arXiv:2302.14822v1 [q-bio.NC] 7 Feb 2023

概念量子模型的形式化与学习

Sean Tull、Razin A. Shaikh、Sara Sabrina Zemljič 和 Stephen Clark Quantinuum，英国牛津 Beaumont Street 17 号{sean.tull,razin.shaikh,sara.zemljic,steve.clark}@quantinuum.com

2023年3月1日

摘要

本文介绍一种基于量子理论的全新概念建模框架，并展示如何从数据中自动学习概念表征。本研究的一项贡献是对该框架进行了全面的范畴论形式化。我们认为，运用范畴论，尤其是使用弦图描述量子过程，有助于阐明我们采用量子方法进行概念建模时最重要的一些特征。我们的方法建立在 G¨ardenfors 的经典 *conceptualspaces*框架之上；在该框架中，认知通过凸空间以几何方式建模，而凸空间又可分解为称作*domains*的更简单空间。我们展示了如何从简单形状的图像中学习来自 SHAPE、 COLOUR、SIZE 和 POSITION 这些域的概念，其中各个图像表示为量子态，概念表示为量子效应。概念由一个经训练用于执行概念分类的经典-量子混合网络学习：经典图像处理由卷积神经网络完成，量子表征则由参数化量子电路生成。我们还使用丢弃来生成混合效应，进而学习仅适用于部分域的概念，并展示如何利用纠缠（结合丢弃）来捕捉跨域中有趣的相关性。最后，我们探讨在 G¨ardenfors 的意义上，我们的概念量子模型能否被视为概念空间。

1 引言

概念研究在多个相关领域中有着悠久的历史，包括哲学、语言学、心理学和认知科学（Murphy，2002年；Margolis & Laurence，2015年）。近年来，研究人员开始探讨如何

运用量子理论中的数学工具对认知现象进行建模，其中包括概念结构。在心理学和认知科学中广泛运用量子形式主义，催生了一个新兴领域——量子认知（Aerts，2009年；Pothos & Busemeyer，2013年）。其理念是，量子理论的某些特征（如纠缠）可以用来解释一些难以通过经典方法建模的心理数据。例如，受试者回答问题时出现的顺序效应（Trueblood & Busemeyer，2011年）以及概念组合（Aerts & Gabora，2005年；Tomas & Sylvie，2015年）。[1]

概念研究的另一项最新进展，是将机器学习应用于这样一个问题：人工智能体如何从原始感知数据中自动学习概念（Higgins 等，2017年、2018年；Shaikh 等，2022）。赋予智能体概念表征，并从其所处环境中自动学习这些表征，其动机在于，这将使智能体能够在该环境中更有效地推理和行动，类似于人类使用概念的方式（Lake 等，2017年）。一种期待是，明确使用概念能够缓解当前人工智能所用神经架构的“黑箱”特性带来的一些负面影响。

本报告提出一种基于量子理论所用数学形式体系的概念新建模框架，并展示如何从数据中自动学习概念表征。本研究的一项贡献，是对我们的框架进行了全面的范畴论形式化，遵循 Bolt 等人（2019年）和 Tull（2021）的做法。概念模型的形式化并非新鲜事（Ganter 和 Obiedkov，2016年），但我们认为，运用范畴论（Fong，2019年），尤其是运用弦图描述量子过程（Coecke 和 Kissinger，2017年），有助于阐明我们以量子方法进行概念建模的一些最重要特征。这一方面也契合了近期将范畴论引入机器学习乃至更广泛的人工智能领域的趋势。其动机是通过范畴论的组合性视角审视深度学习模型，使深度学习减少临时拼凑和对启发式方法的依赖（Shiebler 等人，2021年）。

Murphy（2002年，第1页）将概念描述为“将我们的心理世界凝聚在一起的黏合剂”。但是，应如何对概念进行数学建模与表示？文献中存在许多建模框架，包括经典理论（Margolis & Laurence，2022年）、原型理论（Rosch，1973年）以及理论理论（Gopnik & Meltzoff，1997年）。本文在G¨ardenfors 的概念空间框架（G¨ardenfors，2004年，2014年）基础上展开研究。在该框架中，认知通过使用凸空间进行几何建模，而凸空间又可以根据称为域的更简单空间进行因子分解。我们展示了如何从简单形状的图像中学习来自 SHAPE、 COLOUR、 SIZE 和 POSITION 域的概念，其中单个图像表示为量子态，概念表示为量子效应。概念空间的因子分解通过将张量积用作

[1]请注意，此类研究（包括本报告）通常并不声称大脑中存在量子过程，而只是指出，某些认知过程可以在抽象层面上借助量子形式主义进行有效模型化。

幺半群积，在我们的模型中得到了自然表示。我们还展示了如何使用丢弃（其会产生混合效应），以处理待学习概念仅适用于部分域的情况；以及如何结合使用纠缠与丢弃来捕捉跨域相关性。

我们选择采用一种混合经典—量子网络来实现我们的建模框架，并对其进行训练以执行概念分类；其中，经典图像处理由卷积神经网络完成（Goodfellow 等，2016，第9章），量子表征则由参数化量子电路生成（Benedetti 等，2019）。尽管我们在抽象层面描述了该框架，不依赖任何特定实现，但我们设想的应用场景是，模型最终将在量子计算机上运行，以利用这类计算机可能带来的潜在优势。这里的实现是对量子计算的经典模拟。[2]

本报告自然承接了我们此前的工作（Shaikh 等，2022）；在那项工作中，我们介绍了如何调整用于学习概念的变分自编码器（VAE）框架（Higgins 等，2017；Kingma 和 Welling，2014），使得诸如红色 这样的概念能够在因子化域上明确表示为高斯分布。我们还简要介绍了如何运用范畴论和弦图的工具对该模型进行形式化。本工作的不同之处在于，尽管仍使用 Spriteworld 形状作为数据（Watters et al., 2019），但它大幅偏离了概率变分自编码器学习范式，将概念表示为量子效应，而非高斯分布。本报告还对这些模型进行了详尽得多的理论探讨。

将量子理论的形式体系应用于概念建模，有哪些主要理由？首先，它为概念空间的凸结构提供了一种别具趣味的替代数学结构（见第 8 节）。其次，这种结构具备适合用于概念建模的特性，例如用纠缠捕捉相关性，用偏序捕捉概念层级。[3] 第三，使用张量积来组合域，会产生不同于概念学习中通常采用的机器学习模型（即使用直和作为幺半群积，并通过非线性来捕捉特征间相互作用的神经网络）（Havlicek 等，2019；Schuld 和 Killoran，2019）。量子机器学习领域仍在探索这种方法可能带来的优势，尤其是未来大型容错量子计算机问世后；但无论最坏还是最好，种种可能性都令人着迷，甚至可能带来变革。

这项研究具有高度跨学科的性质，因此可能吸引

[2]请注意，对于本报告中实现的特定模型集合，我们并未声称其具有“量子优势”（Preskill, 2012）。不过，我们确实预见到，符合我们框架的概念量子模型可能需要量子硬件才能高效训练和部署，尤其是在我们扩展到更贴近现实的数据集和更大型的量子电路时。[3]第 6 节介绍纠缠；实验中偏序的应用留待未来工作。

多种不同的读者群体，包括对以下主题感兴趣的研究人员：概念形式化，以及范畴论在人工智能和认知科学中的应用；如何运用量子形式主义对概念建模；用于概念建模的概念空间替代方案；如何从数据中自动学习概念的显式模型；以及量子机器学习在人工智能和认知科学问题中的应用。我们指出，我们的目标是探究运用量子形式主义如何有望帮助概念建模与学习，而不是对心理学实验室的数据建模；最终目标是构建更有效的人工智能体。因此，与量子认知相比，这项研究或许更适合归入新兴的量子人工智能领域，尽管它与后者显然存在关联。

报告其余部分的结构如下。第 2 节介绍概念空间的形式化。这部分内容适合对概念空间理论感兴趣的研究者。第 3 节随后介绍其余形式化工作所依赖的范畴框架，并列举一些示例范畴。本节及接下来的三节尤其适合将范畴论应用于人工智能和认知科学问题的研究者，以及对概念空间形式化感兴趣的研究者。第 4 节根据迄今介绍的范畴特征定义概念模型，并举例说明一些经典概念模型。第 5 节介绍量子过程范畴，并以此定义我们的概念量子模型；第 6 节则展示如何利用量子理论的一项特殊特征——纠缠——来表征相关概念。第 7 节是报告的实验部分，展示如何利用经过训练以执行概念分类的混合网络，在实践中学习量子概念。本节尤其适合使用机器学习从数据中学习概念表征的研究者。第 8 节回到 G¨ardenfors，探讨我们定义的量子模型是否符合概念空间意义上的凸性；这部分内容同样适合从事概念空间理论研究的学者。最后，第 9 节总结全文，并介绍一些可能的未来工作。

2 概念空间的形式化

G¨ardenfors 的概念空间框架（G¨ardenfors，2004年、2014年）对人类和人工认知中的概念推理进行建模。在该方法中，认知通过凸空间以几何方式描述，而凸空间又可分解为称为域的更基本空间。示例包括 COLOUR、 TASTE 和 SOUND的域，以及 POWER或 AGENCY等更抽象的域。G¨ardenfors 框架的一个核心主张是，应将概念表示为空间中的凸区域。更一般而言，可以将分级概念或“模糊”概念建模为空间上定义的适当正函数。

概念空间框架已通过多种方式形式化（Aisbett 和 Gibbon，2001年；Rickard 等人，2007年；Lewis 和 Lawry，2016年；Bechberger 和 K¨uhnberger，2017年）。本文借鉴 Tull （ 2021 ）对模糊概念的处理，该处理建立在 Bolt 等人（ 2019 年）的范畴论方法之上。

定义 1. 凸空间 是一个集合 Z ，配备了允许我们按如下方式取元素的凸组合的运算。也就是说，对于所有 z_1、.....、 $z_n \in Z$和 p_1、.....、 $p_n \in [0,1]$ ，满足 $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$，存在一个属于 Z 的元素，记作

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \cdot z_i$$

这些凸组合满足人们预期的规则；例如，求和项的顺序无关紧要，权重为 0 的元素不会影响求和结果，而组合的组合通过权重相乘来计算。关于精确定义，请参阅 Bolt 等人（2019年）。此外，我们在此要求 Z 构成一个可测空间，这意味着它配备了一个由可测子集 $M \subseteq Z$构成的 σ-代数 Σ_Z 。

定义 2. 概念空间 是一个凸空间 Z ，它是若干凸空间的乘积的一个子集：

$$Z \subseteq Z_1 \times \cdots \times Z_n$$

这里，乘积配备了逐元素的凸运算。请注意，特别是，任何单个因子 Z_i 本身都可以视为一个概念空间。

我们将概念空间中的一个元素 $z = (z_1, \ldots\ldots, z_n) \in Z$称为实例 ，沿用 Clark 等人（2021年）的术语。具体而言，每个 z_i 都是因子 Z_i的实例。

概念空间框架中有两种因子 Z_i 。概念空间通常可在较高层次上表示为若干域的乘积，例如 COLOUR 或 SOUND的域。其次，每个域通常描述为若干维度的乘积或乘积的子集，这些维度提供描述该域的坐标，但在认知上无法彼此分离。例如， SOUND 域可用不可分离的维度 PITCH 和 VOLUME来描述。这里，我们简单地使用中性术语“因子”来统称维度或域。

接下来，我们来考察概念本身。

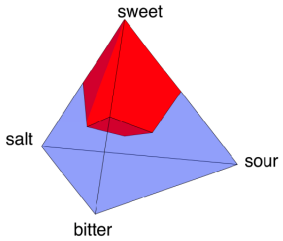
定义 3。 概念空间 Z 中的清晰概念 是一个可测子集$C \subseteq Z$ ，并且是凸的，也就是说，它在凸组合下封闭。当$z \in C$ 时，我们称 z 为C 的实例。[4]

凸性是指，位于某一概念两个实例“之间”的任意点，也会构成该概念的一个实例。G¨ardenfors（2004年）根据认知实验为凸性提供了依据，其中包括来自颜色空间划分的证据，以及关于凸区域相对容易学习的证据。

[4]这与以下事实一致：如果 z 是概念 $C \subseteq Z$ 的一个实例，那么它也是凸空间 C 的一个实例，而该凸空间本身被视为一个概念空间。

例 1. 任意凸子集 $Z \subseteq \mathbb{R}^d$ 都能构成一个概念空间，只需将Σ_Z取为勒贝格可测子集。因此，任意凸子集 $Z_i \subseteq \mathbb{R}^{d_i}$ 的乘积 $Z = Z_1 \times \cdots \times Z_n$也能构成一个概念空间。

例 2. 域的一个简单例子是下方所示的 TASTE 单纯形（引自 Bolt 等人（2019 年））。它构成 $\mathbb{R}^3$ 的一个凸子集，由极端点 甜、苦、咸和酸生成。以红色突出显示的是一个凸区域，它描述了关于甜的一个清晰概念。



根据定义，对于一个清晰概念，每个点 z 要么是该概念的实例，要么不是。然而，更一般地考虑那些 C具有等级性或“模糊性”的概念是很自然的，因此隶属度可以取 0 和 1 之间的任何值 $C（z）$。该值 $C（z）$表示 z 作为该概念实例的程度，其中 0 表示该概念完全不满足，1 表示该概念得到完美满足。隶属函数应当以适当的意义尊重现有的凸结构，例如以下由作者之一在 Tull（2021）中提出的定义。

定义 4. Z 的一个模糊概念是一个可测函数 $C\colon Z \to [0,1]$，它是对数凹的，这意味着

$$C(p \cdot z + (1-p) \cdot z') \geq C(z)^p C(z')^{1-p} \tag{1}$$

对于所有 z、$z' \in Z$和 $p \in [0,1]$。模糊概念 C的典型实例 是一个点 z，满足 $C(z) = \max_{w \in Z} C(w)$。

概念 C 的典型实例总是构成 Z的一个清晰概念；反过来，任何清晰概念 $P \subseteq Z$ 都可通过其示性函数 $C = 1_P$构成模糊概念的一个特例。

对数凹性条件 (1) 已在 Tull（2021年，定理 8）中得到充分论证。简言之，该条件给出了满足 G¨ardenfors 所提出的自然标准“拟凹性”的最一般的模糊概念定义；这一标准确保，符合某个概念达到任意给定程度的实例集合始终构成一个凸集。该定义还涵盖清晰概念和高斯分布这两个特例（Higgins 等，2017年；Shaikh 等，2022年），并允许构造乘积概念，如下所示。

示例 3. 任意模糊概念的乘积

$$C(z) = \prod_{i=1}^{n} C_i(z_i) \tag{2}$$

在因子 $Z_1, \ldots, Z_n$ 上构成任意凸子集 $Z \subseteq Z_1 \times$上的模糊概念 $\cdots \times Z_n$。

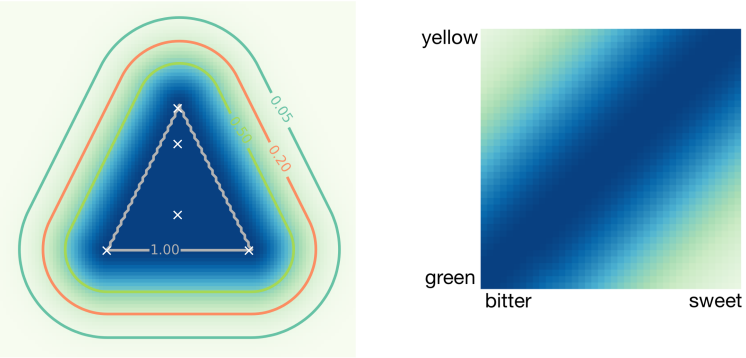
例4。 我们可以根据任意均值为 μ 、协方差矩阵为 Σ 的多元高斯分布，在 $Z = \mathbb{R}^n$ 上定义一个模糊概念:

$$C(z; \mu, \Sigma) = e^{-\frac{1}{2}(z-\mu)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(z-\mu)} \tag{3}$$

$$= e^{\sum_{i=1}^{n} -\frac{1}{2\sigma_i^2}(z_i-\mu_i)^2} \tag{4}$$

在第二行中，我们将情况限定为 Σ 为对角矩阵，且第 i 个对角元素为 σ_i^2。在这种情况下， C 表示为一维高斯分布的乘积$C_i(z_i; \mu_i, \sigma_i^2)$，如式（2）所示。

例5。 我们给出一些来自 Tull（2021）的模糊概念简单示例。左图展示了定义在 $\mathbb{R}^2$ 上的一个模糊概念。我们根据一组样例（白色叉号）构造凸闭包，得到清晰概念 P，其由内部三角形表示。接着，我们定义模糊概念 $C(x) = e^{-\frac{1}{2\sigma^2}d(x,\ P)^2}$，其中$d_H(x,\ P) = \inf_{p \in P} d(x,\ p)$，且 P 中的每个点都是典型的。得益于拟凹性，对于任意 t，满足 $C(x) \geq t$ 的点集 x 都是凸集，如 $t = 1.00$，0。20，0。05 所示。



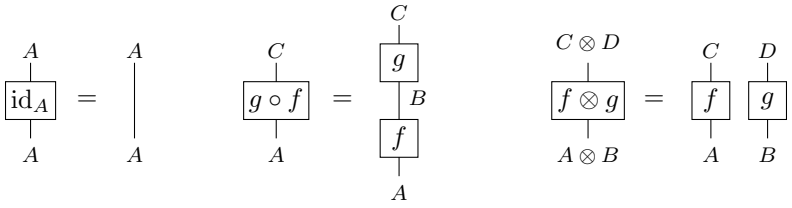
右侧展示了一个体现域之间相关性的类似示例，改编自 Bolt 等人（2019年）。我们考虑一个简单的食物概念空间，将其表示为域的乘积 $F = \text{COLOUR} \times \text{TASTE}$。模糊概念“香蕉”及其典型实例（黄色，甜，）（绿色，苦） $\in F$ 绘制在子集 [绿色、黄色] $\times$ [苦、甜] $\subseteq F$上。

现在，我们的目标是将这些来自概念空间理论的基本概念提升到超越凸空间的场景中，并利用它们构建概念量子模型。为此，我们将用范畴论的通用语言重新表述这些概念，从而以一种有原则的方式，将概念从经典场景迁移到量子场景。

3 范畴论设置

在全文中，我们都在一个对称幺半范畴 $(\mathbf{C}, \otimes, I)$ 中进行讨论。回顾一下，幺半范畴由一类对象 $A, B, C \ldots$ 以及态射 f 组成： $A \to B$ 它们之间存在态射。我们可以依次复合态射 $f, g \mapsto g \circ f$，也可以通过 $A, B \mapsto A \otimes B$ 和 $f, g \mapsto f \otimes g$ 并行组合对象和态射。

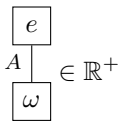
幺半范畴最好借助其图形演算 来理解（Selinger，2010）：对象表示为带标签的线，态射表示为方框，图示在此处从底部向顶部读取。恒等态射与复合的表示如下。



幺半单位 I （上的恒等态射）表示为空图。因此，形如 $\omega\colon I \to A$ 的态射称为 A的态，绘制时没有输入；而形如 $e\colon A \to I$ 的态射称为 A的效应，没有输出，如下所示。



形如 $s\colon I \to I$、具有“无输入或输出”的态射称为标量。在此处关注的范畴中，标量将对应正实数 $s \in \mathbb{R}^+$，尤其常对应概率 $p \in [0,1]$。在这样的范畴中，将任意效应与一个态复合，都会得到一个正实标量。

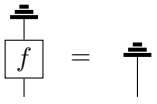


我们将考虑具有更多附加结构的范畴。首先，每个对象都配有一个称为丢弃的特定效应：

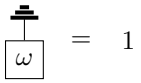


我们将其解释为“丢弃系统”，其中 $_I = 1$。

当态射 f 保留丢弃时，我们称其为信道，即满足以下条件。

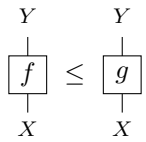


特别地，当态 ω 满足以下条件时，我们称其为归一化的：



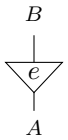
因此可以验证，任意信道 f 与归一化态 ω复合后，都会得到一个归一化态 $f \circ \omega$。

我们的范畴还会附带一种额外的序关系 结构，它使任何给定类型的态射集合成为一个偏序集，因此我们可以有：

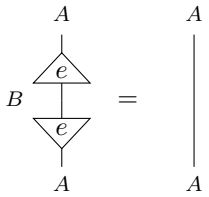


标量 $s \leq t$ 上的序关系取 $\mathbb{R}^+$中的通常序关系。此外，复合保序，因此若 $f \leq g$，则对所有态射 h，有 $h \circ f \leq h \circ g$、 $f \circ h \leq g \circ h$ 和$f \otimes h \leq g \otimes h$。

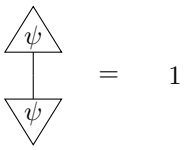
最后，我们的范畴还会附带一种结构，使我们能够“将一个对象包含在更大的对象中”，例如通过 $C \hookrightarrow Z$将区域 C 包含到更大的空间Z 中。为此，我们假设存在一个由信道构成的特定子范畴，称为嵌入。将 A 嵌入 B 的嵌入 e 可用一个三角形表示：



每个嵌入都对应一个唯一的态射 $e^\dagger$: $B \to A$，称为它的投影，其图示方式是将 e 的图上下翻转。嵌入与投影共同满足：



一种特殊情况是，当 e 是一个同构 $A \simeq B$，并且我们另外有 $e \circ e^\dagger = \mathrm{id}$。另一种特殊情况是从 $A = I$出发的嵌入，按照定义，它由一个归一化态 ψ 和一个满足以下条件的效应 $\psi^\dagger$ 组成：



我们将这样的态或效应称为点。[5]

现在让我们来认识两个主要的经典范畴示例：纯粹的经典概率论（有两种形式），以及概念空间理论中使用的凸空间。

3.1 示例：经典情境

下面是一个简单的离散经典情境。

示例 6. 在范畴**Class** 中，对象是有限集，态射$M\colon\ X \to Y$是‘$X \times Y$-矩阵’（$M(y,\ x)$）$_{x\in X,\ y\in Y}$其取值属于 $\mathbb{R}^+$。复合由矩阵乘法给出：

$$(N \circ M)(z,x) := \sum_{y\in Y} N(z,y)M(y,x)$$

X 上的恒等态射由 $\mathsf{id}(y,\ x) = \delta_{x,\ y}$给出。

张量在对象上的定义为 $X \otimes Y = X \times Y$，在态射上的定义为矩阵的克罗内克积。幺半单位是单元素集合 $I = \{\star\}$，标量为 $\mathbb{R}^+$。因此，我们可以将 X 的态 ω 和效应 e 分别等同于函数 $X \to \mathbb{R}^+$，通过 $\omega(x) := \omega(x,\ \star)$和 $e(x) := e(\star,\ x)$来表示。特别是，正如先前所承诺的，标量对应于正实数 $s \in \mathbb{R}^+$。丢弃效应$_X$ 由$(x) = 1$ 给出，适用于所有$x \in X$。

我们可以通过该范畴中的信道来描述离散概率理论。首先，根据定义，X 的态 ω 经过归一化，当且仅当它描述了定义在 X 上的概率分布：

$$\sum_{x\in X} \omega(x) = 1$$

更一般地，态射 $M\colon X \to Y$ 是信道，当且仅当它将每个 $x \in X$ 映射为 Y 上经过归一化的分布；也就是说：

$$\sum_{y\in Y} M(y,x) = 1$$

对每个 $x \in X$ 都成立，或者等价地，该矩阵是随机矩阵。因此，M 可视为从 X 到 Y 的“概率过程”，将每个 x 映射为 Y 上的概率分布$M(x)$。态射上的偏序 $\leq$ 是由 $\mathbb{R}^+$ 诱导的逐元素序关系。

对象 X 的点恰好是 $x \in X$ 的点分布 δ_x，其中 $\delta_x(y)$ 在 $y = x$ 时为 $= 1$，否则为 0。

最后，嵌入 $X \hookrightarrow Y$ 由子集 $X \subseteq Y$的包含映射给出，该映射为 $x \mapsto \delta_x$。其投影 $Y \to X$ 在 $y \in X$ 时由 $y \mapsto \delta_y$ 给出，否则为 $y \mapsto 0$。

[5]稍后我们会将实例定义为点的特殊情形。在量子模型中，由于纠缠，实例与点并不相同；但在经典情形中二者一致。

我们可以将此示例推广到离散情形之外，以如下方式描述一般的（测度论）概率论。

例7. 在范畴 **Prob** 中，对象是可测空间 (X, Σ_X)，由集合 X 及其可测子集 Σ_X 构成的 σ-代数组成。态射 $f\colon X \to Y$ 是一个马尔可夫（次）核，它是一个函数，将每个 $x \in X$ 映射到 Y 上的次概率测度 $f(x)$。此外，这种赋值还必须在适当意义下是"可测的"；参见例如（Panangaden，1998年；Cho 和 Jacobs，2019年）。

$f\colon X \to Y$ 与 $g\colon Y \to Z$ 的复合由积分给出：

$$(g \circ f)(x, A) := \int_{y \in Y} g(y, A) df(x)(y)$$

对于每个 $x \in X, A \in \Sigma_Z$。X 上的恒等态射将每个 x 映射到点测度 δ_x，其中 $\delta_x(A) = 1$ 当且仅当 $x \in A$。我们令 $X \otimes Y = X \times Y$，其中 I 为单元素集合，并定义 $f \otimes g$ 将每一对 (x, y) 映射到测度 $f(x)$ 和 $g(y)$ 的乘积测度 $f(x) \otimes g(y)$。

X 的态可以视为 X 上的次概率测度 ω，而效应 e 对应于可测函数：

$$e\colon X \to [0, 1]$$

标量 $I \to I$ 则对应概率 $p \in [0, 1]$。特别地，将一个态与一个效应复合可得到期望值：



$$= \int_{x \in X} e(x) d\omega(x) \in \mathbb{R}^+ \tag{5}$$

与之前一样，对于所有 $x \in X$，$_X$ 由 $x \mapsto 1$ 给出。归一化态对应于 X 上的概率测度 ω，而态射 $f\colon X \to Y$ 是信道，当且仅当它将每个 $x \in X$ 映射为实际的归一化概率测度。我们通过以下方式对态射 $X \to Y$ 排序

$$f \leq g \iff f(x, A) \leq g(x, A) \quad \forall x \in X, A \in \Sigma_Y$$

嵌入 $X \hookrightarrow Y$ 是通过 $x \mapsto \delta_x$ 对一个子集 $X \subseteq Y$ 的包含映射，其中 $x \in X$，投影 $Y \to X$ 在 $y \in X$ 时由 $y \mapsto \delta_y$ 给出，否则由 $y \mapsto 0$ 给出。

3.2 示例：凸空间

我们可以将之前的例子限制为一个用于研究概念空间的范畴化框架。

例8。 范畴 **ConSp**（Tull，2021年）的定义与 **Prob** 相同，只是对象 X, Y 现在是凸空间，而态射 $f\colon X \to Y$ 则是满足以下条件的（子）核：它们是对数凹的，

$$f(px + (1-p)y, pA + (1-p)B) \geq f(x, A)^p f(y, B)^{1-p} \tag{6}$$

对所有 $p \in [0,1], x, y \in X$ 和 $A, B \in \Sigma_Y$ 均成立。

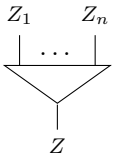
这里，$X \otimes Y = X \times Y$ 是凸空间的乘积，并采用逐元素的凸运算。具体而言，Z 的归一化态由定义在 Z 上的对数凹概率测度 ω 给出，而效应则对应于对数凹可测函数 $C\colon Z \to [0,1]$，即模糊概念。信道的对数凹条件（6）源于这样一个事实：它提供了构造幺半范畴的最一般方式，使该范畴包含所有此类作为效应的模糊概念；关于完整推导，我们仍请读者参见 Tull（2021）。

4 范畴概念模型

现在来看看，我们此前讨论的概念空间理论中的各项特征，如何在范畴层面加以描述。我们在一般范畴 $\mathbf{C}$ 中进行研究，其结构如第 3 节所述。

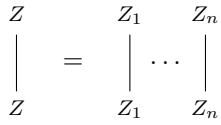
首先，采用幺半范畴的表述，使我们能够直接描述概念空间中出现的因子 Z_i 及其复合。单个因子 Z_i 可以简单地描述为$\mathbf{C}$中的一个对象，而概念空间的对应概念如下。

定义 5。一个概念模型[6] 由一个对象 Z 以及一个带索引的对象集合 Z_1，……，Z_n给出，该集合称为因子，并配有一个嵌入



将 Z 嵌入到 $Z_1 \otimes \cdots \otimes Z_n$中。

为简便起见，我们通常用对象 Z来指称一个模型，而将因子和嵌入省略不提。嵌入通常实际上是一个同构$Z \simeq Z_1 \otimes \cdots \otimes Z_n$，将 Z表示为各因子的乘积。在这种情况下，我们会在图中省略该同构，而只绘制



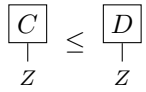
接下来，我们将考察模型的概念和实例的基本概念。

定义 6. 模型 Z 的概念 C 是 Z上的一个效应：



[6]此后，我们使用“模型”这一通用术语，而不使用“空间”，因为概念模型可以在不具有任何空间特征的范畴中定义。

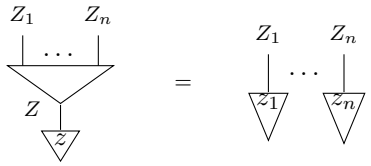
态射上的偏序意味着 Z 上的概念自动具有偏序，我们将其解释为



(7)

即表示概念 D 比 C“更一般”。

定义 7。 模型的一个实例 是 Z 中的一个点，它是在嵌入上由各点构成乘积的点，即：

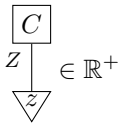


(8)

对于 Z_i中的点 z_i 。

注 1。 因子分解性质 (8) 推广了这样一个事实：在概念空间中，每个实例 $z = (z_1, \ldots, z_n)$ 都可以分解为各因子 Z_i上一个实例 z_i的乘积。事实上，在我们的经典模型中，每个点都自动满足这一性质；但我们将会看到，在量子理论中，存在一些不是实例的点。

得益于 **C**中标量的结构，将概念 C 与任意输入态复合都会得到一个正实标量。特别地，将 C 作用于一个实例 z 会得到

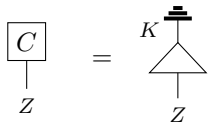


我们将其解释为指定该实例与概念的契合程度。与之前一样，当对于所有实例 w， $C \circ w \leq C \circ z$ 时，我们称实例 z 是概念 C 的典型 实例。注意，只要 $C \leq D$ ，对于所有实例 z，我们都有 $C(z) \leq D(z)$。

备注 2。 在我们的每个示例范畴中，通常可将一般的归一化态 ρ解释为关于 Z 的实例的不确定性态，例如 **Class**中的有限概率分布。标量 $C \circ \rho \in \mathbb{R}^+$ 同样可以解释为度量概念 C 与这一不确定输入 ρ的契合程度。

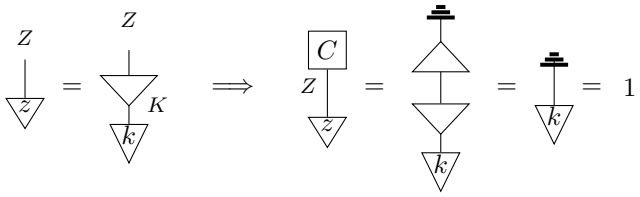
我们还需要确定哪些概念可视为清晰。

定义 8。 当概念 C 在 Z 上具有以下形式时，它是清晰 的



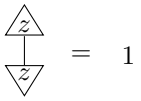
对于某个投影态射 $Z \to K$。

直观地说，我们可以将清晰概念与 K 等同起来（更准确地说，是来自 K 的嵌入和投影）。确实，对于通过嵌入 K 中某个点而给出的 Z 的任意实例 z，我们都有 $C(z) = 1$:



反过来，在我们的示例范畴中，z 的点具有上述形式，当且仅当 $C(z) = 1$。因此，我们可以将 K 与 C的典型实例对应起来。

作为清晰概念的一种特殊情况，我们可以将 Z 的每个点（尤其是每个实例）z 视为通过其投影 $z^{\dagger}$定义了一个清晰概念。我们将这样的概念称为 Z的纯概念。我们将 $z^{\dagger}$ 视为“最为清晰”的概念，它挑选出单个点 z，满足



4.1 示例

让我们在每个用于引入的“经典”范畴中，逐一展开这些范畴定义。

示例 9. Class 中的概念模型恰好是一个有限集 Z，给定为一个子集 $Z \subseteq Z_1 \times \cdots \times Z_n$。概念是任意函数 $C\colon Z \to \mathbb{R}^+$，并按逐点关系排序。实例是一个元素 $z \in Z$；由于总有某个 $z_i \in Z_i$使得 $z = (z_1, \ldots, z_n)$，因此 (8) 自动成立。将概念 C应用于实例z，即计算函数值 $C(z) \in \mathbb{R}^+$。清晰概念对应于任意子集 $K \subseteq Z$，更确切地说，对应于这些子集的示性函数 $1_K\colon Z \to \{0, 1\}$。纯概念是实例 $z \in Z$ 的示性函数 1_z。

示例 10. 在**Prob**中，模型是可测空间的一个可测子集 $Z \subseteq Z_1 \times \cdots \times Z_n$。概念是任意可测函数 $C\colon Z \to [0, 1]$，实例是点 $z \in Z$（由这些点定义的点测度），清晰概念 1_K 对应于任意可测子集$K \subseteq Z$，而纯概念对应于点 $z \in Z$。

在范畴**ConSp** 中，我们的定义恰好得出了第 2 节中形式化的概念空间框架。

示例 11。 ConSp 中的模型正是一个概念空间，即被视为凸空间的凸子集 $Z \subseteq Z_1 \times \cdots \times Z_n$的凸空间 Z_i。实例仍然是点 $z \in Z$。清晰概念正是定义 3 中的概念，即凸可测子集 $K \subseteq Z$的示性函数 1_K，而纯概念则是点 $z \in Z$的示性函数 1_z。更一般的概念是模糊概念（对数凹可测映射）$C\colon Z \to [0, 1]$ 其含义见定义 4。

5 量子模型

现在，我们可以受概念空间框架的启发，定义概念的量子模型。为此，我们将简单地在量子过程范畴中展开第4节中的定义；我们首先介绍该范畴。

例 12. 在范畴 **Quant** 中，对象是有限维希尔伯特空间 $\mathcal{H}, \mathcal{K} \ldots$，态射 $f\colon \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ 是完全正 (CP) 映射

$$f\colon L(\mathcal{H}) \to L(\mathcal{K})$$

其中 $L(\mathcal{H})$ 表示 $\mathcal{H}$ 上线性算子的空间。回顾一下，这种映射是线性的，并且是正的，也就是说，每当 $a \in L(\mathcal{H})$ 是正算子时，$f(a)$ 也是正算子。完全正意味着，对于任意 $\mathcal{H}'$，$f \otimes \mathrm{id}_{\mathcal{H}'}$ 都是正的。我们通过以下关系为态射规定序：当且仅当 $g - f$ 是正映射时，$f \leq g$。

张量积 $\otimes$ 是希尔伯特空间与线性映射的通常张量积，其中 $I = \mathbb{C}$。特别地，效应 $e\colon \mathcal{H} \to I$ 是正线性泛函

$$e\colon L(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$$

我们可以通过 $e(b) = \mathrm{Tr}(a \circ b)$ 将其与正算子 $a \in L(\mathcal{H})$ 等同起来。标量如预期为 $r \in \mathbb{R}^+$。

丢弃由 $(a) = \mathrm{Tr}(a)$ 给出的 对应于恒等算子 $\mathrm{id}_{\mathcal{H}}$。态射 f 是信道，当且仅当它是完全正且保迹（CPTP）映射；对于所有 $a \in L(\mathcal{H})$，都有 $\mathrm{Tr}(f(a)) = \mathrm{Tr}(a)$。

$\mathcal{H}$ 的态可通过正算子 $\rho \in L(\mathcal{H})$，借助 $\rho = \rho(1)$ 加以识别。态 ρ 只有在其定义密度矩阵时才是归一化的，其中 $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$——这就是通常意义下的量子态。

一类特殊的线性映射是纯CP映射 f 诱导的 $L(\mathcal{H}) \to L(\mathcal{K})$，定义为

$$\hat{f}(a) = f \circ a \circ f^\dagger$$

包括态和效应在内的非纯态射称为 混合。$\mathcal{H}$ 上的任何同构若同时也是一个信道，事实上都是纯的，并且由矩阵 $U \in L(\mathcal{H})$ 诱导，该矩阵是 酉算子，这意味着它可逆，且其厄米共轭是其逆：$U^\dagger = U^{-1}$。

嵌入态射是由包含映射 i：将子空间 $\mathcal{K} \hookrightarrow \mathcal{H}$嵌入 $\mathcal{H}$所诱导的纯映射。相应的投影是由线性映射 $i^\dagger$：$\mathcal{H} \to \mathcal{K}$ 诱导的纯映射，其中对于 $\psi \in \mathcal{K}$，$i^\dagger(\psi) = \psi$；对于与 $\mathcal{K}$正交的子空间 $\psi \in \mathcal{K}^\perp$，$i^\dagger(\psi) = 0$。

具体而言，$\mathcal{H}$ 中的一个点在形式上是希尔伯特空间 $\mathbb{C} \hookrightarrow \mathcal{H}$ 的包含映射，它可以被视为某个单位向量$\psi \in \mathcal{H}$对应的纯量子态 $|\psi\rangle\langle\psi|$。[7]

[7]这里我们采用标准的“左矢-右矢”记号，将 $\mathcal{H}$ 上的向量和线性泛函分别写成 $|\psi\rangle$和 $\langle\phi|$ 的形式。那么，对于单位向量 $\psi \in \mathcal{H}$，$|\psi\rangle\langle\psi|$ 就是 $\mathcal{H}$上相应纯态的密度算符。

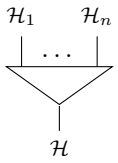
现在，利用我们对概念空间的范畴论表述，便可得到量子模型的概念。

定义 9。 量子概念模型 是 Quant 中的概念模型。

因此，量子概念模型由一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 给出，该空间被视为张量积的子空间

$$\mathcal{H} \subseteq \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$$

若干希尔伯特空间的 $\mathcal{H}_1$，.....， $\mathcal{H}_n$，这些空间称为因子，其中包含映射表示为



量子概念正是一个量子效应，即一个正算子$C \in L(\mathcal{H})$。概念通过以下关系排序: $C \leq D$ 当且仅当 $D - C$ 为正，或者等价地

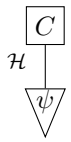
$$C \leq D \iff D = C + E \text{ for some concept } E$$

这里， $+$ 表示算子的加法，可解释为算子的"粗粒化"（不同于叠加，后者由 $\mathcal{H}$ 中的向量加法描述）。量子模型的一个实例恰好是一个纯态 $|\psi\rangle\langle\psi|$, ，由单位向量 $\psi \in \mathcal{H}$给出，并且进一步分解为

$$\psi = \psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_n$$

对于单位向量 $\psi_i \in \mathcal{H}_i$。根据定义，一个实例因此在每个因子 $\mathcal{H}_i$上都有一个定义良好的纯态值 ψ_i 。

请注意，我们只允许（某些）纯态作为实例，而混合态射ρ 可以解释为纯态（例如实例）的不确定性态（即概率混合）。相比之下，我们允许概念为混合态射或纯态。由正算子 C 给出的量子概念作用于实例 ψ 时，结果为

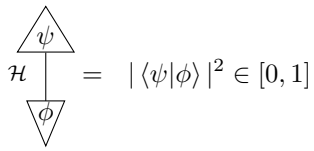


$$= \langle\psi| C |\psi\rangle \in \mathbb{R}^+$$

更一般地，将 C 作用于任意（可能是混合态射的）态 ρ ，会得到标量 $\text{Tr}(C\rho) \in \mathbb{R}^+$, 可解释为 C 与系综 ρ的匹配程度。

清晰概念对应于子空间 $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$。更准确地说，任何此类子空间都通过投影算子 $P = 1_{\mathcal{K}}$ 定义一个清晰概念，其中对于 $\mathcal{K}$ 中的 ψ， $P(\psi) = \psi$；对于 $\mathcal{K}^{\perp}$中的 ψ， $P(\psi) = 0$。

纯量子概念恰好是那些自身作为效应也是纯的清晰量子概念。对于这些概念，$\mathcal{K}$ 由一个一维子空间$\langle\psi\rangle$ 给出，该子空间由某个单位向量 $\psi \in \mathcal{H}$张成。因此，纯量子概念对于这样的单位向量而言，具有 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 的形式，并在实例 ϕ 上由下式给出：



$$= \quad |\langle\psi|\phi\rangle|^2 \in [0,1]$$

并以纯态 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 作为其唯一原型。反过来，每个单位向量 ψ 都以这种方式给出一个纯概念 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 。

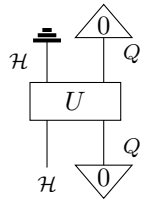
注 3. 请注意，在我们的每个例子中，清晰概念都对应于（通过嵌入）恰当「结构化」的子集：在 **Class** 中是所有子集，在 **Prob** 中是可测子集，在 **ConSp** 中是凸子集，而在**Quant** 中是线性子空间。

注 4. 虽然我们将量子概念定义为任意正算子，但特别值得关注的是那些次归一化效应 e，即$e \leq$，或者等价地，作为算子时满足 $0 \leq e \leq \mathrm{id}_{\mathcal{H}}$。这些概念作用于任意归一化态 ρ 时，都会产生一个概率 $e \circ \rho \in [0,1]$。特别是，作为概念，它们总会将任意实例映射到 $[0,1]$中的一个值。

有人可能会认为，与概念空间中的模糊概念一样，任何概念都应具有这一性质，因此要求所有概念都次归一化。在我们的框架中，只需将范畴 **C** 替换为由满足$\circ f \leq$ 的子信道 f构成的子范畴 $\mathbf{C}_{\mathrm{sc}}$，即可轻松实现这一点。在**Quant**的情形下，这意味着在迹不增 CP 映射的子范畴中进行研究。

不过，有一点需要注意：在 **Quant** 中，由于实例是纯态的子集，因此可能存在这样的量子效应：它们不是次归一化的，却仍将所有实例映射为 $[0,1]$。后文将讨论的未归一化贝尔效应 **(11)** 就是一个例子。因此，在该框架中，我们不将概念限制为次正规概念。

然而，从操作层面来看，次归一化效应 e 正是可作为一般量子测量（称为正算子值测量（*POVM*））的某个测量结果而产生的效应。更具体地说，可以先将量子比特 $Q = \mathbb{C}^2$ 制备为纯态 $|0\rangle$，对两个系统施加（不唯一的）酉算子 U，然后后选择 测量结果 $\langle 0|$，同时丢弃 $\mathcal{H}$，从而实现 e：



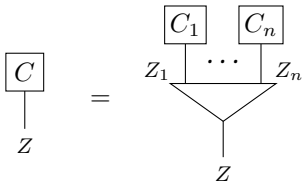
(9)

请注意，每个清晰量子概念都以这种方式次归一化。任意量子概念的形式为 $e = r \cdot e'$，其中 e' 是次归一化的，而 $r \in \mathbb{R}^+$ 是一个正缩放因子。

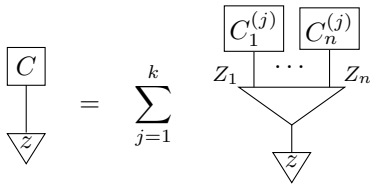
6 纠缠概念

我们的量子模型具有一个使其区别于经典模型的特征：存在纯粹的 纠缠的 概念。

定义 10。 如果存在作用于因子 $Z_1, \dots Z_n$ 上的效应 $C_1, \dots, C_n$，使得概念 C 为乘积 概念，则称概念 C 为乘积概念。



如果概念 C 在实例上的取值等于乘积概念的某个凸混合所给出的值，则称其为可分离 。也就是说，存在乘积概念$C^{(1)}, \dots, C^{(k)}$，使得



(10)

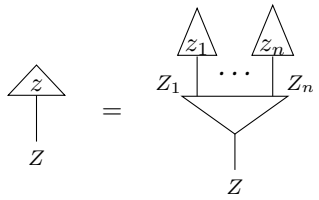
对于所有实例 z均成立，其中求和是在 $\mathbb{R}^+$中进行的。如果概念 C 不可分离，则称其为纠缠的。

直观而言，乘积概念是将各个因子分别处理的概念，由作用于各因子的独立概念来描述。可分概念则将这一概念加以推广，允许通过对若干乘积概念求和来进行“粗粒化”。纠缠概念描述的是因子之间的相关性，而这些相关性无法用任何此类乘积概念的经典组合来解释。

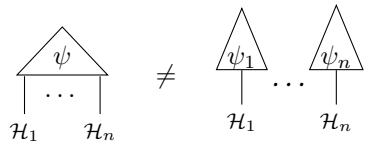
我们的每一种经典范畴 **Class**、**Prob** 和 **ConSp** 都包含乘积概念以及可分（但非乘积）概念。当概念编码了因子之间的相关性时，它就无法构成乘积；这类概念由函数 C on Z 给出，而该函数无法写成对任意 $C_1, \dots, C_n$均成立的 $C(z) = C_1(z_1) \dots C_n(z_n)$ 形式。事实上，在 **Class** 中，每个概念都是可分的。**Prob** 和 **ConSp** 中的可分性将在备注 5 中进一步讨论。

然而，从定义中可以看出，这些类别不包含任何纯纠缠概念。事实上，它们具有一个共同性质：模型中的每个点

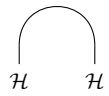
都构成一个实例 $z = (z_1, \ldots, z_n)$。因此， Z 上的每个纯概念 $z^\dagger$ 都是一个乘积概念：



相比之下，量子模型包含纠缠的概念和纯纠缠的概念。考虑一个量子模型 $\mathcal{H} \subseteq \mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$ 以及任意一个通常意义下的纠缠单位向量$\psi \in \mathcal{H}$，即不等于张量积$\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_n$的向量。那么，点 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 不是该模型的实例，而 $\mathcal{H}$ 所对应的纯概念是纠缠的：



例13。 考虑一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，其标准正交基为 $\{|i\rangle\}_{i=1}^n$。在 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ 上的一个（最大）纠缠纯概念的例子是所谓的贝尔效应，如图所示：



(11)

它是由向量 $\sum_{i=0}^{n-1} |ii\rangle$诱导的效应，其中求和表示叠加，即 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$中的加法。明确地说，贝尔效应具有如下算子

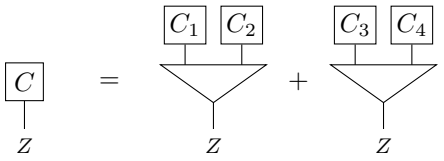
$$\sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{n} |i, i\rangle \langle j, j|$$

6.1 纠缠概念与经典相关概念

为了探讨相关概念和纠缠概念的用途，我们来考虑这样一种情形：我们有一个模型 Z，以及给定的一组实例 $z_1, \ldots, z_n$，它们对应于纯乘积概念 $z_1^\dagger, \ldots, z_n^\dagger$。我们将探讨如何在主要的示例范畴中把这些实例组合成一个新概念。

经典组合 在**Class** 和**Quant** 中，我们可以对实例进行“粗粒化”，从而得到一个可分概念。这两个范畴实际上都带有态射上的加法运算 $+$，分别通过矩阵逐元素相加以及

CP映射相加来定义。给定任意一对乘积概念，我们可以将它们相加以得到一个可分概念：



(12)

我们可以将其称为经典组合。更一般地，我们可以用这种方式对任意数量的概念求和。对纯概念 $z_1^\dagger + \cdots + z_n^\dagger$ 求和，会得到一个可分清晰概念；在 **Class** 中，它构成概念偏序 $\leq$ 上的最小上界 $z_1^\dagger \vee \cdots \vee z_n^\dagger$。这被解释为对实例进行粗粒化，或取逻辑"或"。

空间组合 在 **ConSp**中，态射不支持加法，但仍可通过取实例的最小上界 $z_1^\dagger \vee \cdots \vee z_n^\dagger$来组合这些实例。这里的最小上界是通过对这些实例取凸闭包 得到的，也就是包含所有这些实例的最小凸子集。我们将其称为空间组合。

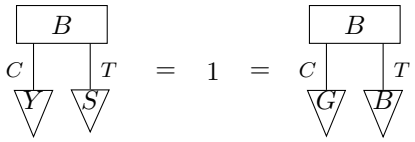
量子组合 在 **Quant** 中，假设实例 $z_1, \ldots, z_n$ 分别对应单位向量 $\psi_1, \ldots, \psi_n$。除了能够构成经典组合 (12) 之外，我们还可以通过形成叠加来构造一个纯纠缠概念 $|\psi\rangle\langle\psi|$:

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} \psi_i \tag{13}$$

其中求和表示在 $\mathcal{H}$ 中进行加法（而非 CP 映射的粗粒化）。我们将任何此类概念称为实例的量子组合 。请注意，这种叠加仅在各项之间的相对相位确定后才得到规定。

为了进行概念建模，理想情况下应理解这些组合方法之间的差异，尤其是可分离的经典组合与**Quant**中的纠缠概念 (13) 之间的差异。为此，我们考虑一个例子。

例14. 考虑模型由两个因子 C, T 分别对应COLOUR 和 TASTE 的情况，并考虑一个像例5中那样与这两个因子都相关联的概念香蕉 。给出两个典型实例：一个黄色（Y）、味甜（S）的香蕉，以及一个绿色（G）、味苦（B）的香蕉。因此，香蕉概念应当是满足以下条件的效应 B：



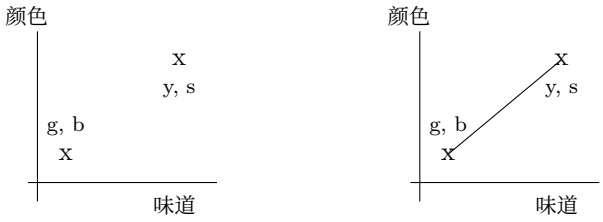
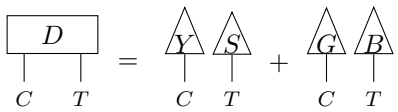


图1：经典组合（左）与空间组合（右）的对比。

为简单起见，我们假设黄色性和绿色性是"正交"的，即$Y^\dagger \circ G = 0$。在**Class** 中，我们可以对这些实例进行经典组合：



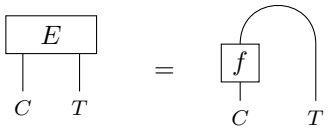
(14)

这会产生一个清晰概念，其唯一的点就是这两个实例，如图1左侧所示。在 **ConSp** 中，这些实例的空间组合则对应于连接图1右侧两个点的直线。在 **Quant** 中，我们可以对这些实例形成经典组合（**14**），也可以形成量子组合 $|\psi\rangle\langle\psi|$，其中：

$$\psi = |Y, S\rangle + |G, B\rangle \in C \otimes T$$

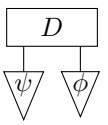
由于 $|Y\rangle$ 和 $|G\rangle$ 正交，上述相等的振幅确保两个实例被认为同样符合该概念。

更一般地，任何满足 $f\colon C \to T$使得 $f(|Y\rangle) = |S\rangle$，$f(|G\rangle) = |B\rangle$ 的线性映射都定义了一个合适的纠缠概念：



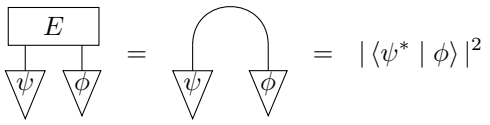
情形 $E = \psi^\dagger$ 对应于对所有与$|Y\rangle$，$|G\rangle$正交的向量 ϕ 设置 $f(\phi) = 0$。

为了比较量子模型中的经典组合和量子组合，考虑以下情形：$C = T = \mathbb{C}^2$、$|Y\rangle = |S\rangle = |0\rangle$ 和 $|G\rangle = |B\rangle = |1\rangle$。经典组合 D 如式（**14**）所示，对实例的作用如下：



$$= \ |\langle 0|\psi\rangle|^2 |\langle 0|\phi\rangle|^2 + |\langle 1|\psi\rangle|^2 |\langle 1|\phi\rangle|^2$$

我们可以将量子组合 E 视为贝尔效应（**11**），它从点 $|00\rangle$、$|11\rangle$“推广”为因子之间的结构关系，其中



$$= \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n} \langle \psi \mid i,i\rangle \langle j,j \mid \phi\rangle$$

其中，ψ^* 表示相对于基 $|0\rangle$而言的 ψ 的共轭，$|1\rangle$。

概念 D和 E都以示例 $|Y\rangle|S\rangle = |0,\ 0\rangle$、$|G\rangle|B\rangle = |1,\ 1\rangle$作为典型实例，并将它们映射为 **1**。然而，经典组合D 只是将任何输入与这两个实例进行比较，不再考虑其他典型实例。因此，$|0\rangle$ 与 $|1\rangle$之间每个空间的结构都丢失了，正交态 $|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$ 被一视同仁，而$D(|+\rangle \otimes |-\rangle) = \frac{1}{2}$。

相比之下，量子组合 E 可以被视为编码了域之间的结构关系。任何形如 $|\phi^*\rangle \otimes |\phi\rangle$ 的实例——我们可以将其理解为位于这些范例“之间”（对左因子取共轭）的实例——都将构成一个典型实例。相反，（共轭）正交实例将不符合该概念，例如 $E(|+\rangle \otimes |-\rangle) = 0$。

在上述示例中，我们看到，纠缠概念可以编码因子之间的关系，而不只是（加权的）范例集合。事实上，我们看到，因子 C, T 上的任意纯纠缠概念都对应于一个纯线性映射 $f\colon\ C \to T$，该映射描述了实例在这些因子上的行为之间的关系。

我们可以将这样的线性映射理解为从这两个实例推广得到的因子之间的结构关系，它类似于概念空间之间的仿射（保持凸性的）函数。因此，对于某个仿射函数 $f\colon\ C \to T$（定义在概念空间之间），该概念类似于形如 $\{(x, f(x)) \mid x \in C\}$ 的概念。从这个意义上说，这样的量子组合构成了概念空间上概念的空间组合的对应物。

总之，量子模型能够在纯概念内部存储因子之间的结构化相关性。在量子计算机上的实现中（下一节将对此进行探讨），制备纯态和效应可能比制备混合态更“便宜”，从而能够高效地表征相关性。我们的结论是，在概念空间的量子类比中，纠缠应能为概念编码因子之间的关系提供一种有效方式。

备注 5. 为了处理**Prob** 和**ConSp**中非纯概念的纠缠，可分性的概念应从有限情形推广到连续

情形，即用适当的积分替换式（10）中的有限求和。根据此定义，**Prob** 中的每个概念都应保持可分离。未来，探究概念空间模型中是否存在某种形式的纠缠，将会很有意义。

7 实验

本节将展示如何在实践中学习第 5 节和第 6 节所述的量子概念模型。正如引言中提到的，我们的理论框架是在抽象层面上描述的，不依赖任何特定实现。不过，我们设想的应用场景是最终在量子计算机上运行这些模型。在这里，我们采用经典模拟，通过解析计算测量的期望值（而非通过采样进行近似）。核心思路是使用概率分类器，将概念实现为一种效应，由该（二元）分类器学习区分与相关概念对应的正例和负例。[8]

我们还将介绍实验中使用的数据集，以及混合网络所采用的架构，包括经典神经网络部分和参数化量子电路部分；随后分析我们的模型，包括展示模型作为概念分类器的表现，以及量子特征（如纠缠和混合性）如何用于捕捉跨域相关性[9] 并舍弃特定域。由于我们使用混合网络进行分类，本节的实验工作也可视为新兴量子机器学习领域的一部分（Schuld et al., 2020）。

7.1 形状数据集

我们使用 Spriteworld 软件（Watters et al., 2019）生成简单图像，这些图像由特定大小、位于二维框中特定位置的彩色形状组成。对于主数据集，共有三种形状：{正方形、三角形、圆形}；三种颜色：{红色、绿色、蓝色}；三种大小：{小、中等、大}；以及三个位置：{底部、中心、顶部}。此处的 COLOUR 属性指色相，饱和度和亮度则随机变化。位置相对于垂直维度而言，水平位置固定在中心。背景颜色始终相同。

图 2 展示了一些形状示例。这些示例很好地展现了生成数据的底层概念所固有的模糊性和多样性。例如，红色正方形的红色程度偏向橙色一端（与颜色更深的红色圆形相比）

[8]将词义视为概率分类器的观点曾出现在计算语言学文献中（Kennington & Schlangen, 2015）。从经典机器学习的角度来看，我们的分类器与“最近质心”分类器有相似之处；近期已有研究在量子场景中探讨了这种分类器（Johri et al., 2021）。[9]在本节中，我们将这些因子 SHAPE、 SIZE、 COLOUR 和 POSITION 称为“域”，这与概念空间框架中的表述一致。

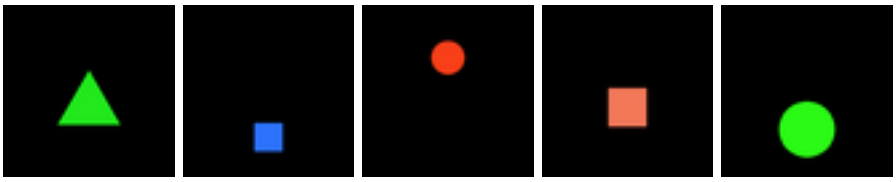


图 2：形状示例，从左到右：（绿色、大、三角形、中心）；（蓝色、小、正方形、底部）；（红色、中等、圆形、顶部）；（红色、中等、正方形、中心）；（绿色、大、圆形、底部）。

，而中等大小的圆形在大小上与小蓝色正方形相近。附录 A 列出了用于 Spriteworld 软件生成主数据集的参数（与 Shaikh 等人（2022）使用的参数相同）。这些参数为每种原子标签（除 SHAPE 外，其取值为离散值）指定了一个取值范围。给定由 4 个均匀采样的输入标签组成的元组后，会从相应范围中均匀采样，得到用于生成某个实例的具体取值。我们运行采样器生成了一个包含 3,000 个实例的训练集，以及分别包含 300 个实例的开发集和测试集。

7.2 混合网络

输入图像首先由卷积神经网络（CNN）（Goodfellow 等，2016，第 9 章）处理，该网络会输出经典参数，并将其馈入参数化量子电路（PQC）（Benedetti 等，2019）。我们将这个 PQC 称为编码器参数化量子电路；它实现量子态 z，该量子态是模型中图像的表征。给定一个概念 C，另一个概念参数化量子电路 会实现与 C 对应的量子效应，可将其应用于实例 z，如第 4 节和第 5 节所述。我们假设模型已知模型在域 $\mathcal{H}_1$、……、$\mathcal{H}_n$ 上的因子分解方式；在我们的实验中，这些域为四个域 SHAPE、 COLOUR、 SIZE、 POSITION。[10] 整体设置如图 3 所示，其中细线表示经典数据，每条粗线表示由若干量子比特构成的希尔伯特空间。

给定一幅输入图像以及编码某个概念的参数，电路运行一次便会输出“是”或“否”，以判断该概念是否适用于这幅图像。每种结果的概率可以通过在物理设备上对电路进行多次采样，或在模拟中直接计算得出。根据各个概念对应的概率，便可对输入图像进行分类，确定哪个概念最适合它。

具体而言，每个实例 z 都是一个纯量子态，它由将图像 X 输入卷积神经网络，再将得到的参数用于编码器而生成。

[10]关于如何在经典情境下自动学习这些域，以及是否能够做到这一点，目前仍存在争论（Higgins 等，2017；Locatello 等，2019；Brehmer 等，2022）。

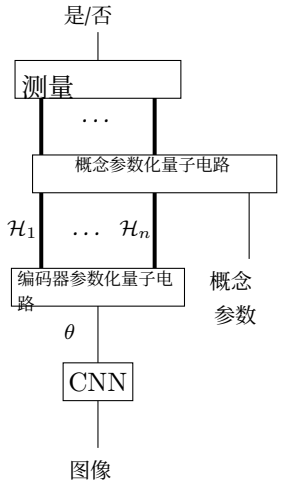
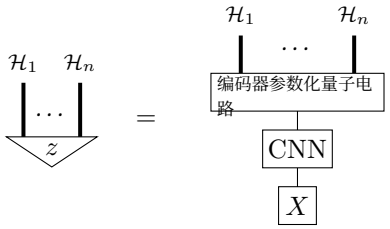
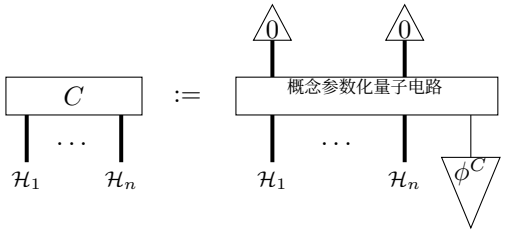


图 3：卷积神经网络为编码器参数化量子电路生成经典参数，该电路制备出一个态，并将其输入概念参数化量子电路。

参数化量子电路网络：



每个具体概念 C 都可以理解为一种测量，其结果分为“是”和“否”两种；“是”表示该实例被判定为符合该概念。该测量通过对每个量子比特进行 Pauli-Z 测量实现；如果每个量子比特单独测得的结果均为 0，则整体结果为“是”，其余所有结果均标记为“否”。用图表示如下：



(15)

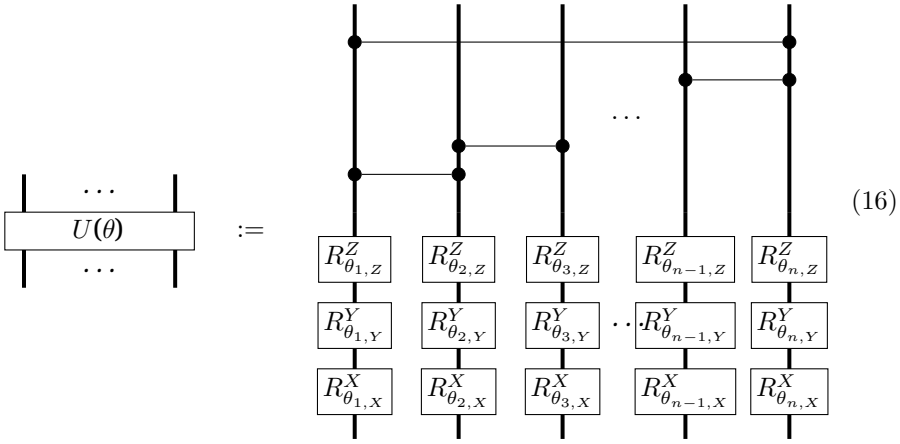
其中 ϕ^C 是对概念 C进行编码的参数。每个概念 C 都可以是纯态或混合态，具体取决于概念参数化量子电路采用的是纯态电路还是混合电路；我们将在下一小节讨论这一点。

对于实例 z，该概念得到“是”的概率为 $C \circ z \in [0,1]$。由于所有实验都在模拟中进行，因此无需从模型中采样即可精确计算这一概率。

7.2.1 卷积神经网络和参数化量子电路

图像处理采用与 Shaikh 等人（2022年）相同的卷积神经网络，该网络由 4 个卷积层和一个全连接层组成。Shaikh 等人（2022年）使用卷积神经网络预测多元高斯分布的均值和方差，而本文中，卷积神经网络预测的是编码器参数化量子电路的参数。整个网络（包括预测参数的最后一层）均使用 ReLU 激活函数。附录 B 详细介绍了实验中使用的卷积神经网络架构，包括各种超参数选择。

参数化量子电路采用下方所示的参数化电路拟设，该拟设定义在任意有限数量的量子比特上。拟设 $U(\theta)$ 通过对每个量子比特施加参数化的 X、Y、Z 旋转，然后使用受控 Z 门将相邻量子比特两两纠缠（另在最外侧的两个量子比特上施加一个门，以完成链式连接）。将该拟设的多个层组合起来，可以构成更复杂的电路。我们以相同方式定义另一个拟设$V(\theta)$，但初始旋转的顺序相反，即 Z、Y、X。一个重要的特殊情形是，当仅作用于单个量子比特时，$U(\theta)$ 就等价于依次施加参数化的 X、Y和 Z 旋转。类似地，$V(\theta)$ 作用于单个量子比特时，旋转顺序为 Z、Y、X。

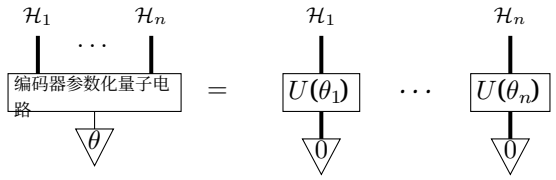


(16)

上述的 $\theta_{j,X}$、$\theta_{j,Y}$、$\theta_{j,Z}$ 是传入 X,Y,Z 的单个参数，这些旋转作用于量子比特 $j = 1,\ldots,n$，且都包含在参数向量 θ 中。事实上，该试探态具有通用性：通过使用足够多层形式为 $U(\theta)$ 的层，可以实现任意酉电路。[11]

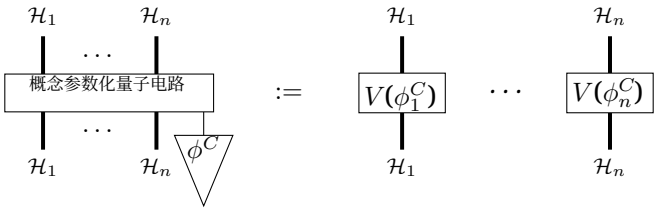
[11]纠缠层是自逆的，因此两个层就能让我们实现一个旋转，作用于

现在，我们来更详细地描述编码器和概念参数化量子电路。每个域 $\mathcal{H}_i$都包含一定数量的量子比特。编码器参数化量子电路的形式如下：



更一般地，我们可以在每个域上组合多个这样的 U 量子电路层。这里的 $|0\rangle$ 态表示每个 $\mathcal{H}_i$上的乘积态 $|0\dots0\rangle$。因此，根据构造，编码器不涉及跨域纠缠，可以视为每个域各有一个独立编码器。由于试探态 U 具有通用性，编码器能够制备任意量子实例。

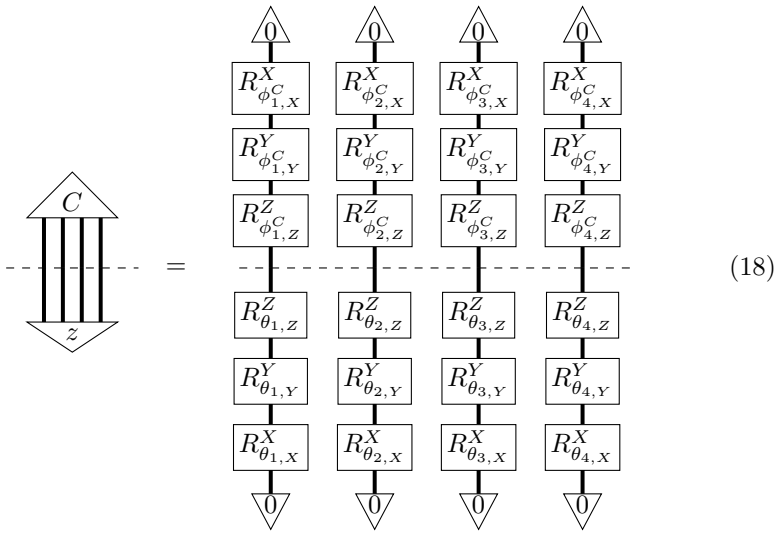
在最初采用的基础设置中（从第7.3节开始），每个域只有一个量子比特 $\mathcal{H}_i$，并且编码器中只使用一层。在这种情况下，编码器仅包含每个量子比特的一次 X，Y 旋转，且不涉及纠缠。在这一基础设置中，概念参数化量子电路同样不涉及纠缠，其形式如下。



(17)

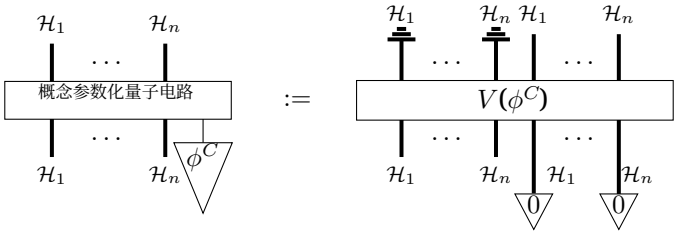
具体而言，在包含四个域且每个域有一个量子比特的设置中，将概念 C 应用于实例 z，相当于下方带有后选择的电路（的概率）；其中 θ 是 CNN 对图像的编码，ϕ^C 是学习得到的概念参数，每条线路代表一个量子比特。

任意量子比特。任意一对量子比特上的交换操作可通过三层实现，由此也可实现任意受控非门。因此，我们可以实现由单量子比特相位门和 Clifford 门构成的通用门集；例如参见 Van de Wetering（2021年）。



(18)

为了表示混合态射和纠缠概念，我们在第7.5节中使用更丰富形式的概念参数化量子电路。通过在所有域上使用完整的试探态 $V(\theta)$ 来实现纠缠。为了引入混合，我们为每个域 $\mathcal{H}_1, \ldots \mathcal{H}_n$准备一个辅助副本，并将其制备为初始态 $|0\rangle$，然后像下方电路所示那样舍弃原始域：



(19)

更一般地，可以在丢弃之前加入多个形如 $V(\theta)$ 的层。请注意，由于该试探态具有通用性，我们可以通过足够多的形如 $V(\theta)$ 的层来实现任意酉算子，从而实现式 (9) 中所述的任意（次归一化）量子概念。

7.2.2 训练与损失

在 Shaikh 等人（2022年）的研究中，经典概念模型是变分自编码器（ Kingma 和 Welling，2014年）的一种变体。变分自编码器是一种由编码器和解码器组成的生成模型。在这里，我们选择训练量子模型执行二元分类；因此，基本模型是仅包含编码器的判别模型。[12]

[12]在下文第7.3.2节中，我们将探讨添加解码器会如何影响实例和概念表示。

该损失函数是用于二元分类的标准二元交叉熵（BCE）损失:

$$\mathrm{BCE}(D,\psi,\phi) = -\frac{1}{N}\sum_i L_i \log C_i(X_i) + (1-L_i)\log(1-C_i(X_i)) \qquad (20)$$

其中， N 是数据的大小。

需要学习的完整参数集合为 $\psi \cup \phi$，其中， ψ 是经典编码器卷积神经网络中的参数集合，而 ϕ 是与 12 个基本概念集合相关联的 PQC 参数集合。 D 是训练数据，由 3,000 个正训练样本（见第 7.1 节）和 3,000 个负例组成。[13] 每个样本 D_i 由一幅图像 X_i、一个概念 C_i和一个标签 L_i组成，其中 L_i 的值为 1 或 0，取决于 C_i 是否适用于 X_i 。 $C(X_i)$ 是概念 C 适用于图像 X_i的概率。每个负例均由一个正例生成，方法是针对每个域随机采样一个不正确的概念；例如，如果正例为（绿色、大、三角形、中心），那么一个负例可以为（蓝色、中等、正方形、底部）。由于在基本模型中，我们实际上是独立学习每个域，因此一个负例在每个域上都不一致。后续模型将使用这些数据的变体（第 7.4、7.5 和 7.6 节描述了这些变体）。

我们将单个域上的概念 C 的 $C(X)$，等同于对相应量子比特执行泡利 Z 测量时获得零态的概率，如前文公式（18）所示。对于没有纠缠的基本模型，公式（20）中的 $\log C_i(X_i)$ 项（其中 C_i 遍历全部 4 个域）就是各域概率对数之和。

该实现基于 Tensorflow Quantum（Abadi 等，2015），整个混合网络——包括量子部分和经典部分——都在图形处理器上通过模拟进行端到端训练。训练进行了 100 个训练轮次（除非另有说明），批大小为 64，并使用了 Adam 优化器。[14]

7.3 实例状态和概念效应

我们使用上文公式（18）所示的电路，在第 7.1 节所述的包含 3,000 张带标签图像的基本数据集上训练了一个量子模型（每个训练轮次还随机抽取 3,000 个负例），并在开发集中的 300 个示例上对其进行了测试。该模型经过训练以执行二元分类，但在测试时，我们为每个域选择对输入图像具有最高适用概率的概念。

分类模型表现近乎完美，准确率在 COLOUR 和 SHAPE 域上达到 100%，在 POSITION 和 SIZE 域上分别达到 99% 和 97%。[15] 这一高准确率也延续到了 300

[13]每个训练轮次都会重新抽取负例，因此严格来说，（负例部分的） D 会随每个训练轮次而变化。[14]每个批次包含 32 张图像，每张图像都对应一个正例和一个负例。[15]训练过程相对稳定，但有时需要运行不止一次（因为

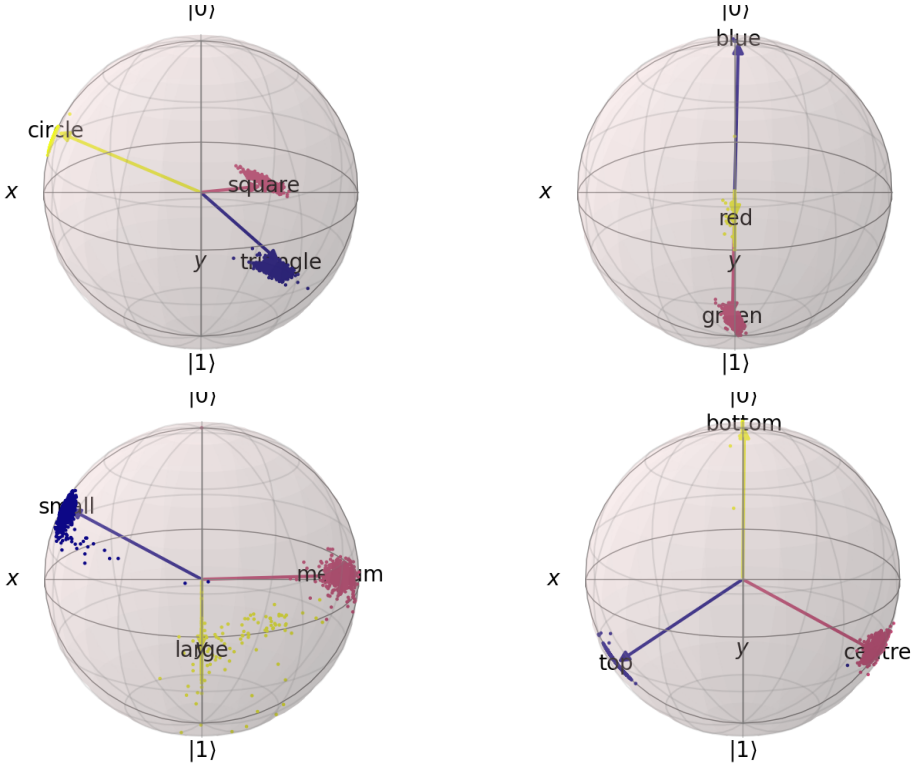


图 4：在布洛赫球上可视化 SHAPE、 COLOUR、 POSITION 和 SIZE 的纯概念效应与实例状态（从左上方开始顺时针排列）。

个测试集样例中，准确率在 COLOUR 和 SHAPE 域上达到 100%，在 POSITION 和 SIZE 域上分别达到 96% 和 97%。

图 4 通过在布洛赫球上绘制相应的纯态，直观展示了 4 个域上 3 个概念各自的纯效应（由于每个域仅使用一个量子比特，且不存在纠缠，因此我们能够对这个基础模型进行可视化）。每个概念周围的点簇对应训练数据中的实例（纯态）。这里展示的是在分类任务上表现如上所述的模型；从不同随机初始化开始训练的模型，其概念和实例在球面上的分布会有所不同，但就概念通常如何彼此分离、实例如何聚集而言，这一可视化具有代表性。请注意，每个域上的 3 个概念彼此分离（ POSITION 域上的情况尤为明显），并且

通过随机参数初始化）来获得一个在开发数据上表现良好的模型。还需注意的是，鉴于我们对数据生成过程的参数化方式， POSITION 和 SIZE 域中的一些示例对于人类来说也很难分类，例如，一些中等大小的形状与某些大形状极为接近。

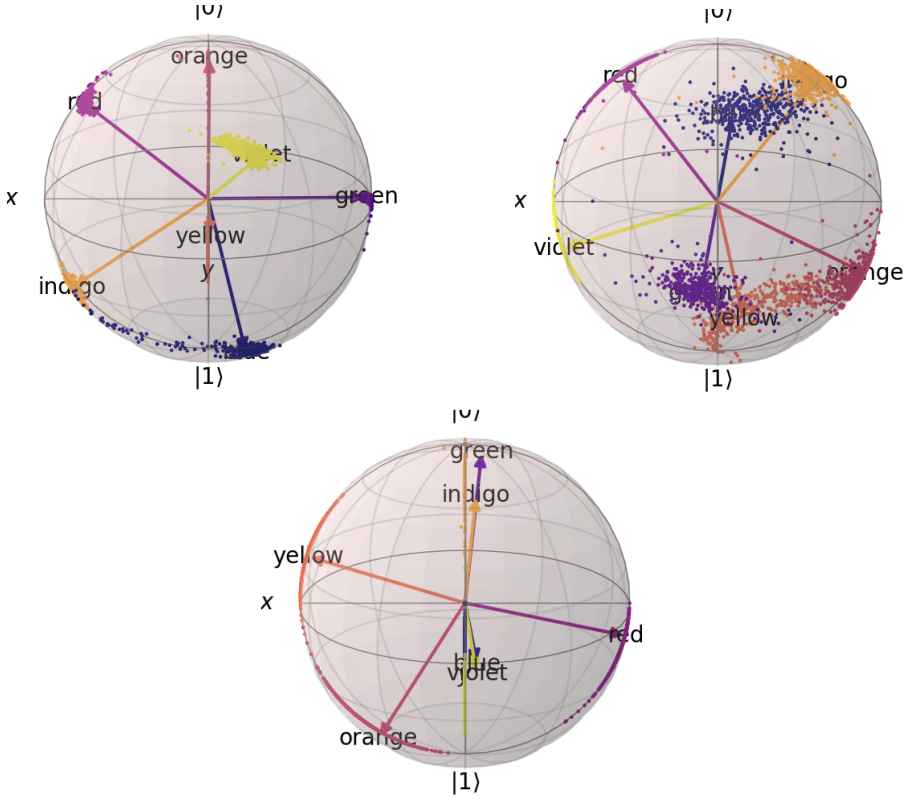


图 5：在彩虹数据集的 COLOUR 域中，对 3 个训练模型的概念效应和实例状态在布洛赫球上的可视化。

概念恰好位于各实例簇的中心。这正是根据式 (20) 中的损失函数所预期的行为。

7.3.1 彩虹数据集

为了进一步测试我们的模型，我们使用 Shaikh 等人（2022）的彩虹数据集进行了分类训练。该数据与基本数据集具有相同的形状、大小和位置，但额外增加了 4 种颜色，从而得到彩虹的 7 种颜色。附录 A.1 包含了用于在 Spriteworld 软件中生成这些额外颜色的参数。该数据集包含用于训练的 3,000 个正例图像，以及按照之前的方法为每个训练周期随机生成的另外 3,000 个负例，并且开发集和测试集各包含 300 个正例。

也许并不意外的是，使用这组数据更难实现清晰的

单个量子比特上不同颜色的分离。[16] 不过，在损失函数（公式 20）中对负例赋予 0.5 的权重，并将训练运行 200 个训练轮次后，我们得到了图 5 所示的布洛赫球周围颜色分布（实例同样取自训练数据）。这三种可视化结果分别对应三个独立训练的模型（即模型参数采用了三种不同的随机初始化）。

从开发数据上的准确率来看，左上方的布洛赫球分类模型在非颜色领域上的得分与之前相近，在 COLOUR 上的总体准确率为 95%，各个颜色的 F1分数介于 91% 到 100% 之间。右上方的布洛赫球对应一个性能相近的模型，用来展示模型之间的差异。底部的示例经过精心挑选，展示了训练如何在布洛赫球上清晰地表示各种颜色：注意黄色、橙色 和红色 实例如何优美地沿着圆形的圆周排列，红色 实例依次过渡到橙色 ，再到黄色。

7.3.2 添加解码器损失

图 4 中可视化结果的一个显著特点是，尽管同一概念的图像存在差异（例如图 2 中红色形状的差异），实例簇却十分“紧密”。然而，鉴于公式 20 中的损失函数，模型选择以这种方式将实例聚类并不令人意外：卷积神经网络的任务是生成角度参数，使某个实例（作为纯态）接近对应的概念（作为纯效应），同时让该实例远离其他不适用于它的概念。

在某些使用场景中，我们可能希望实例的表征能更好地反映底层图像的变化，例如，为了更好地捕捉跨域相关性（见下文第 7.4 节）。为了让实例的分布更加“分散”，我们在损失函数中尝试加入了一个额外的解码器损失：

$$\mathrm{Loss}(D,\psi,\phi,\chi) = \mathrm{BCE}(D,\psi,\phi) + \frac{\lambda}{N}\sum_i \mathrm{SE}(\mathrm{DeCNN}(\chi,\mathrm{CNN}(\psi,X_i)),X_i) \tag{21}$$

解码器是一个反卷积神经网络（DeCNN），其参数为χ，本质上是卷积神经网络的“反向”版本：它以卷积神经网络根据图像 X_i 输出的角度为输入，并输出图像中每个像素的 RGB值。SE 是图像中所有 RGB值的平方误差之和，而 λ 是总损失中的一个加权项。直观来说，为了获得较低的 SE 损失，编码器卷积神经网络必须输出足够有信息量的角度，以便

[16]当然，我们也可以在每个域中使用多个量子比特，以提供更大的希尔伯特空间来表征额外的颜色，但量子比特越多，可视化就越困难。

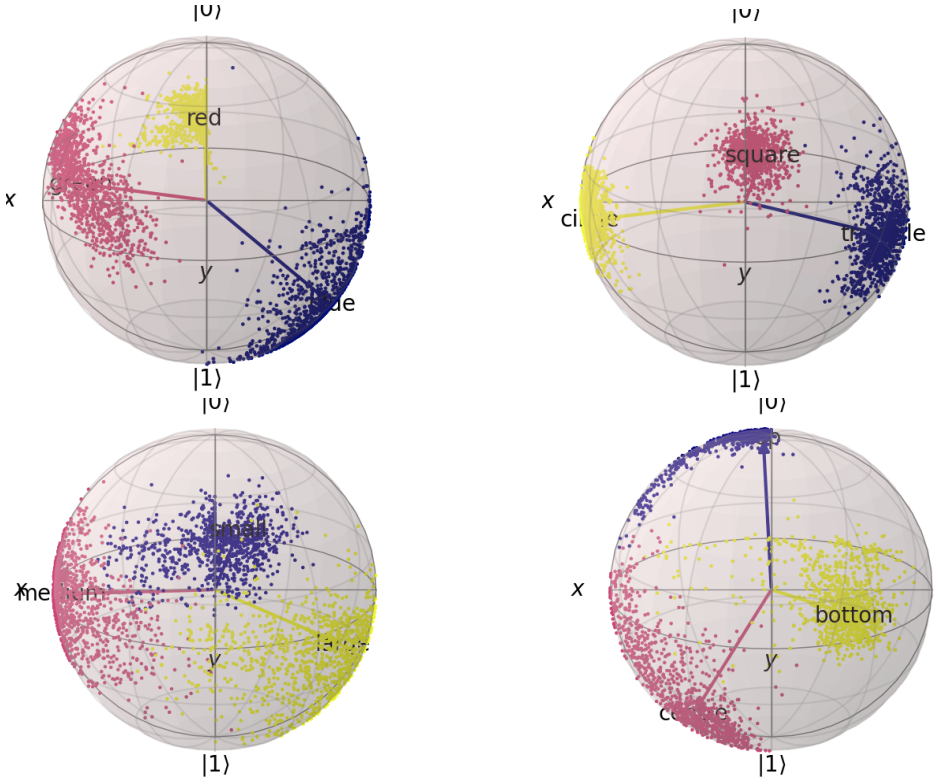


图 6：采用带有额外解码器损失的基本数据集时，所有 4 个领域的概念效应和实例态的可视化结果。

让 DeCNN 准确重建原始图像。这意味着，即便两个形状的红色色调相似但有所不同，例如，卷积神经网络针对 COLOUR 域输出的两个示例的参数化量子电路参数也必须有足够大的差异，才能让 DeCNN 准确重建这两个示例。总体而言，这会使各实例在布洛赫球上分布得更分散，分散程度由 λ 超参数控制。现在，该模型与我们在 Shaikh 等人（2022）中介绍的概念变分自编码器模型相似（尽管不再采用生成模型的解释），因为其损失包含“编码器”和“解码器”两部分。[17]

图 6 展示了使用额外的解码器损失（其中包含 $\lambda = 0.1$）时，实例如何更广泛地分布在布洛赫球周围。该模型在开发数据上作为分类模型仍表现良好，在 $\lambda = 0.1$ 上达到 98%

[17]未来工作的一种可能方向是开发并实现用于概念建模的“量子 VAE”（Khoshaman 等，2018年），并构建一个模型的所有部分均为量子的生成模型。

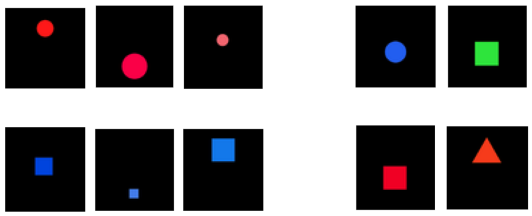


图 7：twike（左侧）和非 twike（右侧）的示例。

准确率，在 SIZE 上为 99%，在 COLOUR 上为 100%，在 SHAPE 上为 98%，在 POSITION 上为 98%。作为对这一方法的定性演示，请注意，中心和 顶部 的实例开始彼此融合（右下方的蓝色和红色实例点），中等 和小 的实例也开始彼此融合（左下方的蓝色和红色实例点），这正是我们对较不离散的表征所预期的结果。

7.4 捕获相关性

这里，我们展示如何利用量子理论的一项典型特征——纠缠，来捕获跨域相关性。为了测试我们的模型能否处理包含相关性的概念，我们定义了一个新概念，称为*twike*，其定义为（红色且圆形）或（蓝色且正方形）（即适用于包含红色圆形或蓝色正方形的图像）。图 7 展示了一些 twike 和非 twike 的示例。

到目前为止，我们考虑的形式如式（17）所示的概念参数化量子电路，无法学习*twike*这一概念，因为各个域是独立处理的，4 个域中的每一个实际上都包含各自独立的概念。为了在概念参数化量子电路的各个域之间建立连接，我们可以采用第 7.2.1 节中的完整试探态 V，其中包含跨越多个域、连接不同线路的受控 Z 门。在第一个实验中，我们假设已知 twike 概念的相关性跨越 SHAPE和 COLOUR 域，并且纠缠门仅连接用于 SHAPE和 COLOUR的量子比特。[18] 我们还假设其余域无关，因此不进行度量，实际上将它们从该概念中舍弃。我们对相关域应用可能包含多层的试探态 V，因此，twike 概念在四个域上的最终形式如图 8 所示，其中 ϕ 是为 twike 概念学习得到的参数。

该模型的训练仅更新概念参数化量子电路的旋转参数；编码器（即卷积神经网络）的参数则保持不变，沿用此前训练基础模型时的参数。与之前一样，损失函数采用二元交叉熵，并使用第 7.1 节中的 3,000 个实例作为训练数据。这些实例中约有 20% 是*twike*的正例，其余为负例。我们使用 2 层旋转和纠缠

[18]这一假　设将在下方的某些实验中放宽　　s 。

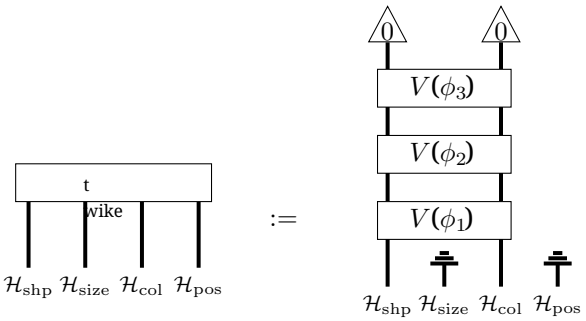


图 8：用于学习*twike*的编码器参数化量子电路，此处展示的是包含 3 层旋转与纠缠 V 试探态。

试探态来构建概念参数化量子电路，并在未见过的测试样本上取得了 100% 的准确率。只有引入纠缠门，我们才能学会*twike* 概念。

结合第 6 节中关于纠缠和经典关联的讨论，我们可以说，twike 概念无需纠缠即可自然地描述为纯概念红色圆形 和蓝色正方形 的经典组合（至少在这些纯效应彼此正交的情况下）。然而，这类相关性并不总能在许多传统经典模型中直接实现。以基于变分自编码器的概念模型为例（Higgins 等，2017；Shaikh 等，2022），可以利用多元高斯分布的协方差矩阵来捕捉相关性，该多元高斯分布用于表示概念。然而，这类研究中的一个标准假设是使用协方差矩阵为对角矩阵的多元高斯分布（因此不存在跨域相关性）。能否像本文这样，利用 Shaikh 等人（2022）的概念变分自编码器轻松地对*twike* 这类概念进行建模，则留待未来工作探讨。

与这些经典模型不同，量子模型通过纠缠，能够以相对直接的方式学习相关概念，即使将范围限制在纯效应内也是如此。

未来工作中的另一个问题是，我们的模型能否捕捉跨域的连续关联。对于*twike* 而言，这种关联之所以是“离散的”，是因为 SHAPE 域的离散值与 COLOUR 域的离散值之间存在很强的相关性。一个连续相关概念的例子是：形状的大小随位置连续变化，因此大对象位于顶部，中等对象位于中部，小对象位于底部，并且大小和位置在整个范围内单调变化。我们在第 6.1 节对概念的“量子组合”的讨论——例如将贝尔效应作为 $|00\rangle$ 和 $|11\rangle$的组合——表明，这类连续关联应当能够在量子模型中得到捕捉。我们将这类概念的研究留待未来工作开展。

7.5 学习一般混合态射与纠缠概念

上文 *twike* 实验所作的一个假设是：相关域（在本例中为 SHAPE 和 COLOUR）已预先知晓，因此概念参数化量子电路可以有效忽略对应于其他域的线路。一个有趣的问题是，如果将全部 4 条线路作为输入，概念参数化量子电路是否也能够学习哪些域是相关的，以及其中哪些域应当彼此关联。

为了允许任意域之间存在此类相关性，概念参数化量子电路应允许其任意域之间发生纠缠。此外，为了处理诸如红色这类某些域无关紧要的概念，还需注意，纯效应并不足够。正如 twike 概念（图 8）中实际采用的做法，要将某个域视为无关紧要，概念就应当将其丢弃，这是一种混合量子效应。通过使用概念参数化量子电路最一般的形式（19），即可同时纳入这两项特性；该形式明确包含丢弃操作，能够描述混合态射概念，并涵盖任意域之间的纠缠。

为了测试对这些一般概念的学习能力，我们设置了一个与*twike*类似的实验，但这次只将红色作为待学习的概念。当然，编码器在基本设置中接受分类训练时，已经学会了红色；但在这个新实验中，我们移除了关于 COLOUR 域位于哪条线路上的信息，并观察新的概念参数化量子电路能否在输入红色和非红色实例的情况下学会红色。

同样，对该模型的训练只更新概念参数化量子电路的旋转参数；卷积神经网络的参数保持不变。损失函数仍为二元交叉熵，并使用第 7.1 节中的 3,000 个实例作为训练数据。这些实例中约有 33% 是红色的正例，其余为负例。我们使用 2 层旋转门和纠缠门来构建概念参数化量子电路，并训练该模型 50 个训练轮次，最终在未见过的测试样本上取得了 100% 的准确率。只有引入丢弃操作（以及纠缠门），我们才能获得如此高的准确率。

概念参数化量子电路在多大程度上采用混合，以及学习到的概念是否符合上述直觉（例如，对于红色概念，丢弃颜色以外的所有领域），这些问题留待未来工作探讨。

7.6 包含逻辑算子的概念

在最后一组实验中，我们研究了纠缠并丢弃型参数化量子电路（19）能否学习由逻辑算子构成的概念，例如红色或蓝色。除了它与概念表示及一般学习之间显而易见的联系外，逻辑算子还通过量子逻辑与量子理论相关联（Birkhoff & von Neumann，1936年）。

7.6.1 跨域合取

我们考察的第一个包含逻辑算子的概念是红色且圆形，首先假定已知哪些域与该概念相关（本例中为 COLOUR 和 SHAPE）。编码器参数化量子电路采用前文（18）中的简单结构，但仅使用 COLOUR 和 SHAPE 线路（因此另外两条线路实际上被丢弃）。我们使用了与之前相同的3,000个训练样本，其中约17%为正例，83%为负例。在这种情况下，学习特别容易：参数化量子电路只需一个旋转层，无需任何纠缠门，也无需丢弃任何辅助量子比特，模型便达到了100%的准确率。这是因为，通过张量积对域进行因子分解，实际上已经提供了使用合取所需的全部结构；从某种意义上说，张量积就是合取。

移除关于哪些域与任务相关的知识，并使用式（19）中更通用的编码器参数化量子电路后，学习会变得更困难；但一个包含 4 层旋转门和纠缠门的编码器参数化量子电路，仍能以 100% 的准确率学会该概念。

7.6.2 域内析取

接下来我们考虑析取，但不是跨域析取，而是域内析取；要学习的概念是 红色或蓝色。在 3,000 个训练样本中，61% 是正例，39% 是负例。同样，如果向概念参数化量子电路提供哪些域与任务相关的知识，学习就会很容易，只需单个旋转层即可达到 100% 的准确率。

如果布洛赫球上的每个点都对应于COLOUR 域的一个实例，也就是一种颜色，就像我们的模型中那样，那么学习 红色或蓝色 这一纯效应的参数化量子电路，实际上只是在学习一种颜色；直观来说，这种颜色处于红色和蓝色“之间的某处”。当该域只有少数几个概念时，例如这里使用的 3 个概念，这个单一实例或许能很好地近似红色或蓝色，从而达到 100% 的准确率。然而，若存在更多概念，我们预计红色或蓝色 这一概念应当涉及混合。

当未向参数化量子电路提供哪些域相关的信息时，使用式（19）中更通用的参数化量子电路（包含 3 层旋转门和纠缠门，并采用丢弃操作），也能成功学习红色或蓝色 。

域内合取——例如红色且蓝色——不适用于本报告中的基本概念，因为它们互斥。跨域析取——例如红色或圆形——则有意义（尽管可能稍显不自然）；事实上，我们可以使用式（19）中的通用参数化量子电路（PQC），通过 3 层旋转门和纠缠门（包括丢弃），成功学习红色或圆形 。直观而言，学习红色或圆形 需要混合（因此也需要丢弃），因为它比红色 和圆形 两个概念都更一般，因此在概念层级中高于它们；而这两个概念本身又都需要使用（混合态射）丢弃效应来忽略无关域（例如，红色 会忽略除 COLOUR 之外的所有域）。

8 量子模型是一个概念空间吗?

比较概念空间模型与我们提出的量子模型时，自然会想知道，在多大程度上可以将后者视为前者的一个实例。也就是说，我们要问：量子模型是概念空间吗?事实上，这个问题并非显而易见，因此我们将在此进行较为深入的讨论。

我们先暂且不考虑模型的因式分解，只考察模型只有一个因子、且由希尔伯特空间描述的情况。

希尔伯特空间作为凸空间。直观来看，我们首先可以发现，任意希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 确实是一个凸空间。事实上，$\mathcal{H}$ 构成一个复向量空间，因此特别允许我们取凸组合

$$\sum_{i=1}^{n} p_i \psi_i \tag{22}$$

元素 $\psi_i \in \mathcal{H}$，其中权重为 $p_i \in [0,1]$ 且满足 $\sum p_i = 1$。

然而，$\mathcal{H}$ 中的任意向量都没有直接的物理解释，只有满足 $\|\psi\| = 1$的单位向量 $\psi \in \mathcal{H}$ 才有，这些单位向量描述了该空间的纯态（而这些纯态在相差一个全局相位$e^{i\theta}$时会被视为相同）。因此，正确的问题是：由此得到的纯态集合是否构成一个凸空间。事实上并非如此。对单位向量取凸组合（22）通常不会得到单位向量（甚至可能得到向量 $0 \in \mathcal{H}$）。因此，我们无法按照定义 1 的意义，直接将纯态视为一个凸空间。

作为中间关系空间的纯态。尽管如此，我们仍可以另一种方式将希尔伯特空间的纯态视为一种几何空间，类似于概念空间。对于量子比特 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$，这一点最为明显；正如我们所见，它的纯态可以通过布洛赫球来可视化。布洛赫球表面上的每个点都描述一个独特的纯量子态。尽管布洛赫球不具备定义 1 中那种简单直接的凸混合方式，我们仍可将其视为一种更广义的凸空间实例，称为中间关系空间。这是一个集合 Z，连同一个三元运算 $B(x、y、z)$；直观地说，该运算表示点 y 位于点 x 和 z之间。

在 G¨ardenfors（2004年）和 G¨ardenfors（2014年）的著作中，以及 Aisbett 和 Gibbon（2001年）等形式化研究中，有人提出，可以完全用这类空间来形式化整个概念空间理论。事实上，它们使我们能够通过如下方式定义子集的核心概念凸性：如果 S 在 x、$z \in S$ 的情况下为凸集，且 $B(x、y、z)$ 成立，那么 $y \in S$ 也成立。

我们可以将布洛赫球视为中间关系空间，规定当一条从 x 到 z 的测地线经过 y时，$B(x, y, z)$ 成立。图 8 展示了这个空间中的中间关系以及一个凸子集。现在我们的问题是：概念量子模型在多大程度上

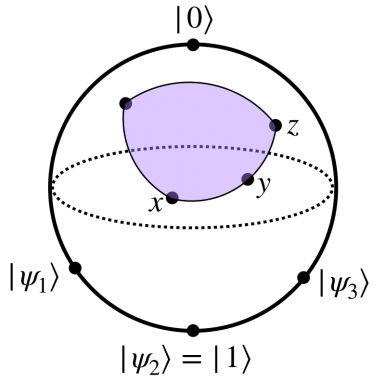


图9：将布洛赫球建模为中间关系空间，其中包含一个中间关系的示例 $B(x,\ y,\ z)$，以及一个以紫色显示的凸区域示例。使用态 $|\psi_i\rangle$ 来说明效应 $\langle 0|$ 并非拟凹。

与 $\mathbb{C}^2$ 将布洛赫球视为中间关系空间的这一观点相同 Z? 对此，我们的回答是：事实上，两者存在根本性差异。

比较概念。造成这一差异的最重要原因是，两个模型对概念的描述不同。

首先，正如我们所见，量子模型中的清晰概念对应于 $\mathcal{H}$ 的子空间；对于布洛赫球而言，这些子空间要么是单个点（维数为1的子空间），要么是球体的整个表面（维数为2的子空间）。因此，球面上的大多数凸区域（它们构成了中间关系空间 Z 中的清晰概念）并不构成有效的量子概念。

反过来，大多数量子概念也不符合中间关系空间 Z 中有效模糊概念的条件。正如 Tull（2021）所论证的，模糊概念 $C\colon\ Z \to [0,1]$ 至少应满足“拟凹性”的概念，即每个集合

$$C_t := \{x \in X \mid C(x) \geq t\}$$

是凸的。然而，下面的例15表明，即使是纯量子概念也可能不满足这一条件。

因此，$\mathbb{C}^2$ 上的量子模型与作为介于空间 Z的布洛赫球，具有不同的概念集合。我们得出结论：量子模型并非概念空间的特例。

例15. 考虑纯概念 $C = |0\rangle\langle 0|$。令 $|\psi_i\rangle = \cos(\frac{\theta_i}{2})\ |0\rangle + \sin(\frac{\theta_i}{2})\ |1\rangle$，其中 $i = 1, 2, 3$，如图 8 所示。设 $\theta_1 = \frac{2\pi}{3}, \theta_2 = \pi, \theta_3 = \frac{4\pi}{3}$，则 $|\psi_2\rangle\langle\psi_2| = |1\rangle\langle 1|$ 位于 $|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ 和 $|\psi_3\rangle\langle\psi_3|$, 之间，但这意味着 C 并非拟凹，因为：

$$C(|\psi_1\rangle\langle\psi_1|) = C(|\psi_3\rangle\langle\psi_3|) = \frac{1}{4} > 0 = C(|\psi_2\rangle\langle\psi_2|)$$

混合态空间。事实上，可以将量子概念视为定义在另一个凸空间上的有效模糊概念，即空间 St($\mathcal{H}$)，它由 $\mathcal{H}$的所有（纯态和混合态）密度矩阵构成。每个量子概念 C 的拟凹性源于这样一个事实：它是一个线性泛函，因而是仿射的，满足：

$$C(\sum_i p_i \rho_i) = \sum_i p_i C(\rho_i)$$

对于密度矩阵 ρ_1，……， ρ_n 以及 $\sum_i p_i = 1$。

从这一角度来看，人们可能会倾向于将量子概念模型视为一个凸空间 $Z = \mathsf{St}(\mathcal{H})$，其中任意密度矩阵都是其实例 $z \in Z$。然而，由于密度矩阵被解释为纯量子态上的不确定性态，将它们视为概念空间上的分布的对应物，而不是概念空间本身的实例，会更加自然。

比较张量。最后，即使试图将量子模型视为凸空间 St($\mathcal{H}$)，我们通过张量复合此类模型的方式在两种情况下也存在根本差异，因为我们有：

$$\mathsf{St}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}) = \mathsf{St}(\mathcal{H}) \otimes \mathsf{St}(\mathcal{K}) \neq \mathsf{St}(\mathcal{H}) \times \mathsf{St}(\mathcal{K})$$

因子的复合规则可以被视为任何一类模型的重要组成部分，因此这使两个类别彼此有别。

总而言之，鉴于所有这些原因，将量子模型视为不同于概念空间的一类模型是最自然的选择。尽管如此，它们在可学习性方面具备相同的优势，只是以线性结构取代了凸结构；此外，得益于纠缠，它们在描述相关概念方面甚至可能更加自然。

9 未来工作

在本报告中，我们提出了一种基于量子形式体系的新概念模型，其中概念被定义为一种效应，并展示了如何将其实现为一个经过训练、能够对简单形状的图像进行概念分类的混合网络。我们还使用弦图对该模型进行了全面的范畴论形式化。通过利用纠缠和丢弃，该模型能够成功学习包含相关性的概念，并确定哪些域与某个概念相关。未来分析已学习概念的一种途径，是使用量子信息论中的一些标准度量，衡量量子效应中的纠缠程度和纯度（Plenio & Virmani, 2005年）。

未来工作的另一个有趣方向，是将量子概念模型应用于由概念层级生成的数据，例如包含深红色等颜色的不同色调，并利用效应的自然序关系。

这包括探究我们学习到的量子概念在多大程度上已经遵循这一序关系，例如，作为一种效应，红色或蓝色概念是否位于红色和蓝色概念之上。继续讨论颜色表征时，我们在此仅对色相进行了建模——沿单一维度表示——然而，颜色更适合使用类似颜色纺锤体的结构进行表征。颜色纺锤体能否在一个或多个量子比特上得到适当表征，是一个有趣的理论与实践问题。Yan 等（2021）提出了一个与我们自身模型相近的颜色空间量子模型。

还可以进一步探索量子模型在表征方面的其他特性。除了层级结构之外，**Quant** （以及**Class**）中的（次归一化）概念还带有否定 运算 $C^{\perp} := \blacktriangle - C$，这一运算已在自然语言中得到研究（Rodatz 等人，2021年；Shaikh 等人，2021年；Lewis，2020）。相比之下，概念空间中的概念较难定义否定；例如，凸区域的补集通常是非凸的。

在 Tull（2021）中，模糊概念的定义得到了扩展，从而定义了一个幺半对称范畴，其中包含概念空间之间的模糊概念过程。探索如何在我们的量子框架中学习此类过程，包括域之间的“隐喻式”映射，将会很有意思。除了学习概念的效应之外，这还涉及学习量子模型之间的一般完全正映射。

最后，尽管本文所有实践工作都是在经典计算机上通过模拟完成的，但量子比特数量相对较少，电路也相对较浅，因此在真实量子硬件上运行这些模型是完全有可能的，这留待未来工作进一步探索。未来工作还包括寻找能够展现量子表征优势的任务，例如，确定该理论中的不可分效应是否确实能在概念结构建模方面优于经典关联。

致谢

感谢 Lia Yeh、Robin Lorenz 和 Douglas Brown 对早期草稿提出极其详尽且有帮助的意见，也感谢牛津量子复合智能团队的其他成员。

参考文献

Abadi, M., Agarwal, A., Barham, P., Brevdo, E., Chen, Z., Citro, C.,..... Zheng, X.（2015年）。*TensorFlow*：异构系统上的大规模机器学习。取自 https://www.tensorflow.org/（软件可从 tensorflow.org 获取）Aerts, D.（2009年）。认知中的量子结构。《数学心理学杂志》，*53*（5），314–348。

Aerts, D., & Gabora, L.（2005年）。概念及其组合的状态-语境-属性模型 I：语境集和属性集的结构。*Kybernetes*，*34*，151-175。Aisbett, J., & Gibbon, G.（2001）。概念空间作为中观层级表征的一般表述。人工智能，*133*（1-2），189–232。Bechberger, L., & K¨uhnberger, K.-U.（2017年）。概念空间的彻底形式化。在德国/奥地利人工智能联合会议（***K¨ünstliche Intelligenz***）（第58–71页）。Benedetti, M., Lloyd, E., Sack, S., & Fiorentini, M.（2019年）。作为机器学习模型的参数化量子电路。*Quantum Sci. Technol.*，*4*（043001）。Birkhoff, G., & von Neumann, J.（1936年）。量子力学的逻辑。数学年刊，*37*（4），823–843。Bolt, J., Coecke, B., Genovese, F., Lewis, M., Marsden, D., & Piedeleu, R.（2019年）。交互概念空间 I：概念的语法组合。在概念空间：阐述与应用（第151–181页）。施普林格。Brehmer, J., Haan, P. D., Lippe, P., & Cohen, T.（2022年）。弱监督因果表征学习。在*ICLR2022*关于推理要素：对象、结构与因果性的研讨会。Cho, K., & Jacobs, B.（2019年）。通过弦图实现析因与贝叶斯反演。计算机科学中的数学结构，*29*（7），938–971。Clark, S., Lerchner, A., von Glehn, T., Tieleman, O., Tanburn, R., Dashevskiy, M., & Bosnjak, M.（2021年）。将概念形式化为有根抽象（技术报告）。英国伦敦：DeepMind。（https://arxiv.org/abs/2101.05125）Coecke, B., & Kissinger, A.（2017年）。量子过程图示：量子理论与图示推理入门。剑桥大学出版社。doi：10.1017/9781316219317 Fong, B.（2019年）。应用范畴论导论——组合性的七个草图。剑桥大学出版社。Ganter, B., & Obiedkov, S.（2016年）。概念探索。施普林格。G¨ardenfors, P.（2004年）。概念空间：思维几何。麻省理工学院出版社。G¨ardenfors, P.（2014年）。意义几何：基于概念空间的语义学。麻省理工学院出版社。Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A.（2016年）。深度学习。麻省理工学院出版社。Gopnik, A., & Meltzoff, A.（1997年）。词语、思想与理论。麻省理工学院出版社。Havlicek, V., Corcoles, A. D., Temme, K., Harrow, A. W., Kandala, A., Chow, J. M., & Gambetta, J. M.（2019年）。利用量子增强特征空间进行监督学习。《自然》，*567*，209-212。Higgins, I., Matthey, L., Pal, A., Burgess, C. P., Glorot, X., Botvinick, M.,……Lerchner, A.（2017年）。 β-变分自编码器：使用受约束变分框架学习基本视觉概念。在*ICLR 2017*年论文集。Higgins, I., Sonnerat, N., Matthey, L., Pal, A., Burgess, C. P., Bo˘snjak, M.,……Lerchner, A.（2018年）。SCAN：学习层级组合视觉

概念。在《*ICLR 2018*年会议论文集》中。Johri, S., Debnath, S., Mocherla, A., Singh, A., Prakash, A., Kim, J., & Kereni- dis, I.（2021年）。囚禁离子量子计算机上的最近质心分类。*npj Quantum Inf*，*7*（1），122。Kennington, C., & Schlangen, D.（2015年7月）。用于增量式指称消解的知觉基础词义的简单学习与组合应用。在计算语言学协会第*53*届年会暨自然语言处理第*7*届国际联合会议论文集（第*1*卷：长篇论文）（第292–301页）中。中国北京：计算语言学协会。取自 https://aclanthology.org/P15-1029 doi: 10.3115/v1/P15-1029 Khoshaman, A., Vinci, W., Denis, B., Andriyash, E., Sadeghi, H., & Amin, M. H.（2018年）。量子变分自编码器。量子科学与技术，*4*（1），014001。Kingma, D. P., & Welling, M.（2014年）。自编码变分贝叶斯。在国际学习表征会议论文集（*ICLR 2014*）中。Lake, B. M., Ullman, T. D., Tenenbaum, J. B., & Gershman, S. J.（2017年）。构建能够像人一样学习和思考的机器。《行为与脑科学》，*40*。Lewis, M.（2020年）。迈向组合分布语义学中的逻辑否定。*IfCoLoG*逻辑及其应用期刊，*7*。Lewis, M., & Lawry, J.（2016年）。用于概念组合的层次化概念空间。人工智能，*237*，204–227。Locatello, F., Bauer, S., Lucic, M., R¨atsch, G., Gelly, S., Sch¨olkopf, B., & Bachem, O.（2019年）。对无监督学习解耦表征中常见假设的挑战。在第*36*届国际机器学习会议论文集中。加利福尼亚州长滩。Margolis, E., & Laurence, S.（编）。（2015年）。概念心灵：概念研究的新方向。麻省理工学院出版社。Margolis, E., & Laurence, S.（2022年）。概念。https://plato.stanford.edu/archives/fall2022/entries/concepts/。（《斯坦福哲学百科全书》）Murphy, G. L.（2002年）。概念大百科。麻省理工学院出版社。Panangaden, P.（1998年）。概率关系。伯明翰大学计算机科学学院研究报告，59–74。Plenio, M. B., & Virmani, S.（2005年）。纠缠度量导论（技术报告）。取自 https://arxiv.org/abs/quant-ph/0504163 doi: 10.48550/ARXIV.QUANT-PH/0504163 Pothos, E. M., & Busemeyer, J. R.（2013年）。量子概率能否为认知建模提供新的方向？《行为与脑科学》，*36*（3）。Preskill, J.（2012年）。量子计算与纠缠前沿。arXiv:1203.5813。（在第25届索尔维会议上的报告，

物理学——量子世界理论）Rickard, J. T., Aisbett, J., & Gibbon, G.（2007年）。概念空间理论的重新表述。信息科学，*177*（21），4539–4565。Rodatz, B., Shaikh, R. A., & Yeh, L.（2021年）。在组合分布语义学中使用世俗语境进行会话否定。*arXiv*预印本 *arXiv:2105.05748* 。Rosch, E. H.（1973年）。自然范畴。认知心理学，*4*（3），328–350。Schuld, M., Bocharov, A., Svore, K. M., & Wiebe, N.（2020年3月）。以电路为中心的量子分类器。《物理评论*A*》，*101*，032308。取自 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.101.032308 doi: 10.1103/PhysRevA.101.032308 Schuld, M., & Killoran, N.（2019年2月）。特征希尔伯特空间中的量子机器学习。《物理评论快报》，*122*，040504。取自 https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.122.040504 doi: 10.1103/PhysRevLett.122.040504 Selinger, P.（2010年）。幺半范畴图形语言综述。在《物理学的新结构》（第289–355页）中。施普林格。Shaikh, R. A., Yeh, L., Rodatz, B., & Coecke, B.（2021年）。组合会话否定。*arXiv*预印本 *arXiv:2107.06820*。Shaikh, R. A., Zemljič, S. S., Tull, S., & Clark, S.（2022年）。概念变分自编码器（技术报告）。英国牛津：Cambridge Quantum / Quantinuum。（https://arxiv.org/abs/2203.11216）Shiebler, D., Gavranovic, B., & Wilson, P.（2021年）。机器学习中的范畴论。在第四届应用范畴论国际会议中。英国剑桥。Tomas, V., & Sylvie, D.（2015年）。概念合取量子模型中的酉变换及其在数据表示中的应用。《心理学前沿》，*6*。Trueblood, J. S., & Busemeyer, J. R.（2011年）。推理中顺序效应的量子概率解释。《认知科学》，*35*，1518–1552。Tull, S.（2021年）。概念空间中模糊概念的范畴语义学。《*2021*年应用范畴论会议论文集》。Van de Wetering, J.（2021年）。使用全局门构建量子电路。《新物理学杂志》，*23*（4），043015。Watters, N., Matthey, L., Borgeaud, S., Kabra, R., & Lerchner, A.（2019年）。*Spriteworld*：一种灵活、可配置的强化学习环境。https://github.com/deepmind/spriteworld/。取自 https://github.com/deepmind/spriteworld/ Yan, F., Li, N., & Hirota, K.（2021年）。Qhsl：量子色相、饱和度和明度颜色模型。信息科学，*577*，196–213。

A 形状数据集

第 7.1 节中用于通过 Spriteworld 软件生成形状数据集的参数：

```
COLOURS = {
    'red': distribs.Mixture([distribs.Continuous('c0', 0.95, 1.), distribs.Continuous('c0',0.,0.05)]),
    'blue': distribs.Continuous('c0', 0.55, 0.65),
    'green': distribs.Continuous('c0', 0.27, 0.37),
}
SHAPES = {
    'triangle': shapes.polygon(num_sides=3, theta_0=np.pi/2),
    'square': shapes.polygon(num_sides=4, theta_0=np.pi/4),
    'circle': shapes.polygon(num_sides=30),
}
SIZE = {
    'small':  distribs.Continuous('scale', 0.1, 0.17),
    'medium':  distribs.Continuous('scale', 0.17, 0.23),
    'large':  distribs.Continuous('scale', 0.23, 0.3),
}
POSITION = {
    'top': distribs.Product([distribs.Continuous('y', 0.56, 0.74), distribs.Discrete('x', [0.5])]),
    'centre': distribs.Product([distribs.Continuous('y', 0.38, 0.56), distribs.Discrete('x', [0.5])]),
    'bottom': distribs.Product([distribs.Continuous('y', 0.2, 0.38), distribs.Discrete('x', [0.5])]),
}
```

COLOUR 域的其他参数：

```
distribs.Continuous('c1', 0.5, 1.), #saturation
distribs.Continuous('c2', 0.9, 1.), #brightness
```

A.1 彩虹颜色数据集

第7.3.1节中用于通过 Spriteworld 软件生成具有更多颜色的形状数据集的参数：

```
COLOURS = {
    'red': distribs.Mixture([distribs.Continuous('c0', 0.95, 1.), distribs.Continuous('c0',0.,0.05)]),
    'orange': distribs.Continuous('c0', 0.05, 0.10),
    'yellow': distribs.Continuous('c0', 0.10, 0.18),
    'green': distribs.Continuous('c0', 0.27, 0.37),
    'blue': distribs.Continuous('c0', 0.55, 0.65),
    'indigo': distribs.Continuous('c0', 0.68, 0.75),
    'violet': distribs.Continuous('c0', 0.75, 0.85),
}
```

B 网络架构与超参数

图像宽度	64
图像高度	64
图像通道数	3
CNN 卷积核大小	4×4
CNN 步长	2×2
CNN 层数	4
CNN 滤波器数量	64
CNN 全连接层	2
CNN 全连接层大小	256
Concept PQC 参数初始化区间	$[0.0, 1.0]$
批大小	64
Adam 学习率	10^{-3}
Adam β_1	0.9
Adam β_2	0.999
Adam ϵ	10^{-7}