
- [18] Park D K, Sinayskiy I, Fingerhuth M, et al. Parallel quantum trajectories via forking for sampling without redundancy[J]. *New Journal of Physics*, 2019, 21(8): 083024.
- [19] Dheeru D, Casey G. UCI machine learning repository [DB/OL]. (2017)[2022-11-09]. <http://archive.ics.uci.edu>.
- [20] Gundlapalli P, Lee J Y. Deterministic, scalable, and entanglement efficient initialization of arbitrary quantum states[EB/OL]. (2021-10-26)[2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2110.13454v1>.
- [21] Mora C E, Briegel H J. Algorithmic complexity and entanglement of quantum states[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95(20): 200503.
- [22] Mora C E, Briegel H J. Algorithmic complexity of quantum states[J]. *International Journal of Quantum Information*, 2006, 4(4): 715-737.
- [23] Araujo I F, Blank C, Silva A J D. Entanglement as a complexity measure for quantum state preparation[EB/OL]. (2021-11-04)[2022-11-09]. <https://arxiv.org/abs/2111.03132>.
- [24] Meyer D A, Wallach N R. Global entanglement in multiparticle systems[J]. *Journal of Mathematical Physics*, 2002, 43(9): 4273-4278.