用于监督式机器学习的变分量子态判别器

Dongkeun Lee，[1] Kyunghyun Baek，[2] Joonsuk Huh，[1,3,4,*] 和 Daniel K. Park[5,6,†]

[1] *Department of Chemistry, Sungkyunkwan University, Suwon, 16419, Republic of Korea*
[2] *Electronics and Telecommunications Research Institute, Daejeon, 34129, Republic of Korea*
[3] *Sungkyunkwan University Advanced Institute of Nanotechnology, Suwon, 16419, Republic of Korea*
[4] *Institute of Quantum Biophysics, Sungkyunkwan University, Suwon, 16419, Republic of Korea*
[5] *Department of Applied Statistics, Yonsei University, Seoul, 03722, Republic of Korea*
[6] *Department of Statistics and Data Science, Yonsei University, Seoul, 03722, Republic of Korea*

量子态判别（QSD）是量子信息处理中的一项基本任务，具有众多应用。我们提出了一种执行最小错误量子态判别的变分量子算法，称为变分量子态判别器（VQSD）。VQSD 使用参数化量子电路，通过最小化由量子态判别推导出的代价函数进行训练，并找到用于区分目标量子态的最优正算子值测度（POVM）。VQSD 能够判别未知态，从而无需进行昂贵的量子态层析。我们的数值模拟以及与半定规划的比较表明，VQSD 能有效地为纯态和混合态的最小错误量子态判别寻找最优 POVM。此外，VQSD 还可用作多分类的监督式机器学习算法。使用鸢尾花数据集进行数值模拟所得到的受试者工作特征曲线下面积为 0.97 至 1，平均值为 0.985，展现了 VQSD 分类器的出色性能。

arXiv:2303.03588v1 [quant-ph] 7 Mar 2023

I. 引言

量子测量理论在量子信息处理中发挥着至关重要的作用，推动了通信、计算和传感领域的进步 [1–4]。该理论指出，通过量子测量，可以以非零概率区分非正交量子态；量子测量通常可由正算子值测度（POVM）描述 [5, 6]。这源于希尔伯特空间上量子态的几何结构以及量子力学的测量公设。量子态判别（QSD）是一个成熟的研究领域，为量子态的可区分性和经典信息的提取提供了理论基础。值得注意的是，区分两个量子态的最优策略早在量子计算问世之前就已提出 [7]。

区分非正交态的能力为数据科学和机器学习带来了令人振奋的前景，因为任意数量的数据都可以编码在单个量子比特中。对此不存在经典类比，因为经典比特只能表示两个正交态。因此，量子态判别（QSD）的概念已在机器学习的各种场景中出现。一个研究方向聚焦于利用量子态判别开展经典—量子混合机器学习。例如，双元素正算子值测度的最优测量理论已被用于确定二元分类任务的最佳量子特征映射 [8]，并学习用于量子数据分类的量子电路，该电路仅使用有限的一组双量子比特态 [9, 10]。此外，还提出了若干量子启发算法 [11] 基于量子态判别理论构建分类器的方法也已有报道 [12–14]。然而，使用经典计算机寻找量子态判别的最优测量，在量子比特数量较多时会变得计算上难以处理，因为这需要有关各态的完整信息，而这些信息通常通过量子态层析获得。此外，二态量子态判别需要进行谱分解，以构造最优正算子值测度。更进一步，对于多于两个态的情况，优化通常通过半定规划（SDP）完成，其中包含若干步骤；这些步骤随希尔伯特空间的维数呈多项式增长，因而随量子比特数量呈指数增长 [10]。此外，将通过经典方法找到的最优正算子值测度转换为相应的量子电路以供实现，通常也是一项具有挑战性的任务。鉴于这些挑战，直接在量子计算机上为量子态判别寻找最优正算子值测度，是一种自然的探索方向。

鉴于 QSD 在包括机器学习在内的各个领域具有广泛应用，以及经典优化面临的挑战，我们提出了一种用于执行最小错误量子态判别的变分量子算法（VQA）。我们的 VQA 是一种通用方案，能够以系统化的方式判别任意维度的量子系统，无论其为纯态还是混合态。基于用于混合态的变分量子态判别器（VQSD），我们还提出了一种量子多分类算法。量子电路的训练对应于在数据嵌入的希尔伯特空间中识别非线性决策边界，因为可区分的类别数量可能超过希尔伯特空间的维度。尽管本研究主要展示了 VQSD 在机器学习中的适用性，但它也可用于任何需要最小错误量子态判别的应用。

* joonsukhuh@gmail.com
† dkd.park@yonsei.ac.kr

本文其余部分安排如下。第二节回顾本研究的理论背景，例如用于正算子值测度（POVM）的量子电路和最小错误量子态判别。我们在此将一项先前关于双量子比特态上四元素 POVM 的门分解的研究推广到任意数量的量子比特和 POVM 元素。第三节介绍 VQSD，并详细说明如何构造代价函数和训练过程。本节末尾还介绍数值模拟及其结果，展示 VQSD 成功找到最优 POVM。第四节介绍 VQSD 在监督式机器学习中的应用，并展示使用鸢尾花数据集进行多分类的模拟结果。第五节将给出结论、讨论以及未来可能的研究方向。

II. 理论框架

A. 正算子值测度的量子电路

量子力学中的测量通常由一组满足 $\sum_{m=0}^{l-1} E_m = I$ 的半正定算子 $\{E_m\}$ 描述。其中，$m \in \{0,\ldots,l\}$ 标记可能的测量结果；给定描述量子态的密度矩阵 ρ，获得 m 的概率为 p_m =Tr($E_m\rho$)。注意，这些算子可以分解为 $E_m = K_m^\dagger K_m$，其中 $\{K_m\}$ 被称为 Kraus 算子集合。在获得测量结果 m 后，量子态演化为 $K_m\rho K_m^\dagger/p_m$。我们将由矩阵集合 E_m 构成的此类测量过程称为具有 l 个元素的正算子值测度（POVM） [5]。

根据 Neumark 定理，任意正算子值测度都可以通过量子电路实现：对由目标量子态和辅助系统组成的扩展系统施加酉算子，然后对后者进行测量 [15, 16]。为此，引入辅助量子比特，并使用记为 $\mathcal{U}$ 的多量子比特量子门作用于所有量子比特。作用于目标量子比特和辅助量子比特的幺正操作 $\mathcal{U}$ 可以用一组 Kraus 算子 $\{K_m\}$ 表示为

$$\mathcal{U}|\psi\rangle_T|\mathbf{0}\rangle_A = \sum_{m=0}^{l-1} \left(K_m|\psi\rangle_T\right)|m\rangle_A, \tag{1}$$

其中，$|\psi\rangle_T$ 是由 n_T个量子比特组成的目标量子态，$|\mathbf{0}\rangle_A$ 表示状态$|0\rangle$ 中的所有辅助量子比特（见图1(a)）。公式（1）表示Kraus秩为 l [17, 18]的量子信道的实现。随后，通过在计算基中测量辅助量子比特（例如，在 Z 基中进行投影测量），即可对 $|\psi\rangle_T$ 实施正算子值测度，并以概率 $p(m) = {}_T\langle\psi|K_m^\dagger K_m|\psi\rangle_T$得到测量结果 m。这里，我们将幺正操作 $\mathcal{U}$ 称为POVM电路。

由于任意酉门都可以用实值参数进行参数化，因此该 POVM 算符产生测量结果 m 的算符可写为

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_m(\Theta) &= E_m(\Theta)\otimes|\mathbf{0}\rangle_A\langle\mathbf{0}| \\ &= \mathcal{U}^\dagger(\Theta)(I_T\otimes M_m)\mathcal{U}(\Theta),\end{aligned} \tag{2}$$

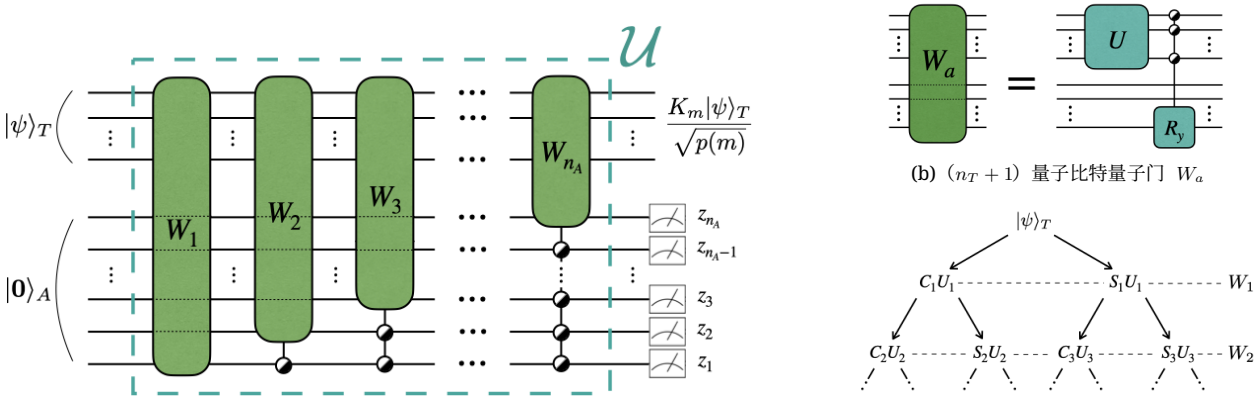
其中，Θ是参数向量，I_T 是作用于目标量子比特的单位算子，$M_m = |m\rangle_A\langle m|$表示对辅助量子比特在计算基中的投影测量。注意，对$n_A$ 个辅助量子比特进行测量所产生的每个比特串 $z_1z_2\cdots z_{n_A} \in \{0,1\}^{n_A}$ 都会被转换为十进制值 $m \in \{0,\cdots,l-1\}$，即正算子值测度的结果索引。

多量子比特量子电路有多种分解方式，例如余弦-正弦分解[19, 20], 、Knill 提出的分解 [21], 以及逐列分解 [22]。为了更好地理解如何在量子电路中实现正算子值测度，我们选择了一种合适的酉分解，其示意图如图1所示。文献 [9]讨论了 $\mathcal{U}$ 在 $n_T = n_A = 2$ 下的分解。我们基于余弦-正弦分解（CSD）将其中的结果推广至任意 n_T和n_A，并在附录A中给出了严格推导。具体而言，任意量子电路 $\mathcal{U}$ 首先被分解为一组由 $a-1$ 个辅助量子比特统一控制的（n_T+1）量子比特酉算符 W_a，如图1(a)所示。随后，将酉算符 W_a 分解为一个一般的 n_T量子比特酉门 U，并对布洛赫球的 y轴施加一个统一受控的单量子比特旋转，记为 R_y；该旋转作用于第 a个辅助量子比特，并由所有目标量子比特控制，如图1(b)所示。所有 U门和 R_y门的参数向量 Θ 的维数为（$l-1$）（$2^{2n_T}-1+2^{n_T}$）。

让我们从 Kraus 算子的角度仔细考察图1(a)和(b)的电路结构。图1(b)中的均匀受控 R_y 量子门的作用，等效于在目标系统中将一个对角矩阵乘以态矢量。根据辅助量子比特的状态，该对角矩阵要么是 $C := \cos(diag(\Theta_R))$（当辅助量子比特处于状态 $|0\rangle_A$时），要么是 $S := \sin(diag(\Theta_R))$（当其处于状态 $|1\rangle_A$时），其中 $\Theta_R = (\theta_1,\cdots,\theta_{2^{n_T}})$是一个包含 2^{n_T} 个 R_y 量子门角度的参数向量。因此，单个量子门 W_a 即可实现秩为2的Kraus 算子 $\{CU, SU\}$。

为了生成秩为 $l>2$ 的 Kraus 算子，需要一个包含 $n_A = \lceil\log_2 l\rceil$ 个量子比特的辅助系统，并随着控制量子比特的数量逐渐增加至 n_A-1，依次施加 $(a-1)$ 重均匀受控 W_a 量子门，如图1(a)所示。每个均匀受控 W_a 量子门都会构建依赖于辅助系统先前结果的二进制秩 Kraus 算子。通过引入 CSD 二叉树（见图1(c)），即可描述整个过程 [19]。随后，秩为 l 的 Kraus 算子可表示为

$$K_m = \prod_{a=1}^{n_A} D_{j(a)}U_{j(a)}, \tag{3}$$



(a)（$n_T + n_A$）量子比特幺正电路 $\mathcal{U}$

(b)（$n_T + 1$）量子比特量子门 W_a

(c) CSD 二叉树

图1： 幺正操作 $\mathcal{U}$ 的电路图。它描述了如何对任意量子态或目标态 $|\psi\rangle_T$ 执行正算子值测度。通过测量辅助量子比特来确定所执行的 POVM 元素，而比特串测量结果 $z_1 z_2 \cdots z_{n_A}$ 对应于 POVM测量结果 m。(a) 电路 $\mathcal{U}$被分解为 n_A 个（均匀受控） W_a 量子门；(b) 一个（$n_T + 1$）量子比特量子门 W_a 由一个通用的 n_T量子比特 U和一个均匀受控 R_y组成。绘制在 W_a 量子门上方的虚线表示相应的量子比特不参与该操作，半填充圆表示均匀控制。(c) CSD树一目了然地描述了由电路 $\mathcal{U}$ 的辅助量子比特产生的二元决策。

其中，对角矩阵 $D_{j(a)}$ 在 $z_a = 0$ 时变为 $C_{j(a)}$，在 $z_a = 1$时则变为 $S_{j(a)}$ 。这里引入索引j（a）：$= 2^{a-1} + \sum_{i=1}^{a-1} z_i 2^{a-1-i}$，用于枚举均匀受控 W_a 量子门的操作，因为它由一系列角度各异的 $(a-1)$ 重受控量子门组成（见附录 A 中的图7）。例如，使用 W_1 和均匀受控 W_2 量子门，可以实现一组秩为 4 的 Kraus 算子 $\{C_2U_2C_1U_1, S_2U_2C_1U_1, C_3U_3S_1U_1, S_3U_3S_1U_1\}$；其中一个元素由测量结果 z_1z_2 确定。

均匀受控 W_a 量子门的控制部分可以在经典计算机上实现，因为它与测量可交换，详情见附录（附录A）。因此，量子门复杂度主要取决于图1(b)所示 W_a 量子门的实现。在 W_a的实现中，任意 n_T量子比特酉变换 U 所需的受控非门 数量的复杂度为$O(2^{2n_T})$ [20]。此外，均匀受控 R_y操作还需要 2^{n_T} 个受控非门 [23]。因此，在给定 l值的情况下，电路 $\mathcal{U}$ 中受控非门 的总数为 $O(2^{2n_T}l)$。对于 $n_T = 2$，受控非门 的总数减少为$3(l-1)$；对于通用双量子比特门 [24–26]，3被认为是受控非门 数量的最小值。为减缓实现 $\mathcal{U}$所需双量子比特门数量的指数增长，可以考虑为 $\mathcal{U}$ 选择更简单的结构，例如变分量子本征求解器（VQE）中使用的拟设 [10]。然而，这种简化需要以牺牲全局最优性为代价。

B. 最小错误量子态判别

量子态判别是一种协议，旨在从一组先验 完全已知的候选态中识别出一个量子态。POVM框架能够以最优成功概率判别非正交态，而该概率取决于先验 量子态之间的距离。这自然引出了最小错误量子态判别，其目标是最大化正确猜测某个态的成功概率。

为准备讨论最小错误量子态判别，我们考虑一组 l 个不同的量子态 $\{\rho_n\}_{n=0}^{l-1}$ ，其对应的先验概率为 $\{q_n\}_{n=0}^{l-1}$。对量子态 ρ_n实施正算子值测度 $\{E_m\}$ 时，测量结果 m 的概率为 $p(m|n) = \mathrm{Tr}[E_m\rho_n]$。如果选取适当的正算子值测度，就能以较高的概率 $q_m p(m|m)$ 正确猜出量子态 ρ_m 。在此背景下，最小错误量子态判别旨在最小化错误概率

$$p_{error} = 1 - \sum_{m=0}^{l-1} q_m \,\mathrm{Tr}[\rho_m E_m], \tag{4}$$

其中最后一项表示给定正算子值测度 [27, 28]的成功概率。

如果仅实现正算子值测度的两个元素（$l = 2$）来区分两个不同的量子态，就可以解析地求得最优 POVM及其对应的最小错误概率，即式（4）所示的错误概率；在这种特殊情况下，该结果称为赫尔斯特伦界 $\mathcal{B}_H$ [7]。从式（4）出发，最小错误概率可改写为

$$\min p_{error} = \frac{1}{2} - \max_E \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}[E\Lambda] \tag{5}$$

其中，$E = E_0 - E_1$ 和 $\Lambda = q_0\rho_0 - q_1\rho_1$。通过谱分解，可得 $\Lambda = \lambda_+|\lambda_+\rangle\langle\lambda_+| + \lambda_-|\lambda_-\rangle\langle\lambda_-|$，其中 λ_+ 和 λ_- 分别表示 Λ的正特征值和负特征值。最优 POVM 可表示为 $E_0 = |\lambda_+\rangle\langle\lambda_+|$ 和$E_1 = |\lambda_-\rangle\langle\lambda_-|$。赫尔斯特伦界于是为$\mathcal{B}_H := \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,|\Lambda|$。

当 l 大于二时，使式（4）最小的正算子值测度集合通常没有解析解。相反，已知一组最优正算子值测度满足充要条件，这些条件表示为

$$E_m\left(q_m\rho_m - q_n\rho_n\right)E_n = 0 \tag{6}$$

$$\sum_{m=0}^{l-1} q_m E_m\rho_m - q_n\rho_n \geq 0 \tag{7}$$

对于任意 $m,\ n = 0,\ \cdots,\ l-1$ [7, 29, 30]。需要指出的是，这些条件彼此等价，并且与半定规划 [30]的对偶关系密切相关。最小错误量子态判别问题可以表述为半定规划。然而，半定规划的经典求解器所需的迭代次数会随目标量子比特数量呈指数增长，并随 POVM 元素数量呈多项式增长，如$O(2^{\omega n_T} l^{\omega})$所示，其中 ω 为常数，其取值范围为 2.37188 至 3，具体取值取决于矩阵乘法算法（见附录 B）。此外，目标函数涉及计算正算子值测度的结果概率，因此在经典计算中需要指数级运行时间。上述过程假设目标密度矩阵已完全知晓。若并非如此，则还需要进行量子态层析，这会增加另一层指数级复杂度。通过经典方法求解最小错误量子态判别的难处理性，促使人们开发用于该问题的量子算法。我们的方法将在下一节中介绍，其基础是训练参数化量子电路，旨在含噪中等规模量子（NISQ）设备 [31]上实现该方法。稍后，我们将使用半定规划的经典求解器，将其结果与变分量子态判别（VQSD）的结果进行比较 [32]。

III. 变分量子态判别

使用经典优化算法（例如基于梯度的方法）训练参数化量子电路，近来备受关注，尤其是作为有效利用含噪中等规模量子设备的一种手段。一般而言，我们将基于此类方法的算法称为变分量子算法（VQA） [33, 34]。在此，我们开发了一种 VQA，它能够以监督方式学习执行最小错误量子态判别。换言之，该 VQA 训练量子电路，使其针对给定的一组带标签量子态执行最优 POVM。我们将这种 VQA 称为变分量子态判别器（ VQSD）。尽管量子态的标签需要事先已知，但量子态本身可以完全未知，这使得所提出的算法有别于现有的量子态判别方法。

A. 代价函数

利用变分量子算法实现最小错误量子态判别的第一步，是建立一个合适的代价函数，使其能够判别不同的带标签集合，而不只是单个量子态。考虑一个由 N 个量子态组成、带有 l 个标签的集合，

$$\mathcal{D} = \{(|\Psi_n\rangle, y_n)|\, y_n \in \{0, \cdots, l-1\},\ 1 \leq n \leq N\}, \tag{8}$$

该集合被划分为 l 个互不相交的子集。具有相同标签 m 的量子态子集可表示为 $\mathcal{D}_m = \{(|\Psi_n\rangle,\ y_n)|y_n = m,\ \forall n \in \mathcal{N}_m\}$ 其索引集为 $\mathcal{N}_m = \{n|y_n = m,\ \forall n \in \mathbb{N}\}$。

为区分不同的输入态子集 $\mathcal{D}_m$ $\{|\Psi_n\rangle_I\}_n$，可以对每个输入态 $|\Psi_n\rangle_I$ 的全部 n_I 个输入量子比特或其中的 n_T 个（共 n_I 个量子比特）进行正算子值测度。后一种情况可视为测量由 n_T 个目标量子比特组成的目标子系统上 $|\Psi_n\rangle_I$ 的约化密度矩阵。该约化密度矩阵可写为 $\rho_{T,n} = \mathrm{Tr}_{\bar{T}}|\Psi_n\rangle_I\langle\Psi_n|$，，其中 $\bar{}$目标子系统的补集被迹掉。

对于给定的 $|\Psi_n\rangle_I$，可以在目标子系统上执行正算子值测度 E_m，从而得到测量结果 $p(m|n)$ 的概率 $= \mathrm{Tr}[E_m\rho_{T,n}] = {}_I\langle\Psi_n|E_m|\Psi_n\rangle_I$。对于给定的 $\mathcal{D}_m$，可以对同一类别中的量子态执行以 m 为测量结果的正算子值测度，并得到测量结果 m 的概率，$p(m|\mathcal{D}_m) := \sum_{n\in\mathcal{N}_m} {}_I\langle\Psi_n|E_m|\Psi_n\rangle_I/|\mathcal{N}_m|$，其中 $|\mathcal{N}_m|$ 是 $\mathcal{N}_m$ 的基数。此概率也可以理解为对混合态的目标子系统执行 E_m

$$\rho'_m = \sum_{n\in\mathcal{N}_m} |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|/|\mathcal{N}_m|, \tag{9}$$

它是子集 $\mathcal{D}_m$ 中所有状态的均匀混合态。

如上一节所述，可以在量子电路中对输入态进行正算子值测度。根据最小错误判别式 (4)，代价函数可表示为参数化量子电路的形式：

$$\begin{aligned} C(\Theta) &= 1 - \sum_{m=0}^{l-1} q_m p(m|\mathcal{D}_m) \\ &= 1 - \sum_{m=0}^{l-1}\sum_{n\in\mathcal{N}_m} \frac{1}{|\mathcal{D}|}\langle\Psi_n^0|\mathcal{E}_m(\Theta)|\Psi_n^0\rangle, \end{aligned} \tag{10}$$

其中，$|\Psi_n^0\rangle = |\Psi_n\rangle_I|\mathbf{0}\rangle_A$ 是所有量子比特的量子态，$q_m = |\mathcal{N}_m|/|\mathcal{D}|$是子集 $\mathcal{D}_m$ 的先验概率。最小化该代价函数可降低标签判别的错误率。这表明，变分量子态判别已通过一组量子态得到良好训练，并能根据

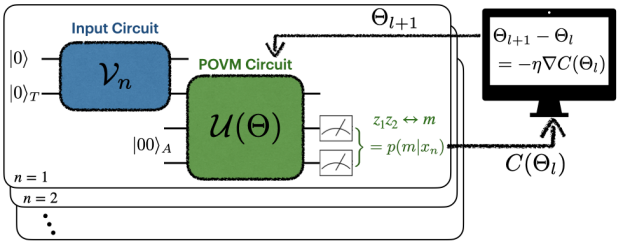


图2：变分量子态判别器示意图。输入电路制备一组任意量子态（纯态或混合态），并将其作为正算子值测度（POVM）的输入。本例中，双量子比特态的集合为 $\{\mathcal{V}_n|00\rangle\}_n$。随后，在输入态的目标量子比特上执行参数化 POVM 电路（本例中为 $n_T = 1$ 和 $n_I = 2$），并通过优化式（10）中给出的代价函数 $C(\Theta)$ 对其进行训练。

测量结果，按照标签 m对 $\mathcal{D}_m$中的子集进行最优区分。注意，当所有 m均满足 $|\mathcal{N}_m| = 1$ 时，式（10）中的代价函数$C(\Theta)$与式（4）中的错误概率 p_{error}相同。

B. 算法

VQSD算法的构建如下。首先，给定一组输入态 $\{|\Psi_n\rangle\}_{n\leq N}$，并将辅助量子比特制备为状态 $|\mathbf{0}\rangle_A$。请注意，该算法只需要标签信息，无需事先知道输入量子态。因此，它无需进行量子态层析。其次，参数化POVM电路 $\mathcal{U}(\Theta)$作用于 n_I 个输入量子比特中的 n_T个目标量子比特，这意味着可以对输入态 $|\Psi_n\rangle$的约化密度矩阵$\rho_{T,\ n}$ 执行正算子值测度。在含噪中等规模量子设备上实现时，较小的 n_T 更为理想。请注意，可以通过调整辅助量子比特的数量来控制正算子值测度产生的测量结果数量。第三，通过在计算基下测量辅助量子比特，得到正算子值测度的测量结果 m及其对应概率 $p(m|n)$。第四，根据测量结果 m 和概率$p(m|n)$构建式（10）中的代价函数，并使用经典优化器将其最小化。随后优化POVM电路中的参数向量 Θ，使正算子值测度的测量结果与输入态的标签相匹配。具有最优参数向量 Θ_{opt} 的训练后POVM电路$\mathcal{U}(\Theta_{opt})$可用作量子态判别器。因此，当输入一个未标记的输入态时，训练后的POVM电路及对辅助量子比特的测量会预测概率最高的标签。VQSD算法如图2所示。

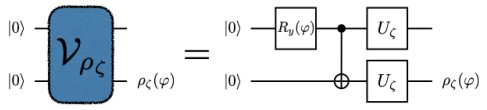


图3：输入态制备的电路图。(a) 通过利用处于状态 $\mathcal{V}_{\rho_\zeta}|00\rangle$ 的两个量子比特之一，可实现混合态 ρ_ζ。量子门 U_ζ 对应于三个 $U_x = H$、$U_y = HS$ 和 $U_z = I$ 之一。

C. 模拟与结果

我们通过经典模拟展示VQSD的性能。模拟使用 PennyLane [35], 进行，量子电路参数则通过梯度下降优化，并采用自适应矩估计（ADAM） [36]进行更新。

使用纯态和混合态对变分量子态判别进行测试。量子电路通过对纠缠态的一个子系统求迹来生成混合态。具体而言，模拟采用图3所示的量子电路，通过将 $\mathcal{V}_{\rho_\zeta}$ 应用于 $|00\rangle$ 来制备纠缠态。第二个量子比特上的约化密度矩阵记为 ρ_ζ，它是作为输入送入 POVM 电路的混合态。单量子比特混合态 ρ_ζ 的数学形式为

$$\rho_\zeta(\varphi) \equiv \cos^2\varphi|\zeta_+\rangle\langle\zeta_+| + \sin^2\varphi|\zeta_-\rangle\langle\zeta_-|, \qquad (11)$$

其中，$|\zeta_\pm\rangle$ 表示泡利矩阵σ_ζ 的本征态，$\zeta \in \{x, y, z\}$ 且 φ 参数化混合权重。ρ_ζ（φ）的布洛赫向量沿着布洛赫球的 ζ 轴。为了在量子电路中将混合态 ρ_ζ（φ）制备为输入，我们使用图3所示的双量子比特酉门 $\mathcal{V}_{\rho_\zeta}$，它由R_y、受控非门、哈达玛门和相移门组成。 R_y（φ）和受控非门 量子门生成纠缠态 $\cos\varphi|00\rangle + \sin\varphi|11\rangle$。每个量子比特上的 U_ζ 量子门将 z 基变换为 ζ基，即 $\cos\varphi|\zeta_+\zeta_+\rangle + \sin\varphi|\zeta_-\zeta_-\rangle$，其中 $U_z = I$、$U_x = H$和 $U_y = HS$。随后，在幺正操作$\mathcal{V}_{\rho_\zeta}$之后，我们仅保留一个量子比特；这表示第二个量子比特的约化密度矩阵 $\rho_2 = \mathrm{Tr}_1[\mathcal{V}_{\rho_\zeta}|00\rangle\langle 00|\mathcal{V}_{\rho_\zeta}^\dagger]$接受量子态判别。

结合图3所示的混合态量子电路（式(11)），我们制备了四组先验概率相等的量子态：$\{\rho_z(\pi/5)\ \rho_x(\pi/6)\}$,$\{|0\rangle, |1\rangle, |+\rangle\}$, $\{\rho_z(\pi/5)\ \rho_x(\pi/6)\ \rho_y(\pi/8)\}$，以及 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)\ |00\rangle,\ |{+}{+}\rangle\}$。随后，我们在条件 $m = n$ 下构建参数化POVM电路（式(2)）和代价函数（式(10)）。通过实施变分量子态判别，我们获得了代价函数的最小值，收敛容差约为 10^{-7}。其最小误差如图4所示。

为验证 VQSD 得到的解是否正确，我们将二态判别任务与 Helstrom 测量进行比较，并将三态判别任务与通过凸优化工具 [32] 求解的半定规划（SDP）进行比较。

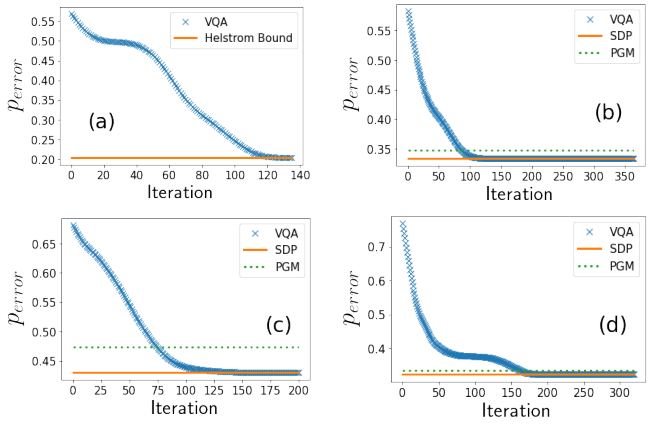


图4： 使用变分量子算法进行最小错误量子态判别。量子态集合给定为 (a) $\{\rho_z(\pi/5)\ \rho_x(\pi/6)\}$，(b) $\{|0\rangle,\ |1\rangle,\ |+\rangle\}$，(c)$\{\rho_z(\pi/5)\ \rho_x(\pi/6)\ \rho_y(\pi/8)\}$，以及 (d) $\{|00\rangle,\ |{+}{+}\rangle,\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle+|11\rangle)\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle+|10\rangle)\}$，并假设 *a priori* 概率相等。(a) 中的二态判别任务与 Helstrom 测量进行比较，(b) 至 (d) 中的三态判别任务则与半正定规划求解器和优良测量的结果进行比较。每幅图均显示，代价函数在约 100 至 150 次迭代后收敛至最小值。

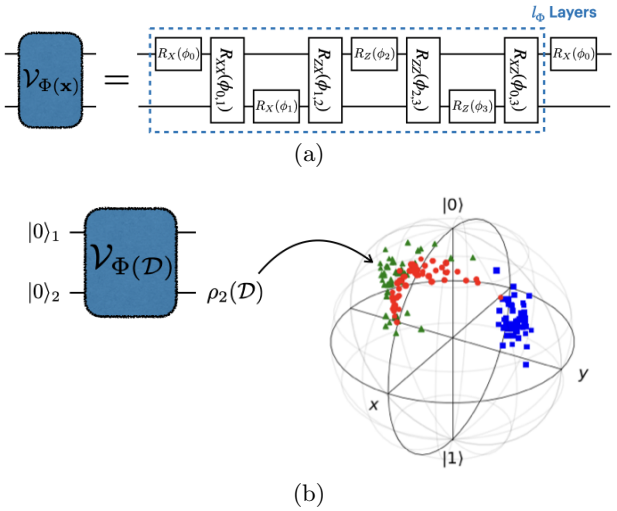


图 5： 量子特征映射的电路图，以及鸢尾花数据集在布洛赫球上的可视化。(a) 量子特征映射 $\mathcal{V}_\Phi$ 由单量子比特旋转和伊辛耦合门组成。该映射中量子门的顺序由它们之间的对易关系决定。(b) 布洛赫球上的混合态是数据的约化密度矩阵，$\rho_2(\mathcal{D}) = \mathrm{Tr}_1[\mathcal{V}_{\Phi(\mathcal{D})}|00\rangle\langle 00|\mathcal{V}^\dagger_{\Phi(\mathcal{D})}]$，其采用式（13）的编码函数。蓝色方形、红色圆形和绿色三角形分别对应数据标签 0、1 和 2。

经典 SDP 求解器与 VQSD 得到的两个最小误差之间的差异约为 10^{-6}，这证实了 VQSD 的有效性。我们还将本方法与定义为 $\Pi_m := q_m\rho^{-1/2}\rho_m\rho^{-1/2}$ 的优良测量（PGM）进行比较，该测量基于系综 $\rho = \sum_{n=0}^{l-1} q_n\rho_n$，在 $l > 2$ [37–39] 时是一个次优的 l 元 POVM。这种测量完全取决于量子态制备，其设计目的是以简单的方式收集量子系统的信息，并具有解析表达式，但不能保证全局最优性。对每组量子态执行 PGM 得到的错误概率见图 4(b)-(d)，这表明，对于最小误差量子态判别任务，最优 POVM 通常并非 PGM [40]。模拟结果证实，在所有实例中，VQSD 找到的测量都优于 PGM。

IV. 机器学习中的应用

A. 与分类的联系

现在，我们将 VQSD 用于分类。这是数据科学中无处不在的问题，可通过监督学习解决。 l类分类的训练数据集与式（8）中的 $\mathcal{D}$ 相同，只是 $|\Psi_n\rangle$ 表示嵌入为量子态的数据。利用该训练数据集，可以训练 VQSD 执行最小错误量子态判别，以区分式（9）中的ρ'_m 以及 $m \in \{0,\ldots,l-1\}$。训练完成后，将嵌入为量子态的测试数据输入 VQSD 电路，所得 POVM 元素对应于预测标签。

B. 模拟与结果

为展示 VQSD 在监督分类中的能力，我们使用 PennyLane 进行了经典模拟。该模拟使用鸢尾花数据集进行三分类。该数据集包含鸢尾花的四个属性（一个四维数据点 $\mathbf{x}_n$）和物种（类别标签 y_n），可表示为 $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_n, y_n)|\,\mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^4, y_n \in \{0,1,2\}, n = 1,\ldots,150\}$。每个类别的数据点数量相同（每类 50 个）。

将量子机器学习应用于经典数据，需要先将经典数据编码为量子态。为此，人们提出了多种方法，例如振幅编码、角度编码、哈密顿量编码和可训练量子编码 [8, 41–47]。在本次模拟中，我们根据 Havlíček 等人 [46], 的思路，对利用伊辛哈密顿量的瞬时量子多项式（IQP）编码进行了修改，以将一个四维数据点映射到双量子比特态。文献 [46, 48]提出的特征编码方法，将经典数据特征映射到伊辛哈密顿量的相互作用项。这使得我们使用单量子

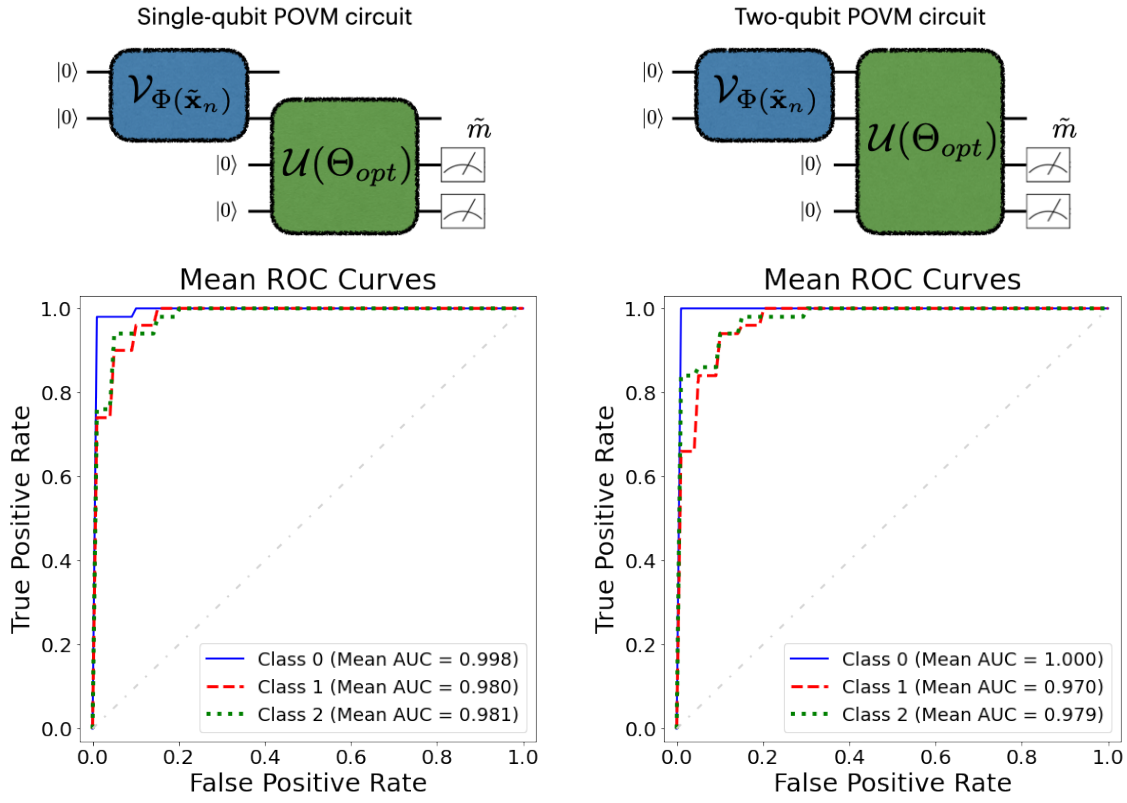


图6： 使用具有不同 n_T 的变分量子态判别器对鸢尾花数据分类进行受试者工作特征（ROC）分析：(a) 单量子比特（$n_T = 1$）正算子值测度电路和 (b) 双量子比特（$n_T = 2$）正算子值测度电路。对于每个类别，两个量子态判别器均展示了五折交叉验证所得的平均 ROC 曲线和平均曲线下面积。在每张图中，绘制了对应于 TPR=FPR 的对角线，作为视觉参考。

比特旋转门 $R_Z(\phi) = \exp(i\phi Z_i)$ 和双量子比特耦合门 $R_{ZZ}(\phi) = \exp(i\phi Z_i Z_j)$，将一个二维输入向量嵌入两个量子比特中。除了 Z 算符外，我们还使用 X 算符，因为我们希望将四个数据特征编码到一个双量子比特态中 $|\Psi_n\rangle = |\Phi(\mathbf{x}_n)\rangle = \mathcal{V}_{\Phi(\mathbf{x}_n)}|00\rangle$。量子特征映射定义为 $\mathcal{V}_\Phi = (V_\Phi)^{l_\Phi} e^{i\phi_1 P_1}$，其中

$$V_\Phi = \prod_{\gamma=1}^{4} e^{\phi_{\gamma,\gamma+1} P_\gamma \cdot P_{\gamma+1}} e^{i\phi_\gamma P_\gamma}, \tag{12}$$

ϕ 是包含经典信息的系数，l_Φ 是层数，而 P_γ 是集合 $\{X\otimes I, I\otimes X, Z\otimes I, I\otimes Z\}$的第 γ个元素。我们不在编码层之间插入哈达玛门，因为每一层都已包含非对易项。$\mathcal{V}_\Phi$ 的电路图如图5(a)所示。在用于 $\mathcal{V}_\Phi$的量子电路中，我们使用编码函数 $\phi(\mathbf{x})$将数据$\mathbf{x}_n$ 编码到系数 ϕ 中。量子特征映射 $\mathcal{V}_\Phi$ 中的耦合需要数据点属性之间相关性的信息。将经典数据点$\mathbf{x}$ 编码到系数 ϕ中有多种方法。我们测试了文献 [46, 48],中提出的所有编码函数并发现以下两种类型对鸢尾花数据分类的效果最好。

$$\phi_j(\mathbf{x}) = x_j, \quad \phi_{i,j}(\mathbf{x}) = \frac{\pi}{3\cos(x_i)\cos(x_j)} \tag{13}$$

$$\phi_j(\mathbf{x}) = x_j, \quad \phi_{i,j}(\mathbf{x}) = \exp\left(\frac{|x_i - x_j|^2}{8/\ln(\pi)}\right) \tag{14}$$

因此，本节的模拟结果均基于上述编码函数获得。

在希尔伯特空间中进行编码之前，先对鸢尾花数据集进行预处理，将每个属性重缩放至范围 $[-\pi/5, \pi/5]$。经经验验证，这种重缩放与两种编码函数结合使用时效果良好。此处使用的重缩放映射定义为

$$x'_{n,\alpha} = \frac{\pi}{5}\frac{2x_{n,\alpha} - (x_{\min,\alpha} + x_{\max,\alpha})}{x_{\max,\alpha} - x_{\min,\alpha}}, \tag{15}$$

其中，$x_{\min,\ \alpha} := \min_n x_{n,\ \alpha}$ 且 $x_{\max,\ \alpha} := \max_n x_{n,\ \alpha}$ 分别表示每个属性 $\alpha \in \{0, 1, 2, 3\}$的最小值和最大值。接下来，利用量子特征映射 $\mathcal{V}_\Phi$ 以及编码函数 Eq.(13) 和 Eq.(14)，将缩放后的数据点 $\mathbf{x}'_n$ 嵌入量子态 $|\Psi_n\rangle = \mathcal{V}_{\Phi(\mathbf{x}'_n)}|00\rangle$ 中。此处，编码电路 $\mathcal{V}_\Phi$ 的层数根据经验选定为 $l_\Phi = 2$。

结合这种量子数据编码，我们在变分量子算法中采用参数化量子电路的两种不同结构：单量子比特 POVM 电路（$n_T = 1$）和双量子比特 POVM 电路（$n_T = 2$），其示意图分别如图6(a)和(b)所示。前者根据经验选用编码函数 Eq.(13)，后者则选用 Eq.(14)。在这两种情况下，在计算基下测量两个辅助量子比特，最多可得到四种正算子值测度的测量结果。

为评估 VQSD 的分类性能，我们采用分层五折交叉验证方法。具体而言，我们先将鸢尾花数据集打乱，按照测试数据与训练数据 1:4 的比例划分数据集，并在全部五个划分上进行监督分类。VQSD 的分类性能以交叉验证过程中五次分类的平均测试性能来衡量。每次验证使用两个指标来确定测试性能：准确率和受试者工作特征（ROC）曲线下面积。下文将介绍我们算法中这些指标的计算过程。

首先，给定一个未标记的数据点 $\tilde{\mathbf{x}}$，量子态判别器会根据决策规则预测相应的标签 $\tilde{y} = \tilde{m}(\tilde{\mathbf{x}})$。决策规则会从正算子值测度的所有可能测量结果中，选取概率最高的标签，即

$$\tilde{m}(\tilde{\mathbf{x}}) = \arg\max_{m} p(m|\tilde{\mathbf{x}}), \tag{16}$$

其中，$p(m|\tilde{\mathbf{x}}) = \langle \Phi(\tilde{\mathbf{x}})|\mathcal{E}_m(\Theta_{opt})|\Phi(\tilde{\mathbf{x}})\rangle$ 表示对 $|\Phi(\tilde{\mathbf{x}})\rangle$ 进行正算子值测度时获得测量结果 m 的概率。对于一个标签 $\tilde{\mathcal{D}} = \{(\tilde{\mathbf{x}}_n,\ \tilde{y}_n)|\ \tilde{\mathbf{x}}_n \in \mathbb{R}^4,\ \tilde{y}_n \in \{0,1,2\},\ \forall n \in \mathbb{N}\}$已知的测试数据集，可以通过计算准确率 $\tilde{\text{racy}} \sum_n \delta_{\tilde{m}(\tilde{\mathbf{x}}_n)\ \tilde{y}_n}/|\mathcal{D}|$，考察量子模型的预测中有多少标签与真实标签相符。在五折交叉验证中，单量子比特 POVM 电路的平均准确率为 0.893，双量子比特 POVM 电路的平均准确率为 0.920。

第二种衡量指标是 ROC 曲线及曲线下面积（AUC）。虽然该指标是为二分类设计的，但我们可以通过一对其余方案将其应用于多分类。将多分类问题转化为一对其余的二分类问题后，为测试数据分配一个标签，该标签对应的概率高于预先设定的阈值。随后，可在该阈值下评估真阳性率和假阳性率。通过改变阈值，即可绘制 ROC 曲线。ROC 曲线离对角线越远，分类器的性能就越好。因此，可以用 ROC 曲线下面积（AUC）量化分类器的性能，其取值范围为 0.5 至 1；ROC 曲线的 AUC 越大，分类器的性能越好。图6展示了通过五折交叉验证得到的 VQSD 的平均 ROC 曲线。每幅图中有三条 ROC 曲线，分别对应一对其余二分类的三种不同组合。采用单量子比特和双量子比特 POVM 电路的 VQSD 分类器均表现出优异的分类性能，平均 AUC 的范围为 0.97 至 1，平均值为 0.985。

V. 结论与讨论

我们提出了变分量子态判别（VQSD），这是一种用于执行最小错误量子态判别的变分量子算法。该算法利用余弦-正弦分解设计参数化POVM电路，并采用基于量子态判别理论推导的代价函数来训练电路。

变分量子态判别能够在不了解目标态的情况下学习解决态判别任务。结果表明，该方法与半定规划方法同样有效。我们提出了一种基于变分量子态判别的多分类算法，并使用鸢尾花数据集展示了其效果。在该数据集上进行的数值模拟所得受试者工作特征曲线下面积介于0.97至1之间，展现出卓越的性能。

与经典半定规划求解器相比，变分量子态判别具有多项优势。与求解半定规划的经典算法不同，变分量子态判别无需通过量子态层析获取量子态的完整信息。此外，变分量子态判别的计算复杂度为 $O(2^{2n_T}l)$个受控非门，而经典半正定规划求解器的复杂度为 $O(2^{\omega n_T}l^{\omega})$，其中 ω 取决于矩阵乘法算法，范围为2.37188至3。此外，经典优化流程还需额外执行一步，以找到用于实现量子态判别的相应量子电路。这些优势使变分量子态判别在计算量子态上正算子值测度的概率以及判别多个量子态方面，比经典半正定规划求解器更高效。

VQSD 可通过判别编码了待分类数据的混合态，在监督式机器学习中充当多分类器。由于量子态可以表示 $O(2^{n_T})$ 个特征 [42, 43,45, 47, 49], ，VQSD 电路在数据特征数量方面具有较高效率。VQSD 通过同步数据标签与测量结果，对多分类数据集进行分类；对于 l 个数据标签，需要 $\lceil \log_2 l \rceil$ 个辅助量子比特。此外，现有的量子数据压缩技术，例如量子卷积神经网络（QCNN） [50–52] 和量子自编码器（QAE） [53, 54] ，可以减少目标量子比特的数量。这使多分类所需的量子电路规模得以缩减，从而更便于在含噪中等规模量子设备上实现。以这种方式将 VQSD 用于多分类，是应对在量子计算设备上实现多分类所面临挑战的一种颇具前景的方法。

通过引入适当的代价函数，可以提升变分量子态判别的性能。对于两个以上量子态的最小错误量子态判别

策略，一个已知问题是它可能产生取值为零的正算子值测度，如 [28]中所述。图4(b)展示了这一问题也可能出现在变分量子态判别的实现中。此处，最优正算子值测度为 $E_0 = |0\rangle\langle 0|$, $E_1 = |1\rangle\langle 1|$, 和$E_2 = 0$，因此难以判别量子态$|+\rangle$。因此，基于变分量子态判别的多分类器可能会丢失一个数据标签。为解决这一问题，还需进一步研究其他量子态判别策略，例如最大置信度判别。另一种探索方向是将变分量子态判别集成到现有量子机器学习算法中，作为其中的分类器，例如 QCNN、QAE 和量子生成对抗网络 [55–57]。如前所述，QCNN 和 QAE 可以通过减少量子态判别所需的目标量子比特数量来与变分量子态判别互为补充判别，从而降低量子电路的深度。此外，探索将变分量子态判别应用于无监督数据聚类，是未来研究一个颇具吸引力的方向。

致谢

本研究由2022年延世大学研究基金（2022-22-0124）、韩国国家研究基金会（2021M3E4A1038308、2021M3H3A1038085、2022M3H3A106307411和2022M3E4A1074591）以及KIST机构项目（2E32241-23-010）资助。我们感谢 Israel Ferraz de Araujo 就门分解和量子电路复杂度相关主题所进行的富有见地的讨论。

[1] Charles H. Bennett。利用任意两个非正交态进行量子密码学。 *Phys. Rev. Lett.*，68：3121– 3124，1992年5月。[2] Lu-Ming Duan 和 Guang-Can Guo。线性无关量子态的概率克隆与识别。 *Phys. Rev. Lett.*，80：4999–5002，1998年6月。[3] Anthony Chefles。量子态判别。 *Contemporary Physics* 41 6 401 424, 2000 ，( ): – 。[4]Gael Sent´ıs 、 Alex Monr`as 、 Ramon Mu˜noz Tapia 、 John Calsamiglia 和 Emilio Bagan。量子数据的无监督分类。 *Phys. Rev. X*，9：041029，2019年11月。[5] Michael A. Nielsen 和 Isaac L. Chuang。 *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition* 。剑桥大学出版社，美国纽约州纽约市，第10版，2011年。[6] John Watrous。*The Theory of Quantum Information*。剑桥大学出版社，2018年。[7] Carl W. Helstrom。量子检测与估计理论。 *Journal of Statistical Physics*，1(2)：231–252，1969年6月。[8] Seth Lloyd、Maria Schuld、Aroosa Ijaz、Josh Izaac 和 Nathan Killoran。用于机器学习的量子嵌入，2020年。[9] H. Chen、L. Wossnig、S. Severini、H. Neven 和 M. Mohseni。通用判别式量子神经网络。 *Quantum Machine Intelligence*，3(1)：1，2020年。[10] Andrew Patterson、Hongxiang Chen、Leonard Wossnig、Simone Severini、Dan Browne 和 Ivan Rungger。利用含噪量子神经网络进行量子态判别。 *Phys. Rev. Research*，3：013063，2021年1月。[11]量子启发算法是指在经典硬件上执行、但采用量子力学数学形式体系的算法。[12] Giuseppe Sergioli、Roberto Giuntini 和 Hector Freytes。一种新的二分类量子方法。 *PLOS ONE* 14 5 1 14, 05 2019 ，( ): – 。[13]Roberto Giuntini 、 Hector Freytes 、 Daniel K Park 、 Carsten Blank、Federico Holik、Keng Loon Chow 和 Giuseppe Sergioli。用于监督分类的量子态判别。 *arXiv preprint arXiv:2104.00971*，2021年。

[14] Roberto Giuntini、Federico Holik、Daniel K. Park、Hector Freytes、Carsten Blank 和 Giuseppe Sergioli。用于直接多类别分类的量子启发算法。 *Applied Soft Computing*，134:109956，2023年。[15] M. A. Naimark、A. I. Loginov 和 V. S. Shul'man。希尔伯特空间中的非自伴算子代数。 *Journal of Soviet Mathematics* 5 2 250 278, 1976 ，( ): – 。[16] Asher Peres。Neumark 定理与量子不可分性。 *Foundations of Physics*，20(12):1441–1453，1990年。[17] Raban Iten、Roger Colbeck 和 Matthias Christandl。用于量子信道的量子电路。 *Physical Review A* 95 5 052316, 2017 ，( ): 。[18] Yordan S. Yordanov 和 Crispin H. W. Barnes。在基于电路的量子计算机上实现一般单量子比特正算子值测量。*Phys. Rev. A*，100:062317，2019年12月。[19] Robert R Tucci。初级量子编译器（第2版）。 *arXiv preprint quant-ph/9902062*，1999年。[20] V. V. Shende、S. S. Bullock 和 I. L. Markov。量子逻辑电路的综合。 *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems* 25 6 1000 1010, 2006 ，( ): – 。[21] Emanuel Knill。量子电路近似。 *arXiv preprint quant-ph/9508006*，1995年。[22] Raban Iten、Roger Colbeck、Ivan Kukuljan、Jonathan Home 和 Matthias Christandl。用于等距算子的量子电路。 *Physical Review A*，93(3):032318，2016年。[23] Mikko M¨ott¨onen、Juha J. Vartiainen、Ville Bergholm 和 Martti M. Salomaa。一般多量子比特门的量子电路。*Physical Review Letters*，93 13( ):130502，2004年。[24] Vivek V. Shende、Igor L. Markov 和 Stephen S. Bullock。基于受控非门的最小通用双量子比特电路。 *Physical Review A*，69(6):062321，2004年。[25] Farrokh Vatan 和 Colin Williams。一般双量子比特门的最优量子电路。 *Physical Review A*，69 3( ):032315，2004年。[26] G. Vidal 和 C. M. Dawson。利用三个受控非门实现双量子比特变换的通用量子电路。 *Physical Review A*，69(1):010301，2004年。[27] Stephen M. Barnett 和 Sarah Croke。量子态判别。 *Adv. Opt. Photon.*，1(2):238–278，4月

2009年。[28] Joonwoo Bae 和 Leong-Chuan Kwek。量子态判别及其应用。 *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 48 8 083001, 2015 , ( ): 1月。[29] Alexander S Holevo。量子系统的统计决策理论。 *Journal of multivariate analysis*, 3(4):337–394, 1973年。[30] Horace Yuen、Robert Kennedy 和 Melvin Lax。量子探测理论中多重假设的最优检验。 *IEEE Transactions on Information Theory*, 21 2 125( ): –134, 1975年。[31] John Preskill。含噪中等规模量子时代及其未来的量子计算。 *Quantum*, 2:79, 2018年8月。[32] Steven Diamond 和 Stephen Boyd。CVXPY：一种嵌入 Python 的凸优化建模语言。 *Journal of Machine Learning Research*, 17(83):1–5, 2016年。[33] M. Cerezo、Andrew Arrasmith、Ryan Babbush、Simon C. Benjamin、Suguru Endo、Keisuke Fujii、Jarrod R. McClean、Kosuke Mitarai、Xiao Yuan、Lukasz Cincio 和 Patrick J. Coles。变分量子算法。 *Nature Reviews Physics* 3 9 625 644, 2021 , ( ): – 。[34]Kishor Bharti、Alba Cervera-Lierta、Thi Ha Kyaw、Tobias Haug、Sumner Alperin-Lea、Abhinav Anand、Matthias Degroote、Hermanni Heimonen、Jakob S. Kottmann、Tim Menke、Wai-Keong Mok、Sukin Sim、Leong-Chuan Kwek 和 Al´an Aspuru-Guzik。含噪中等规模量子算法。 *Rev. Mod. Phys.* 94 015004, 2022 , : 2月。[35]Ville Bergholm、Josh Izaac、Maria Schuld、Christian Gogolin、M Sohaib Alam、Shahnawaz Ahmed、Juan Miguel Arrazola、Carsten Blank、Alain Delgado、Soran Jahangiri 等。PennyLane：量子-经典混合计算的自动微分。 *preprint arXiv:1811.04968* 2018 , 。[36] Diederik P Kingma 和 Jimmy Ba。Adam：一种随机优化方法。 *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, 2014年。[37] Lane P. Hughston、Richard Jozsa 和 William K. Woot- ters。对具有给定密度矩阵的量子系综的完整分类。 *Physics Letters A*, 183(1):14–18, 1993年。[38] Paul Hausladen 和 William K. Wootters。用于区分量子态的“相当不错的”测量。 *Journal of Modern Optics*, 41(12):2385–2390, 1994年。[39] Masashi Ban、Keiko Kurokawa、Rei Momose 和 Os- amu Hirota。对称量子态判别和参数估计的最优测量。 *International Journal of Theoretical Physics*, 36 6 1269( ): –1288, 1997年。[40] Erika Andersson、Stephen M. Barnett、Claire R. Gilson 和 Kieran Hunter。三个镜像对称态之间的最小错误判别。 *Physical Review A*, 65 5 052308, 2002年 ( ): 。[41] Maria Schuld 和 Francesco Petruccione。 *Machine Learning with Quantum Computers* 。《量子科学与技术》。施普林格国际出版社，第2版，2021年。[42] Israel F. Araujo、Daniel K. Park、Francesco Petruccione 和 Adenilton J. da Silva。一种用于量子态制备的分而治之算法。 *Scientific Reports*, 11 1 2021 6329, ( ): 3月。[43] T. M. L. Veras、I. C. S. De Araujo、K. D. Park 和 A. J. da Silva。用于具有连续振幅的经典数据的基于电路的量子存储器。 *IEEE Transactions on Computers*, 第 1–1 页, 2020年。[44] Ryan LaRose 和 Brian Coyle。用于量子分类器的鲁棒数据编码。 *Phys. Rev. A*, 102:032420, 2020年9月。[45]Israel F Araujo、Daniel K Park、Teresa B Ludermir、Wilson R Oliveira、Francesco Petruccione 和 Adenil- ton J da Silva。用于量子态制备的可配置次线性电路。 *Quantum Information Processing*, 22 2( ):123, 2023年。[46] Vojtech Havl´ıcek、Antonio D. C´orcoles、Kristan Temme、Aram W. Harrow、Abhinav Kandala、Jerry M. Chow 和 Jay M. Gambetta。利用量子增强特征空间进行监督学习。 *Nature* 567 7747 209 212, , ( ): – 。2019 [47] Carsten Blank、Adenilton J da Silva、Lucas P de Albuquerque、Francesco Petruccione 和 Daniel K Park。紧凑型量子核二分类器。 *Quantum Science and Technology* 7 4 045007, 2022 , ( ): jul 。[48]Yudai Suzuki、Hiroshi Yano、Qi Gao、Shumpei Uno、Tomoki Tanaka、Manato Akiyama 和 Naoki Yamamoto。核量子分类器特征映射的分析与合成。 *Quantum Machine Intelligence* 2 1 9, 2020 , ( ): 。[49] Vittorio Giovannetti、Seth Lloyd 和 Lorenzo Maccone。量子随机存取存储器。*Phys. Rev. Lett.*, 100 160501, 2008年: 4月。[50] Iris Cong、Soonwon Choi 和 Mikhail D. Lukin。量子卷积神经网络。*Nature Physics*, 15 12 1273 1278, 2019年( ): –12月。[51] Ian MacCormack、Conor Delaney、Alexey Galda、Nidhi Aggarwal 和 Prineha Narang。分支量子卷积神经网络。*Phys. Rev. Research*, 4 2022 013117, : 2月。[52] Tak Hur、Leeseok Kim 和 Daniel K. Park。用于经典数据分类的量子卷积神经网络。 *Quantum Machine Intelligence*, 4(1):3, 2022年。[53] Jonathan Romero、Jonathan P Olson 和 Alan Aspuru-Guzik。用于高效压缩量子数据的量子自编码器。 *Quantum Science and Technology*, 2 4 2017 045001, ( ): 8月。[54] Dmytro Bondarenko 和 Polina Feldmann。用于量子数据去噪的量子自编码器。 *Phys. Rev. Lett.*, 124 2020 130502, : 3月。[55] Seth Lloyd 和 Christian Weedbrook。量子生成对抗学习。 *Phys. Rev. Lett.*, 121:040502, 2018年7月。[56] Pierre-Luc Dallaire-Demers 和 Nathan Killoran。量子生成对抗网络。*Phys. Rev. A*, 98 2018：012324, 7月。[57] He-Liang Huang、Yuxuan Du、Ming Gong、Youwei Zhao、Yulin Wu、Chaoyue Wang、Shaowei Li、Futian Liang、Jin Lin、Yu Xu、Rui Yang、Tongliang Liu、Min-Hsiu Hsieh、Hui Deng、Hao Rong、Cheng-Zhi Peng、Chao-Yang Lu、Yu-Ao Chen、Dacheng Tao、Xiaobo Zhu 和 Jian-Wei Pan。用于图像生成的实验性量子生成对抗网络。 *Phys. Rev. Appl.*, 16:024051, 2021年8月。[58] Ville Bergholm、Juha J. Vartiainen、Mikko M¨ott¨onen 和 Martti M. Salomaa。具有均匀受控单量子比特门的量子电路。 *Physical Review A*, 71 5 052330, 2005年( ): 。[59] Erika Andersson 和 Daniel K. L. Oi。用于广义测量的二叉搜索树。 *Physical Review A*, 77(5):052104 , 2008年。

[60] Eric Chitambar 和 Gilad Gour。量子资源理论。 *Rev. Mod. Phys.*，91:025001，2019年4月。[61] A. C. Doherty、Pablo A. Parrilo 和 Federico M. Spedalieri。区分可分态与纠缠态。 *Phys. Rev. Lett.*，88:187904，2002年4月。[62] D Cavalcanti 和 P Skrzypczyk。量子导引：聚焦于半定规划的综述。*Reports on Progress in Physics* 80 2 024001, 2016 , （）：12月。[63] Alexander Streltsov、Gerardo Adesso 和 Martin B. Plenio。专题综述：作为资源的量子相干性。 *Rev.*：10月。 *Mod. Phys.* 89 041003, 2017
[64] Alexei Gilchrist、Nathan K. Langford 和 Michael A. Nielsen。用于比较实际量子过程与理想量子过程的距离度量。 *Phys. Rev. A*，71:062310，2005年6月。[65] Yin Tat Lee、Aaron Sidford 和 Sam Chiu-wai Wong。更快速的切割平面法及其对组合优化和凸优化的影响。*56th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* 1049 1065, 2015 , 页码–。 *2015 IEEE*

附录A：POVM电路的分解。

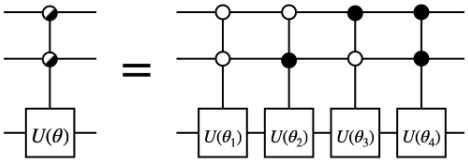
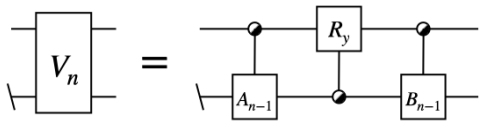


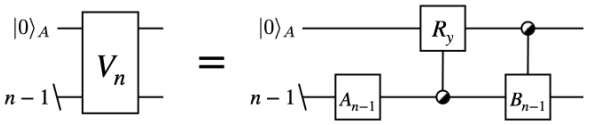
图7：均匀受控量子门 [23, 58]。它是由四个双重受控 U 量子门组成的双重均匀受控量子门 $U(\boldsymbol{\theta})$，每个量子门的角度 θ_i各不相同。参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 包含所有 i对应的角度 θ_i 。白色控制量子比特表示幺正操作 R 仅在控制量子比特处于状态 $|0\rangle$时才会被施加。

我们基于余弦-正弦分解（CSD），展示图1中电路结构 $\mathcal{U}$ 的推导。CSD与酉算子的奇异值分解（SVD）密切相关。考虑任意一个 $2^n\times2^n$ 酉算子 $V_n\in$U(n)，将其划分为四个分块，如2×2矩阵的形式所示。对每个分块进行SVD，从而得到CSD；酉算子V_n 的电路图可表示为



$$V_n=\left(\begin{array}{c|c}B_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & B_{n-1}^{(1)}\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}C & -S\\ \hline S & C\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}A_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & A_{n-1}^{(1)}\end{array}\right). \quad \text{(A1)}$$

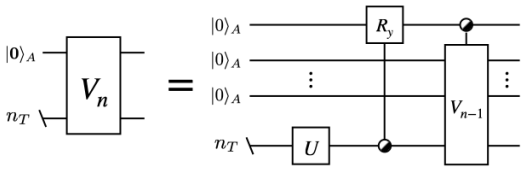
双重均匀受控的 A_{n-1} （B_{n-1}）量子门对应于（A1）中分解矩阵的第一（第三）个矩阵，其中 $A_{n-1}^{(0)}$、$A_{n-1}^{(1)}$（$B_{n-1}^{(0)}$、$B_{n-1}^{(1)}$）分别为左（右）来自 SVD 的维度为 $2^{n-1}\times2^{n-1}$ 的酉算符。（$n-1$）重均匀受控的 R_y 量子门对应于公式（A1）中的第二个分解矩阵，其中涉及两个不同的奇异值矩阵 $C=diag$（cos φ_1、$\cdots$、cos $\varphi_{2^{n-1}}$）和 $S=diag$（sin φ_1、$\cdots$、sin $\varphi_{2^{n-1}}$），其旋转角为 φ_i，位于 R_y量子门中。当一个辅助量子比特最初处于状态$|0\rangle$时，V_n 的 CSD 可简化为



$$\begin{aligned}V_n&=\left(\begin{array}{c|c}B_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & B_{n-1}^{(1)}\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}C & -S\\ \hline S & C\end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c}A_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & A_{n-1}^{(1)}\end{array}\right)\\&=\left(\begin{array}{c|c}B_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & B_{n-1}^{(1)}\end{array}\right)\left(\begin{array}{c}C\\ \hline S\end{array}\right)A_{n-1}^{(0)}, \quad \text{(A2)}\end{aligned}$$

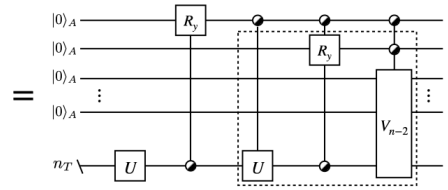
其中包含不带控制的（$n-1$）量子比特幺正操作 R_{n-1} [22]。

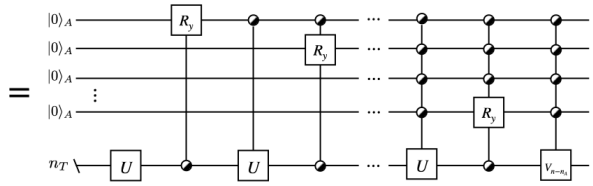
基于（A2），我们在此展示图1中的电路分解 $\mathcal{U}=V_n$ 。考虑到初始处于状态 $|\mathbf{0}\rangle_A$ 的 n_A 个辅助量子比特，可以将任意酉算子 V_n 分解为，



$$V_n=\left(\begin{array}{c|c}V_{n-1}^{(0)} & \\ \hline & V_{n-1}^{(1)}\end{array}\right)\left(\begin{array}{c}C\\ \hline S\end{array}\right)U, \quad \text{(A3)}$$

其中，U 是一个 $2^{n_T}\times2^{n_T}$ 的酉算子，对应于对V_n执行 SVD 后得到的右酉矩阵；C （或 S）是满足 $C_{ii}=\cos\varphi_i$ （或 $S_{ii}=\sin\varphi_i$）的 $2^{n_T}\times2^{n_T}$ 对角矩阵，而 $V_{(z_1)\ n-1}$对于任意$z_1\in\{0,1\}$，$2^{n-1}\times2^{n-1}\times2^{n-1}\times2^{n-1}$的酉算子均满足$n=n_T+n_A$。$V^{(z_1)\ n-1}$ 具体由 2^{n_T}列由 V_n 的左奇异向量确定的向量以及任意的 2^{n_A-1} 列组成。(A3)中的第二个分解矩阵的每个块都包含 $2^{n_A-1}-1$ 个维数为 2^{n_T} [17]的零矩阵。递归使用 (A3)，可以对酉算子 V_n 进行分解，直到得到 V_{n_T}，





因此，省略末尾的 n_A 重均匀受控 V_{n_T}量子门后，这些电路的结构与图1中的完全相同；省略该量子门并不会损失在 n_T量子比特态上执行正算子值测度的一般性。此外，通过交换控制与测量的顺序，还可以进一步简化电路，从而减少受控非门 的数量，并且只需在量子门 U [9, 17, 59]中考虑它。

附录 B：最小错误量子态判别的半定规划

半定规划（SDP）为量子信息理论的众多应用提供数值解 [6]。例如，在凸量子资源理论 [60] 中，半定规划可用于计算量化量子资源的单调量，例如纠缠[61]、导引[62] 和相干性[63], ，还可用于计算判别任务[28, 64]中的最小错误判别。

（原始）半定规划的表述如下：

$$\begin{aligned} &\text{Minimize} && \mathrm{Tr}[\mathcal{C}X], \\ &\text{subject to} && \mathrm{Tr}[\mathcal{A}_j X] \leq b_j \text{ for } j = 0, ..., k-1, \\ & && X \geq 0, \end{aligned} \tag{B1}$$

其中，对于所有整数 j，给定厄米矩阵 $\mathcal{C}$，$\mathcal{A}_j$ 和实数 b_j 。目标函数在维数为 $h \times h$ 的半正定矩阵 X 上进行最小化。近年来，求解半定规划的方法已知其运行时间为 $O(k(k^2 + h^\omega + ks)\log(1/\epsilon))$，其中常数 ω 是矩阵乘法算法的指数， s 是给定矩阵的稀疏性（$\mathcal{C}$， $\mathcal{A}_0$，$\cdots$， $\mathcal{A}_{k-1}$），而 ϵ 是解的准确率[65]。

第 II B 节中的最小错误判别任务可以在半定规划的框架下理解。通过考虑 $\mathcal{C} := \bigoplus_{j=0}^{l-1} -q_j\rho_j$ 和 $X = \bigoplus_{j=0}^{l-1} E_j$，错误概率 Eq.(4) 等价于半定规划的目标函数。此外，正算子值测度的完备性可表示为 (B1) 中的等式约束 $\mathrm{Tr}[X] = h/l$ 。如果量子系统定义在 d 维希尔伯特空间上，则维数 h 由 d 和l相乘得到。值得注意的是，在本工作中，半定规划的计算复杂度关于希尔伯特空间的维数d 为多项式时间，但关于目标量子比特的数量n_T 则为指数级。此外，要构建半定规划，必须明确指定态的精确形式，也就是说，需要进行量子态层析（QST）。另一方面，我们的框架不涉及量子态层析，因为参数优化是在没有态信息的情况下进行的。因此，这一特性使我们能够直接将变分量子算法用于机器学习，以寻找最优POVM。