arXiv:2303.05488v2 [quant-ph] 9 Nov 2023

面向非线性与混沌时间序列预测的量子噪声诱导储备池计算优化

Daniel Fry[1,*], **Amol Deshmukh**[1], **Samuel Yen-Chi Chen**[2], **Vladimir Rastunkov**[1], 和 **Vanio Markov**[2]

[1]IBM Quantum，Thomas J. Watson Research Center，美国纽约州约克镇高地[2]富国银行，纽约东 42 街 150 号，纽约州纽约市 10017，美国[*]主要电子邮箱：daniel.fry@ibm.com，备用电子邮箱：danielfry1988@gmail.com

摘要

量子储备池计算正迅速兴起，应用于量子机器学习中的序列数据和时间序列数据预测。我们改进了量子噪声诱导储备池：利用储备池噪声作为资源生成丰富的非线性信号，并通过单个线性输出层高效学习这些信号。针对量子储备池调优的需求，我们提出了一种新颖且普遍适用的量子电路参数化方法，将可调噪声模型编入量子储备池电路，使其能够得到全面控制并实现有效优化。我们的系统方法还减少了量子储备池电路中的量子比特数量和纠缠方案复杂度。结果表明，仅使用单个噪声模型和较小的记忆容量，在包括 Mackey-Glass 系统在内的非线性基准测试中，即使是在极具挑战性的混沌状态下进行 100 步超前预测，也能获得出色的仿真结果。

引言

近年来，量子计算与机器学习相结合，形成了一个快速发展的跨学科领域，并有望借助量子优势带来巨大变革。量子机器学习（QML）这一新兴领域旨在进一步革新许多领域；这些领域目前正因机器学习和人工智能的新方法而经历实质性变革。对商业和研究至关重要的一个领域，是对序列时间序列数据进行预测，这对金融、商业、经济学、气候学、气象学和生态学都至关重要。

储备池计算（RC）是一种时间序列预测范式，借鉴了循环神经网络的一些成功特性，例如序列记忆；同时，通过固定储备池权重，仅保留单个可训练的输出层，大幅提高了训练效率[1–6]。储备池计算非常适用于动力系统建模，并已被证明是序列函数的通用逼近器[7]。储备池计算的量子增强版本（QRC）利用量子储备池，而量子储备池可以是自然的量子多体系统，也可以是可编程量子计算机电路。QRC通过采用具有指数级更大计算空间和更高复杂度的量子储备池，为实现时间序列预测的量子优势提供了一条途径。

已经开发出许多量子储备池计算框架，据此可在更高层次上对量子储备池计算算法进行分类。例如，量子储备池计算的储备池节点已通过量子基态[8,9]实现，而非使用量子比特或量子多能级比特。一种此类新颖框架采用量子-经典混合循环神经网络（例如量子长短期记忆网络（QLSTM））作为储备池[10]。量子储备池计算的储备池可以直接基于已知的量子系统模型，也可以基于硬件高效量子特征映射设计；本研究属于后一类。本研究聚焦于含噪或耗散量子储备池，这一方向最早由文献[11–13]提出。此外，我们展示了一种成功且新颖的量子储备池优化方法，其他方案则已在文献[14–16]中进行探索。

量子储备池计算已应用于许多预测任务，包括非线性时间序列预测[10,11]，、时间序列分类[11]、图像识别[17]，、股票市场价值[14]和波动率预测[15]。在量子信息科学领域，量子储备池计算已用于纠缠识别、非线性函数估计和量子态层析[18–20]。

量子储备池计算或许已经开始展现出优于经典储备池计算的计算能力。例如，数值研究表明，由 5–7 个量子比特构成的量子储备池，其计算能力可与包含 100–500 个节点的传统循环神经网络相当[21]。在这项工作中，我们展示了少量量子比特储备池出色的预测能力。

量子机器学习的主要目标之一，是获得最重要的计算能力——量子优势，即借助量子计算，在定义明确的目标任务（例如商业时间序列预测任务）上，相较于经典计算实现可衡量的性能提升[22]。如果量子储备池计算中的量子储备池需要一种复杂的，

多量子比特纠缠架构，而这种架构对于经典计算而言是难以处理的。这一观点与[23]针对量子增强特征空间所表达的观点相同；量子增强特征空间是与量子储备池计算密切相关的一种方法，其中量子储备池充当序列特征映射。

在本研究中，我们以量子噪声诱导储备池（QNIR）框架[11,12]，为基础，提出一种面向储备池的参数化量子电路新方法，并系统地降低电路复杂度。这里使用降低一词，指的是减少量子电路资源，以便与通过参数化噪声通道实现的储备池优化明确区分。QNIR是一种量子储备池计算，依靠量子硬件噪声，或者如本研究所关注的，依靠量子软件中的人工噪声模型，作为生成丰富耗散性量子储备池动力学的资源。在当前量子计算的过渡性含噪声中等规模量子（NISQ）阶段，QNIR可以利用固有的硬件噪声。然而，在未来经过强力误差缓解的容错量子计算机中，QNIR噪声通道可以作为编码指令，与量子门一同写入量子程序。这种方法使QNIR算法摆脱对底层物理设备的依赖。我们采用一种新方法，将参数化人工噪声模型编入量子计算机，以提升时间序列预测性能。借此，我们回应了QNIR以及量子储备池计算普遍面临的一项重要需求：针对各类预测任务进行储备池调优。

双重退火和进化优化（EO）为储备池噪声提供了强大的优化方法。EO 能够在多个层面对量子系统进行优化，例如量子电路参数；这一点已在本研究及先前研究中成功实现[24–26]，也能优化量子电路架构。本文采用了一种先前已取得成功的进化优化算法[27]，该算法通过量子-经典混合神经网络方法，对量子强化学习智能体的模型参数进行进化优化。

量子噪声诱导储备池计算

理论框架

我们从一般的储备池计算理论出发，建立 QNIR 理论。储备池计算是一种计算范式，也是一类源自循环神经网络的机器学习算法。储备池计算通过固定耦合常数的非线性系统（称为储备池）的动力学，将输入信号或时间序列映射到更高维的特征空间。储备池计算的核心优势之一是，只需在单个输出层中设置少量可训练权重，因此与循环神经网络相比，训练速度更快、效率更高。储备池计算需要满足若干性质[28,29]，包括适当的储备池维度、非线性、衰减记忆／回声状态属性（ESP）以及响应可分性。

对于单变量情况，储备池 f 是输入序列 u_t 和先前储备池状态 $\bar{x}_{t-1}$ 的循环函数，如下所示

$$\bar{x}_t = f(\bar{x}_{t-1}, u_t). \tag{1}$$

作为输出序列，$\bar{x}_t$，训练序列选取自时间步 $t = t_i$ 至 $t = tf$，并构成训练设计矩阵 $\mathbf{X}_{tr}$。初始序列 $t < t_i$ 是为实现渐消记忆/ESP 所需的洗脱区间。初始形式的多元线性回归模型：

$$\mathbf{y} = W^T \mathbf{X}_{tr}, \tag{2}$$

基于最小二乘法进行训练，其中 $\mathbf{y}$ 是目标向量，W 是初始权重向量。训练后的模型形式如下：

$$\hat{\mathbf{y}} = W_{opt}^T \mathbf{X}, \tag{3}$$

使用优化后的权重向量 W_{opt}^T，从新序列 $\mathbf{X}$ 得到预测序列 $\hat{\mathbf{y}}$。

对于采用人工噪声通道的 QNIR，现将已构建的储备池计算框架按以下方式具体化。密度算符随时间步演化如下：

$$\rho_t = \mathcal{T}_{u_t}(\rho_{t-1}), \tag{4}$$

其中，储备池映射 $\mathcal{T}_{u_t}$ 由一系列酉量子门U_i和相应的人工噪声通道 $\mathcal{E}_i$组成，这些通道是完全正且保迹的（CPTP）。储备池映射可以表示为量子信道的复合

$$\mathcal{T}_{u_t}(\rho_{t-1}) = \mathcal{E}_{U_K} \circ \ldots \circ \mathcal{E}_{U_2} \circ \mathcal{E}_{U_1}(\rho_{t-1}), \tag{5}$$

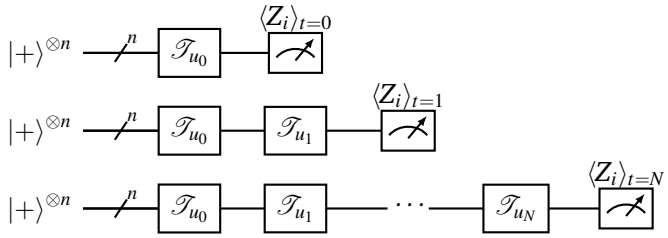

图1. QNIR计算机在展开视图中的电路信道图，由以下部分组成[30]。量子储备池的初始态为 $|+\rangle^{\otimes n}$，标记为 $\mathcal{T}_{u_i}$ 的量子信道按照方程 4演化密度算符，其中 N 个时间步需要N 个量子电路。多个输出序列n由连续的单量子比特期望值测量拼接而成，测量结果为 $\langle Z_i\rangle$，作用于n 个量子比特上。

其中，记号 $\mathcal{E}_{U_i} = \mathcal{E}_i(U_i \rho U^{\dagger}{}_i)$ 用于清晰表述，并强调每个量子门都受到噪声通道的作用，而K 表示该时间步中的噪声通道数量。我们将 $\mathcal{T}_{u_t}$ 称为含噪量子电路。QNIR 需要一个初始洗脱阶段$t < t_i$，在达到稳态之前，储备池会遗忘其初始态。

量子电路中幺正且无噪声的部分由一层初始RX 门组成，后接一个由$RZZ_{i、j}$ 门构成的纠缠方案；这些门是双量子比特纠缠门

$$(CX_{i,j}RZ_j(\theta)CX_{i,j})RX^{\otimes n}(\theta) = RZZ_{i,j}(\theta)RX^{\otimes n}(\theta), \tag{6}$$

其中，所有 $RX(\theta)$ 和 $RZ(\theta)$ 旋转门都通过缩放映射 $\theta = \phi(u)$ 对时间序列数据进行编码。幺正编码门的目的和结构详见小节“储层电路设计”。

在每个时间步，测量所有 n 个量子比特的单量子比特期望值 $\langle Z_i\rangle = Tr(Z_i\rho)$，

$$h_t = [\langle Z_1\rangle, \langle Z_2\rangle, \ldots, \langle Z_n\rangle]^T, \tag{7}$$

如图 1 的电路图所示。图 2 展示了时间序列值被编码到所有储层量子比特中，并对所有量子比特进行 $\langle Z_i\rangle$ 测量；每个时间步的测量结果拼接后，形成 n 个储层特征序列 $q_i = \{\langle Z_i\rangle\}_{t=0}^{N}$，其中 N 是时间步数。进而，q_i 构成设计矩阵$\mathbf{X}$，并按照式 3 训练 QNIR 模型。完整 QNIR 计算机的示意图见图 3。

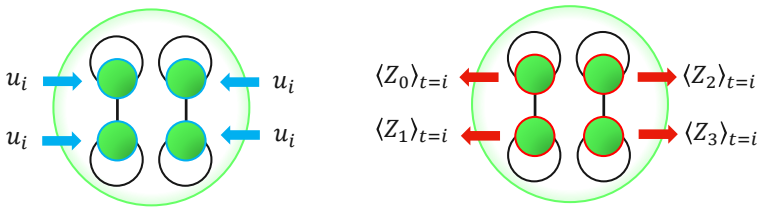

图2. 该图展示了将单个值的数据编码重复多次u_i到所有储层量子比特（左侧），以及对单个量子比特 Z 期望值进行测量（右侧）。每个时间步i 都会执行这一分为两部分的过程，并通过串接构建特征信号。图 1展示了每个时间步的含噪量子电路。该图展示了一个具有固定成对可分动力学的四量子比特储层示例。

在储备池计算中（进而在量子储备池计算中），储层系统能够捕捉目标系统的时间动态至关重要。为此，我们针对 QNIR 实施了一种储层优化方案。量子储备池电路中的人工噪声通道 $\mathcal{E}_i$ 通过一个基于时间序列预测性能的均方误差代价函数，由优化程序迭代更新。此举旨在优化量子储备池的时间序列预测能力。优化方法的详情见小节“储层噪声参数化”。

储层电路设计

本节介绍量子电路中幺正门的架构和用途、含噪量子电路的高层结构以及纠缠方案。噪声方案的详情见小节“储层噪声参数化”。

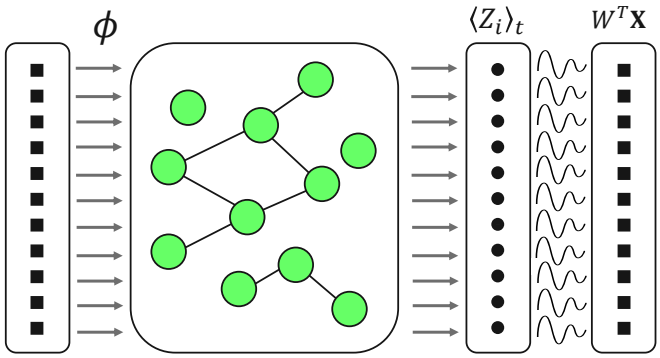

图3。 在此图中，第一层包含由同一个时间序列值复制而成的数组。输入数组中的每个值都按照式 6 编码到储备池的所有量子比特中。第二层是一个采用任意纠缠方案的量子储备池，以连接量子比特节点的连线表示。对所有量子比特测量 Z 可观测量的期望值 $\langle Z_i \rangle$。重复这些测量并将结果串联起来，构建输出信号 q_i。在最后一层，这些信号用于多元线性回归，以进行时间序列预测，如式 3所示。

量子储备池的初始状态，$|+\rangle^{\otimes n}$，由初始哈达玛门层制备。根据公式 6，一个n量子比特 QNIR 电路具有固定的量子门序列

$$\begin{aligned} U_b(u) &= (CX_{i,j}RZ_j(\theta)CX_{i,j})RX^{\otimes n}(\theta) \\ &= RZZ_{i,j}(\theta)RX^{\otimes n}(\theta) \end{aligned} \tag{8}$$

其中，i、j 是两个量子比特的索引，用于表示多个双量子比特 RZZ 纠缠门的位置。该电路的分解形式由CX 和 RZ 门[23] 构成，并通过噪声通道实现（参见小节：储层噪声参数化）。时间序列数据值 u通过角度 $\theta = \phi(u)$ 编码到所有 $RX(\theta)$ 和 $RZZ(\theta)$ 门中，其中 ϕ是缩放映射。

为了实现 QNIR 的循环架构，我们对时间序列 $\{u_t\}_{t=0}^{N}$执行一组N 个量子电路。第一个电路对 $\{u_0\}$进行编码，第二个电路对 $\{u_0,u_1\}$进行编码，而第N个电路则对 $\{u_t\}_{t=0}^{N}$ 进行编码，表示为

$$\mathrm{U}_{t=N} = U_b(u_N)\ldots U_b(u_1)U_b(u_0). \tag{9}$$

对于任意t，所有酉算子 U_t 都会将i 期望值约束为零比特串

$$\langle Z_i \rangle_t = \langle \Phi_0 | \mathrm{U}_t^{\dagger} Z_i \mathrm{U}_t | \Phi_0 \rangle = 000..., \tag{10}$$

其中，$|\Phi_0\rangle = |+\rangle^{\otimes n}$ 是初始储备池状态，Z_i 表示n 个单量子比特Z 测量算符。正是作用噪声确保了量子比特信号非零，形成特征序列q_i。现在考虑加入人工噪声的完整 QNIR 电路，编码 $\{u_t\}_{t=0}^{N}$ 的最后一次迭代所对应的含噪量子电路为量子信道

$$\mathscr{T}_N = \mathscr{T}_{u_N} \circ \ldots \circ \mathscr{T}_{u_2} \circ \mathscr{T}_{u_1}. \tag{11}$$

带有人工噪声方案的含噪量子电路将在下一小节“储层噪声参数化”中详细介绍。该方案还可以通过基于记忆判据[29,31–33]进行电路截断，进一步减少资源消耗。

对于$RZZ_{i,j}$ 门，量子比特i 和j 之间的纠缠程度是u_t的函数。数据值的幅度范围必须受到限制；我们观察到，远大于 2π 的值会产生不良影响。我们考虑无需重新缩放的基准测试。

借鉴量子特征映射与纠缠之间的紧密联系，[23,34–36] 纠缠方案由公式 6 中 RZZ门的数量和位置（即架构）定义。可供试验的常见纠缠方案包括全连接、线性、成对，以及我们在[11]中称为成对可分的方案。本研究探讨的成对可分（PS）和线性纠缠（LE）方案中，RZZ门的索引分别为 $\mathrm{i,j} \in \{(0,1),(2,3),(4,5)\ldots,(\mathrm{N}-1,\mathrm{N})\}$ 和 $\mathrm{i,j} \in \{(0,1),(1,2),(2,3)\ldots,(\mathrm{N}-1,\mathrm{N})\}$。具体而言，对于 LE 方案，每增加一个 RZZ门，就会将其置于新的电路层中，从而每次都会增加电路深度。LE 方案会生成整个电路的纠缠态[23]。成对可分纠缠方案的状态向量演化为量子比特对的乘积态，$|\psi\rangle = \bigotimes_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}/2} |\phi\rangle_i$，其中 $|\phi\rangle_i$是二量子比特纠缠态。该状态 $|\psi\rangle$可通过经典模拟高效模拟，并可在经典模拟或量子计算机上并行化[37,38]。

储层噪声参数化

QNIR 使用噪声作为生成非平凡特征序列的必要资源。我们使用可在量子计算机上编程的人工噪声。在此方案中，可以实现多种此类人工噪声模型，以产生不同效果。为实现噪声方案，我们将参数化的单量子比特噪声通道与量子电路中的每个酉门相关联，公式 6，如图 4 所示。请注意，这与 Kubota 等人[12], 的做法不同，他们将噪声通道置于每个时间步的末尾。下文中，我们假设每个噪声通道都依赖于单个噪声参数。

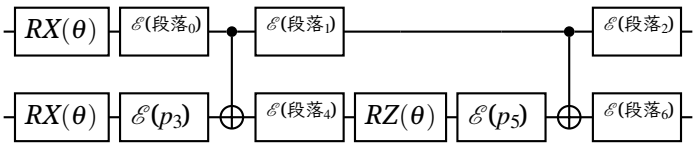

图 4. 储层噪声参数化的双量子比特量子电路通道图。每个酉门都关联一个噪声通道，以 $\mathscr{E}(p_i)$ 表示。这体现了本文提出的新型量子电路参数化方法。

图 4中的储备池电路里，所有量子门都关联着噪声通道。每个噪声通道 $\mathscr{E}(p)$ 都是噪声效应发生概率的函数。我们使用概率 p_i来参数化储备池，以进行优化。概率参数的数量随量子比特数量线性增长。对于成对可分纠缠储备池，参数数量为 $n_{p_i} = \frac{7}{2}n$，其中 $n = 2$，4、6.....；对于线性纠缠储备池，参数数量为 $n_{p_i} = 6n - 5$，其中 $n = 2$，3、4.....。

QNIR 资源噪声优化通过对 QNIR 进行迭代训练（方程 2）和测试（方程 3）来完成，从而得到优化后的噪声概率参数 $p_i \in \mathbf{p}$ （见图 5）。初始参数向量 **p**中的参数是从均匀分布中随机选取的概率，即 $p_i \sim U(0,\ 1)\ \forall i$。

本研究尝试了两种优化方法：进化优化[27] 和双重退火[39], ，后者可在 SciPy 优化软件包[40]中使用。我们采用均方误差（MSE）作为衡量预测性能的适当代价函数，并将其最小化，如下所示：

$$\min_{\mathbf{p}} \{\mathrm{MSE}(\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}), \mathbf{y}) : p_i \in [0,1], \forall i\}, \tag{12}$$

其中，$\hat{\mathbf{y}} = W_{opt}^{T}\mathbf{X}(\mathbf{p})$ 是 QNIR 测试集的预测值，而$\mathbf{X}(\mathbf{p})$ 是取决于噪声概率**p**的储备池信号矩阵。

在本研究中，我们仅使用可通过经典辅助系统简单实现的重置噪声通道（参见下一小节：重置噪声）。

重置噪声

我们提出一种用于重置噪声信道的简单混合量子-经典算法，该算法利用经典辅助系统，以一定概率触发重置指令。确定性重置指令是量子指令集的重要组成部分，因为需要重置量子比特状态。量子指令集是一种抽象的量子计算机模型[41,42]。在本

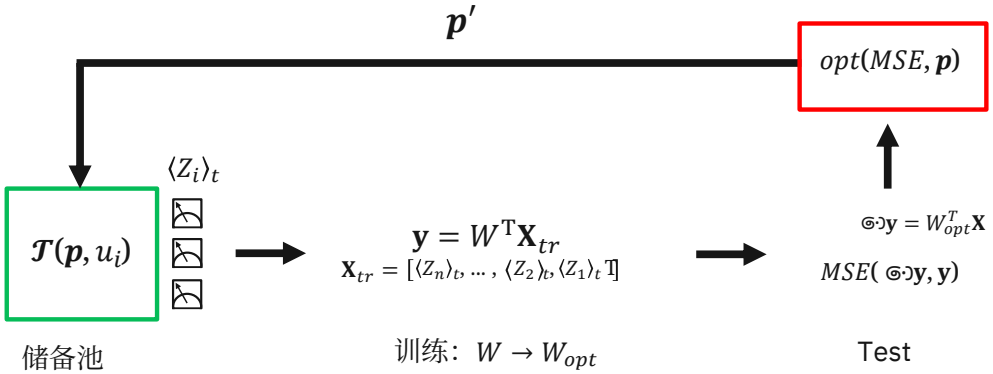

图5。 该图展示了 QNIR 噪声优化方案。量子模型在经典优化循环中经过反复训练和测试，其中使用双重退火或进化优化。量子储备池电路具有多个门相关噪声信道，每个信道都有一个通过迭代更新的错误概率参数。

工作中，我们考虑一个重置为 $|0\rangle$ 噪声信道，由 $\mathscr{E}_{PR}(\rho) = p|0\rangle\langle 0| + (1-p)\rho$ 表示，其中 p 是重置概率[43]。 $\mathscr{E}_{PR}(\rho)$是迹保持的，$Tr(\mathscr{E}_{PR}(\rho)) = 1$。

借助动态电路，量子计算机可以通过电路中途测量，随后执行受经典控制的量子X 门来实现重置指令，具体执行哪种操作取决于测量结果[44] （见图6）。例如，目前 IBM 量子计算机上支持 OpenQASM 的重置就是这样实现的3[41]。

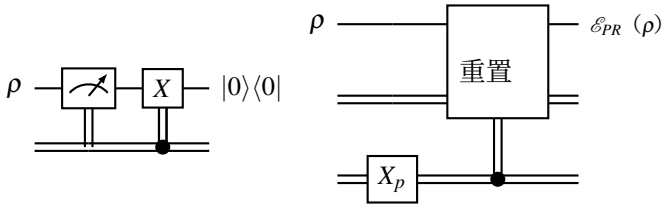

图 6。确定性重置指令（左）通过该动态电路执行。此电路可作为重置噪声信道 $\mathscr{E}_{PR}$ 的基础。一条单线表示一个量子比特，双线表示一个经典比特。经典计算机将执行模型中的经典辅助系统（右）。经典非门 X_p 以概率 p 执行，进而以概率 p触发受经典控制的重置指令。

在经典计算中，概率指令的执行由随机数生成器（RNG）触发，例如软件中广泛使用的伪随机数生成器（PRNG），或硬件中的硬件随机数生成器（HRNG）。在这里，我们使用经典随机数生成器以概率方式触发重置，这与重置噪声完全相同。这样，无需辅助量子比特即可实现人工重置噪声。在本文提出的更大框架中，酉门可能需要对应许多噪声通道，因此辅助量子比特会带来不必要的开销。这种混合方法也可能适用于其他噪声通道。例如，重置噪声可以高精度地近似振幅阻尼噪声[43]。

方法

储层复杂度降低

对所有基准任务均进行了储层复杂度降低，以减少量子资源占用并防止过拟合。这包括降低储层纠缠方案复杂度和量子比特数量。降低过程采用典型的优化过程：逐步增加资源，直至满足停止条件。电路资源的降低主要由储备池优化和最终均方误差决定。参见“方法：噪声优化”。

纠缠方案复杂度即量子电路复杂度[45], 由纠缠门的数量及由此产生的电路深度决定，也就是说，它代表量子电路的成本。两项基准测试均首先试用了线性纠缠方案，其表现与最终依据简化原则选定的成对可分纠缠方案相当。

量子储备池中的量子比特数量被减少至仍能保持良好性能的较小数量。观察发现，量子比特数量较多的储备池所带来的收益递减。

在开展这项工作之前，我们将一种人工量子噪声方案进行了简化：原方案采用物理设备噪声模型，包含 10 个子模型，涵盖热弛豫、退极化以及态制备与测量（SPAM）噪声；简化后则仅采用单一的重置噪声模型。本文未提出针对噪声通道的系统化简化方法。

噪声优化

NARMA 和 Mackey-Glass 基准分别采用双重退火优化和进化优化。我们使用 SciPy 的[40] 优化软件包中的双重退火，以默认设置进行储备池优化。这种随机方法源自[39], , 将广义经典模拟退火（CSA）和快速模拟退火（FSA）[46] 与局部搜索策略[47]相结合。进化优化（EO）是一种基于种群的优化方法，候选解以个体种群的形式表示，并通过随机采样进行初始化。随后，通过根据预定义的目标指标进行评估，确定每个候选解的适应度。接着选出较优解，并用其生成下一次迭代的候选种群。此过程持续进行，直至找到令人满意的解。这里我们采用 Chen 等人提出的进化优化算法[27]。

对重置噪声概率进行优化，以最大化预测性能，详见储备池噪声参数化。优化算法需要停止条件。三个停止条件为：均方误差多次发生微小变化、长时间迭代运行而未更新，以及迭代次数达到最大值 5。对于所用的优化算法而言，通常认为 5 是一个较大的数值。这些停止条件得出了可复现的最终均方误差，表明它们对所用的优化算法而言接近最优。

模拟

使用 Qiskit SDK 对带有人工噪声通道的量子储备池电路进行了模拟[48]。模拟使用了 QASM 模拟器和理想密度矩阵模拟器。这种理论方法允许通过对单个`QuantumCircuit` 对象进行一次计算运行来完成模拟。在每个时间步，根据中间密度矩阵计算单量子比特Z 期望值。由于密度矩阵模拟器的资源需求，无法对量子比特数超过 12 的线性纠缠储备池进行模拟。

重置噪声通道通过将 Kraus 指令直接添加到 QuantumCircuit 中进行编码。可使用一个仅含单一概率参数的 reset_误差通道，该参数即为优化目标。该通道被传递给 Kraus 指令。

记忆容量

储备池计算的循环性使其能够保留信息，或在储备池状态中记住过去信号，即形成短期记忆。记忆容量（MC）是衡量其保留过去输入信息能力的指标，在储备池计算机[1]的预测能力中发挥着至关重要的作用。

为计算记忆容量，首先生成一个适用于优化后的 QNIR 模型的均匀分布随机序列。随机序列的最小值和最大值，即数值范围，被设定为与该模型所针对的基准时间序列范围相同。随后训练 QNIR，使其预测储备池输入序列提前 d 个时间步的信号u_k，其中目标信号为 $\hat{y}_k = u_{k-d}$。记忆函数（MF）定义为皮尔逊相关系数的平方，

$$MF_d = \frac{\mathrm{cov}^2(y_k, \hat{y}_k)}{\sigma^2(y_k)\sigma^2(\hat{y}_k)}, \tag{13}$$

然后将所有延迟对应的 MF 求和，计算 MC，公式如下：

$$MC = \sum_d MF_d. \tag{14}$$

在结果部分，针对经过训练和优化、用于三个 NARMA 系统和两个 Mackey-Glass 系统的 QNIR 模型，计算了记忆容量。

指标

归一化均方误差（NMSE）和归一化均方根误差（NRMSE）是相关文献中常用的度量指标，因此本文遵循惯例并为便于比较而采用这两项指标。本文采用 Hyndman 和 Koehler 提出的平均绝对缩放误差（MASE）指标[49]，因为它具有诸多特性，可用于比较尺度不同的时间序列；此外，由于其具有对称性和线性，结果也易于解释。此外，采用 MASE 是因为我们将 QNIR 的预测性能与朴素模型进行比较，而朴素模型的性能优于线性模型，因此提供了更具挑战性的参考预测。朴素模型是最简单的预测模型之一，其预测方式是将下一个时间序列值设为当前值[50]。

作为优化代价函数的均方误差（MSE）定义为

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{n}\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2. \tag{15}$$

用于评估预测性能的归一化均方误差（NMSE）定义为

$$\mathrm{NMSE} = \frac{\sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_i y_i^2}. \tag{16}$$

NRMSE 的定义为

$$\mathrm{NRMSE} = \frac{\sqrt{\frac{1}{T}\sum_t (y_i - \hat{y}_i)^2}}{\sigma(\mathbf{y})} \tag{17}$$

其中，$\sigma(y)$ 是真实值的样本标准差。平均绝对尺度误差（MASE）预测指标定义为

$$\mathrm{MASE} = \frac{\frac{1}{J}\sum_j |e_j|}{\frac{1}{T-1}\sum_{t=2}^{T} |y_t - y_{t-1}|} \tag{18}$$

其中，$e_j = y_j - f_j$ 是实际值减去预测值。分母是非季节性朴素样本外预测的平均绝对误差（MAE）。

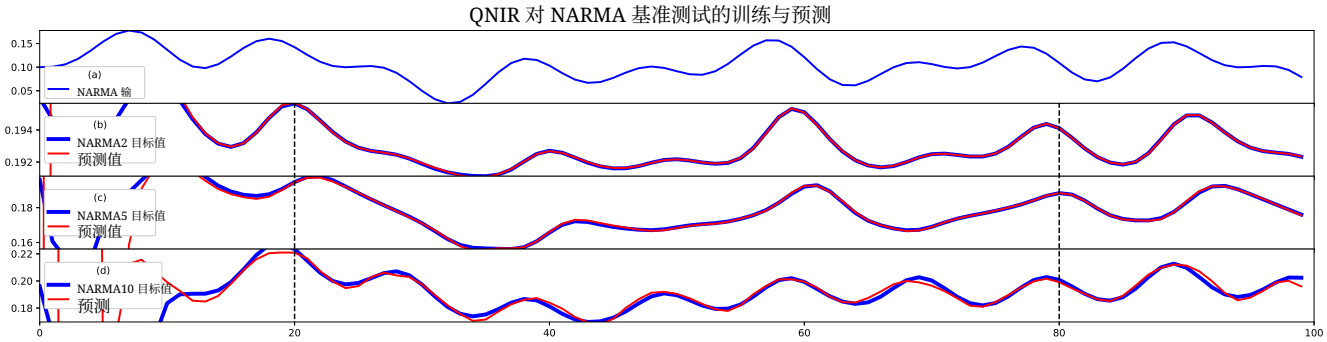

图7. 图(a)为所有 NARMA 任务的输入序列，见公式 20。图(b–d)分别展示了 QNIR 对 NARMA2、NARMA5 和 NARMA10 映射的训练与预测。训练数据序列对应的时间步索引为20–80，测试数据序列对应的时间步索引为81–100。测试集预测性能指标见表 1。

结果

NARMA

我们证明，经过噪声优化的 QNIR 在非线性自回归滑动平均（NARMA）序列预测基准测试中具有出色的理论性能[11,51]。NARMA 回归任务旨在学习固定输入序列与 NARMA 输出序列之间的非线性 NARMA映射。我们将这些序列记为 NARMAN，其中 N 是 NARMA映射的阶数。我们考察了阶数分别为 2、5 和 10 的三种 NARMA 序列。

NARMA2序列[51] 由以下递推关系给出

$$y_{t+1} = 0.4y_t + 0.4y_t y_{t-1} + 0.6u_t^3 + 0.1, \tag{19}$$

其中，序列的两个初始值为 $\{0.196, 0.19468\}$。输入值 u_t 来自光滑函数

$$u_t = 0.1\sin\left(\frac{2\pi at}{T}\right)\sin\left(\frac{2\pi bt}{T}\right)\sin\left(\frac{2\pi ct}{T}\right) + 0.1 \tag{20}$$

其中，$(a,\ b,\ c,\ T) = (2.11,\ 3.73,\ 4.11,\ 100)$。NARMA5 和 NARMA10 由以下通用递归函数描述

$$y_{t+1} = \alpha y_t + \beta y_t\left(\sum_{i=0}^{n-1} y_{t-i}\right) + \gamma u_{t-(n-1)}u_t + \delta. \tag{21}$$

对于 NARMA5，初始序列为 $\{0,0,0,0,0.196\}$，且目标序列不包含前四个零。NARMA5 的函数参数为 $(\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \delta,\ T) = (0.3,\ 0.05,\ 1.5,\ 0.1,\ 100)$。对于 NARMA10，情况类似：初始序列中的前九个值为零，且不包含在目标序列中。使用的函数参数与 NARMA5 相同。NARMA时间序列值被直接编码为编码门的角度。时间序列训练集和测试集划分索引分别为 20-80 和 81-100。初始的 20 个时间步被排除，作为洗脱阶段。

NARMA2、5 和 10 任务取得了出色的仿真结果，见图 7 ，并记录于表 1。高质量结果主要归功于重置噪声参数化及后续优化的有效性，而这项方法首次在本研究中实现。图 9显示了这种有效性：对于全部三项 NARMA 任务，从重置噪声概率的随机初始化到最后一次优化迭代，性能提升了两个数量级。针对这三项 NARMA 任务，分别获得了三组不同的最优参数。信息处理能力（IPC）分析[52] 已用于表明 QNIR 能够解决 NARMA2 任务[12]。尤其是 NARMA2 上的出色表现，表明噪声参数化适用于寻求最优解模型。

结合储层噪声优化，我们从量子比特数量和储备池电路复杂度两方面，对量子储备池进行了简化，其中储备池电路复杂度以纠缠方案衡量（参见方法）。基于成对可分（PS）和线性纠缠（LE）方案的储备池均经过优化，针对所有 NARMA 任务，量子比特数均减少至 12 个（6×2）。量子比特数更多的储备池无法提升 NARMA预测性能，而量子比特数更少时，性能则会下降，见图9。PS 和 LE 储备池的 12 量子比特储备池分别由 42 个和 67 个重置噪声概率参数化。接下来

QNIR 的 NARMA 结果			
度量指标	NARMA2	NARMA5	NARMA10
MASE	2.8×10^{-2}	6.4×10^{-2}	0.39
NMSE	6.1×10^{-9}	1.4×10^{-6}	8.3×10^{-5}
归一化均方根误差	1.6×10^{-2}	3.3×10^{-2}	0.22
MSE	2.3×10^{-10}	4.6×10^{-8}	3.2×10^{-6}
朴素模型 NARMA 结果			
MASE	1	1	1
NMSE	6.5×10^{-6}	3.0×10^{-4}	6.1×10^{-4}
归一化均方根误差	0.51	0.48	0.60

表1。 与朴素模型相比，QNIR 性能指标得到了明确比较。根据定义，朴素模型的样本外平均绝对尺度误差为 1（方法：指标）。NARMA2 和 NARMA10 使用成对可分离储层实现，NARMA5 则使用线性纠缠实现。

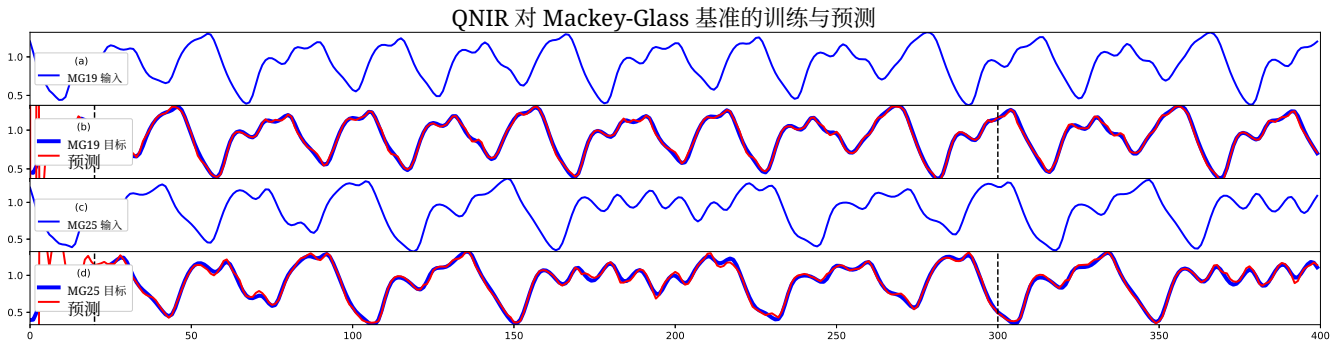

图8。 输入和目标时间序列定义为 $x(t-\tau)$ 和 $x(t)$，分别对应（式 22）。图(a-b)分别展示 MG19 输入、19步延迟目标时间序列及其预测结果。图(c-d)对 MG25 也作相同展示。训练数据序列对应的时间步索引为 20–300，测试数据序列对应的时间步索引为 301–400。测试集预测性能指标见表2。

我们考虑纠缠方案简化的第二个维度。对于 NARMA 2 和 10，储备池复杂度及相关纠缠均简化为 PS 储备池。这是因为 LE 储备池的结果与之相当。然而，对于 NARMA5，LE 储备池因性能更优而未予简化。由于纠缠程度较高，LE 储备池的量子态不可分离。

这一结果强有力地表明，与近期研究相比[11]，只需单一重置噪声模型即可降低资源噪声要求。尽管这些实验结果[11] 不可避免地存在测量抽样误差，但我们的结果表明，对于这些研究中定义的 NARMA 任务，并不需要多方面的物理设备噪声；本研究仅需重置噪声通道。这些结果还可能表明，重置噪声 QNIR 是进一步应对更多 NARMA 基准测试的一个有利方向[12]。

系统的记忆容量在 4.55(±0.07)、4.50(±0.07)和 4.70(±0.06)时达到饱和；对于 NARMA2、5 和 10，相应的延迟分别为 8、8 和 10（见图 11）。 $\alpha = 0.05$ 处的置信区间以方括号标出。MF 曲线与未优化的 QNIR 储层不同，这表明短期记忆存在结构差异。未优化的储层具有更多 sigmoid 或 S 形曲线，且记忆容量较低。NARMA10 MF 图中的 MF 值呈现出非常清晰的结构：对于较长的延迟，MF 值更大，最长可达 10，这也是高阶函数所需的。NARMA10 预测结果较低的一个可能原因，是在 $d = 10$处的 MF 值较小。储备池计算算法中固有的记忆-非线性权衡[53]应在专门针对 QNIR 的研究中加以确立和探讨，以帮助解读这些指标。

Mackey-Glass

Mackey-Glass（MG）非线性系统[54] 是时间序列预测中常用的基准测试，在某些参数下，由于其具有复杂的混沌动力学，因此难以预测。我们使用 Python 软件包 ReservoirPy[55] 生成 MG 系统的时间序列，并通过龙格-库塔方法进行离散化，初始值采用默认种子。对于 MG 基准测试，我们将训练序列从用于 NARMA 的 60 个数据点扩展至 250 个数据点，并将测试序列从 20 个数据点扩展至 100 个数据点。此次扩展旨在对 QNIR 进行压力测试。

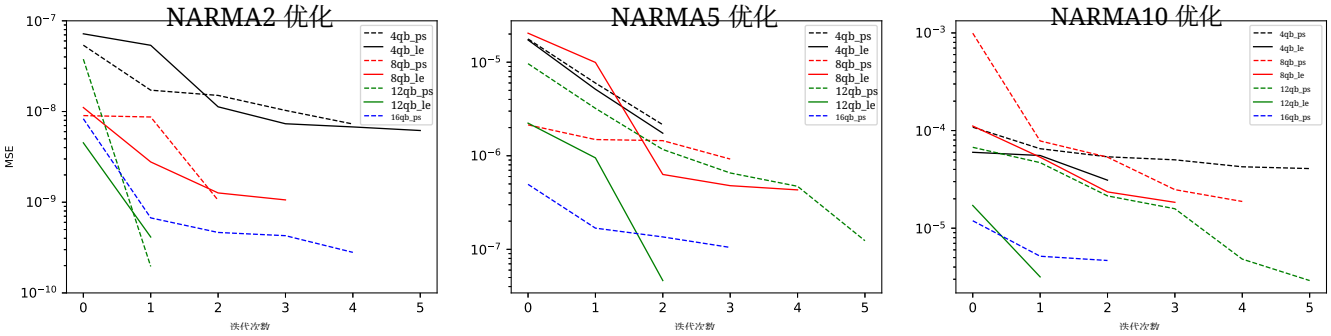

图 9. 成对可分（PS）和线性纠缠（LE）储层设计在储层调优迭代过程中的均方误差成本曲线对数图。PS 和 LE 储层中的量子比特数均从 4 个开始，每次增加 4 个，直至选定 12 量子比特储层。对于 NARMA2 和 NARMA10，PS 和 LE 储层的最终均方误差值相近。对于 NARMA5，LE 储层是更好的选择。优化和模拟相关事项的详情请参见方法。

MG 时滞微分方程（DDE）为

$$\frac{dx}{dt} = \frac{ax(t-\tau)}{1+x(t-\tau)^n} - bx(t). \tag{22}$$

为生成用于基准测试的时间序列，使用了参数 (x_0, a, b,n) =(1.2, 0.2,0.1, 10)。输入和目标时间序列分别定义为 x(t $-\tau$) 和 x(t)。我们考虑了两个由整数延迟值 $\tau = 19$ 和 25 确定的不同混沌 MG 系统，分别记为 MG19 和 MG25。随后将生成的时间序列按 2 倍因子进行降采样。对于降采样后的 MG19 和 MG25 时间序列，使用 nolds Python库[57]计算得到的正李雅普诺夫指数[56],表明其具有混沌性。

时间序列从 800 个时间步降采样至 400 个时间步。时间序列训练集和测试集划分索引分别为 20-300 和 301-400。初始的 20 个时间步作为洗脱阶段予以排除。MG 时间序列值被直接编码为编码门的角度。

QNIR Mackey-Glass结果		
度量指标	MG19	MG25
MASE	0.29	0.38
NMSE	4.6×10^{-4}	7.3×10^{-4}
归一化均方根误差	8.7×10^{-2}	0.10
MSE	4.3×10^{-4}	6.5×10^{-4}
朴素模型 Mackey-Glass 结果		
MASE	1	1
NMSE	4.4×10^{-3}	4.0×10^{-3}
归一化均方根误差	0.27	0.24

表2. QNIR的性能指标与朴素模型进行了明确比较。根据定义，朴素模型的样本外平均绝对尺度误差为1（方法：指标）。

我们报告了良好的预测性能，如图 8 所示，并记录于表2。QNIR展现出的预测性能远优于朴素模型，并在建模具有对初始条件指数敏感性的复杂混沌动力学方面显示出潜力。与NARMA相比，MG建模需要规模大三倍、含有更多量子比特的储备池，这表明其预测难度更高。不过值得强调的是，32量子比特的储备池按照传统方法来看仍然相对较小。

图 10 展示了噪声参数化和优化的有效性：从迭代0到迭代1，指标大幅下降，其中迭代0对应随机初始化参数。这是证明这种噪声参数化方法有效性的一个主要结果。

通过约简过程，MG19 和 MG25 任务的储备池均被约简至 32 个（16×2）量子比特。将量子比特数量增加到这些数值以上，收益会逐渐减小；而减少数量则会导致性能下降，如图 10所示。32 量子比特的储备池由 112 个噪声概率进行参数化。LE 储备池和 PS 储备池的性能相近，因此约简后选择了 PS 储备池。

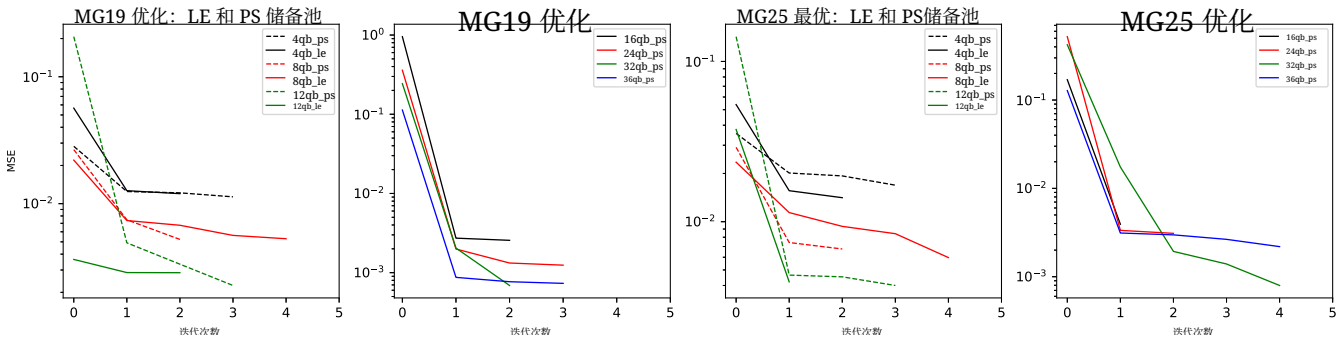

图 10. 储备池调优迭代的均方误差成本曲线对数图。均方误差从初始迭代到最终迭代最多改善了 2.5 个数量级，证明了噪声优化的有效性。在比较 LE 和 PS 储备池的两张图中，可以看出，对于 MG19 或 MG25 数据，最多使用 12 个量子比特时，最终均方误差没有明显差异。根据资源缩减原则，应优先选择 PS 储备池。有关优化和模拟事项的详情，请参阅方法。

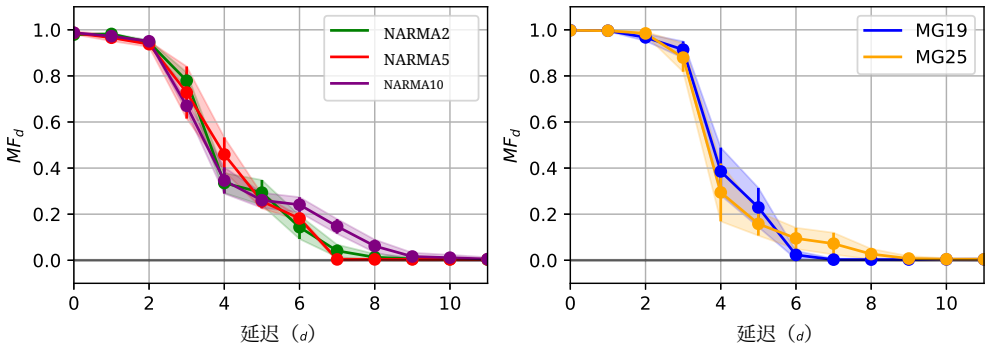

图 11. NARMA 和 Mackey-Glass 任务在 30 次试验中的 QNIR 记忆函数，绘制为相对于输入信号延迟d 的图。彩色带表示标准差。

在延迟为 6 和 8 时，MG19 和 MG25 系统的记忆容量分别饱和于 4。56(±0.07)和 4。55(±0.08)（见图 11）。置信区间在 $\alpha = 0.05$ 处以括号标出。由于这些较大 MG 储备池的记忆容量与用于 NARMA 基准测试的记忆容量相近，建模复杂度的增加可能来自可提供给线性回归层的储备池输出信号数量增加至三倍。MF 图表明，这些 QNIR 储备池采用了较小的记忆设计，不过仍需深入分析 MG 系统才能确认。后续研究将聚焦于记忆-非线性权衡，这或许可以解释为何在混沌 MG 时间序列任务中，以较小的记忆容量换取了更强的储备池非线性。

结论

我们展示了一种新的 QNIR 储备池优化方法，该方法采用参数化资源噪声，以满足通过量子储备池调优提升预测性能的需求。这种储备池调优的参数化方法体现了一种适用于量子机器学习模型的通用新型量子电路参数化方法。

基准测试表明，资源噪声参数化以及采用双重退火和进化算法进行优化，能够有效提升预测性能。我们的模拟显示，少量量子比特的 QNIR 计算机能够预测非线性动力学，包括 Mackey-Glass 系统中具有挑战性的混沌动力学。我们还展示了，与以往的 QNIR 研究相比，噪声资源显著减少，因此为本研究所选的基准样本确定了单一重置噪声模型。

我们系统地缩减了量子资源，包括储备池中的量子比特数量和纠缠方案。虽然降低纠缠方案复杂度可能会产生可由经典计算高效计算的量子电路，但当学习任务不需要量子优势时，这种做法是可取的。这符合模型选择和资源缩减的机器学习原理。此外，QNIR 框架也适用于复杂的纠缠方案，因此为研究量子优势开辟了道路。

降低量子电路复杂度有助于提升量子硬件效率，这对于

受噪声影响的当前量子计算机至关重要。因此，我们建议在当前量子计算机上采用误差缓解技术进行实施。

参考文献

1. Jaeger, H. 用于分析和训练循环神经网络的“回声状态”方法——附勘误说明。GMD Rep. 148 (2001). 2. Jaeger, H. & Haas, H. 利用非线性：预测混沌系统并在无线通信中节能。Science 304, 78–80 (2004). 3. Maass, W., Natschläger, T. & Markram, H. 无需稳定态的实时计算：一种基于扰动的神经计算新框架。Neural computation 14, 2531–2560 (2002). 4. Lukoševi˘cius, M. & Jaeger, H. 用于循环神经网络训练的储备池计算方法。Comput. Sci. Rev. 3, 127–149 (2009). 5. Mujal, P. 等. 量子储备池计算与极限学习机的机遇。Adv. Quantum Technol. 4, 2100027 (2021). 6. Tanaka, G. 等. 物理储备池计算的最新进展：综述。Neural Networks 115, 100–123 (2019). 7. Dambre, J. 光子储备池系统中的信息处理与计算。载于 Photonic Reservoir Computing，33–52 (2019). 8. Markovi´c, D. & Grollier, J. 量子神经形态计算。Appl. physics letters 117, 150501 (2020). 9. Govia, L., Ribeill, G., Rowlands, G., Krovi, H. & Ohki, T. 利用单个非线性振子进行量子储备池计算。Phys. Rev. Res. 3, 013077 (2021). 10. Chen, S. Y.-C., Fry, D., Deshmukh, A., Rastunkov, V. & Stefanski, C. 通过量子循环神经网络实现储备池计算。arXiv 预印本 arXiv:2211.02612 (2022). 11. Suzuki, Y., Gao, Q., Pradel, K. C., Yasuoka, K. & Yamamoto, N. 用于时间信息处理的自然量子储备池计算。Sci. reports 12, 1–15 (2022). 12. Kubota, T. 等. 量子噪声诱导的时间信息处理。Phys. Rev. Res. 5, 023057 (2023). 13. Domingo, L., Carlo, G. & Borondo, F. 利用量子储备池计算中的噪声。Sci. Reports 13, 8790 (2023). 14. Kutvonen, A., Fujii, K. & Sagawa, T. 针对时间序列预测优化量子储备池计算机。Sci. reports 10, 14687 (2020). 15. Dasgupta, S., Hamilton, K. E. & Banerjee, A. 设计具有最大记忆容量、用于波动率预测的 NISQ 储备池。arXiv 预印本 arXiv:2004.08240 (2020). 16. Domingo, L., Carlo, G. & Borondo, F. 面向含噪中等规模量子时代的最优量子储备池计算。Phys. Rev. E 106, L043301 (2022). 17. Burgess, A. & Florescu, M. 面向经典与量子问题的量子储备池计算实现。arXiv 预印本 arXiv:2211.08567 (2022). 18. Ghosh, S., Opala, A., Matuszewski, M., Paterek, T. & Liew, T. C. 量子储备池处理。npj Quantum Inf. 5, 1–6 (2019). 19. Ghosh, S., Opala, A., Matuszewski, M., Paterek, T. & Liew, T. C. 利用量子储备池网络重构量子态。IEEE Transactions on Neural Networks Learn. Syst. 32, 3148–3155 (2020). 20. Angelatos, G., Khan, S. A. & Türeci, H. E. 用于量子态测量的储备池计算方法。Phys. Rev. X 11, 041062 (2021). 21. Fujii, K. & Nakajima, K. 利用无序系综量子动力学进行机器学习。Phys. Rev. Appl. 8, 024030 (2017). 22. Bravyi, S., Dial, O., Gambetta, J. M., Gil, D. & Nazario, Z. 超导量子比特量子计算的未来。J. Appl. Phys. 132, 160902 (2022). 23. Havlí˘cek, V. 等. 利用量子增强特征空间进行监督学习。Nature 567, 209–212 (2019). 24. Anand, A., Degroote, M. & Aspuru-Guzik, A. 用于变分量子计算的自然进化策略。Mach. Learn. Sci. Technol. 2, 045012 (2021).

25. Franken, L. 等. NISQ 设备上的量子电路演化。载于 2022 IEEE 进化计算大会 (CEC)，1–8 (IEEE, 2022). 26. Lu, Z., Shen, P.-X. & Deng, D.-L. 用于机器学习的马尔可夫量子神经进化。Phys. Rev. Appl. 16, 044039 (2021). 27. Chen, S. Y.-C., Huang, C.-M., Hsing, C.-W., Goan, H.-S. & Kao, Y.-J. 通过进化优化实现变分量子强化学习。Mach. Learn. Sci. Technol. 3, 015025 (2022). 28. Dasgupta, S., Hamilton, K. E. & Banerjee, A. 表征 transmon 量子比特储备池的记忆容量。载于 2022 IEEE 量子计算与工程国际会议 (QCE)，162–166 (IEEE, 2022). 29. Martínez-Peña, R. & Ortega, J.-P. 有限维量子储备池计算。Phys. Rev. E 107, 035306 (2023). 30. Kay, A. quantikz 软件包教程。arXiv 预印本 arXiv:1809.03842 (2018). 31. Chen, J., Nurdin, H. I. & Yamamoto, N. 含噪量子计算机上的时间信息处理。Phys. Rev. Appl. 14, 024065 (2020). ˇ32. Cindrak, S., Donvil, B., Lüdge, K. & Jaurigue, L. 通过人工记忆限制解决时间复杂度问题并调节量子储备池计算的性能。arXiv 预印本 arXiv:2306.12876 (2023). 33. Mujal, P., Martínez-Peña, R., Giorgi, G. L., Soriano, M. C. & Zambrini, R. 利用弱测量和投影测量进行时间序列量子储备池计算。npj Quantum Inf. 9, 16 (2023). 34. Schuld, M. & Killoran, N. 特征希尔伯特空间中的量子机器学习。Phys. review letters 122, 040504 (2019). 35. Lloyd, S., Schuld, M., Ijaz, A., Izaac, J. & Killoran, N. 面向机器学习的量子嵌入。arXiv 预印本 arXiv:2001.03622 (2020). 36. Schuld, M. & Petruccione, F. 使用量子计算机进行机器学习（施普林格，2021）。37. Nakajima, K., Fujii, K., Negoro, M., Mitarai, K. & Kitagawa, M. 通过量子储备池计算中的空间复用提升计算能力。Phys. Rev. Appl. 11, 034021 (2019). 38. Tran, Q. H. & Nakajima, K. 高阶量子储备池计算。arXiv 预印本 arXiv:2006.08999 (2020). 39. Xiang, Y., Sun, D., Fan, W. & Gong, X. 广义模拟退火算法及其在汤姆孙模型中的应用。Phys. Lett. A 233, 216–220 (1997). 40. Virtanen, P. 等. SciPy 1.0：Python 科学计算的基础算法。Nat. Methods 17, 261–272, 数字对象唯一标识符: 10.1038/s41592-019-0686-2 (2020). 41. Cross, A. 等. Openqasm 3：更广泛、更深入的量子汇编语言。ACM Transactions on Quantum Comput. (2021). 42. Smith, R. S., Curtis, M. J. & Zeng, W. J. 实用量子指令集架构。arXiv 预印本 arXiv:1608.03355 (2016). 43. Gutiérrez, M., Svec, L., Vargo, A. & Brown, K. R. 利用克利福德通道和泡利测量近似真实误差。Phys. Rev. A 87, 030302 (2013). 44. Córcoles, A. D. 等. 在超导量子比特量子算法中利用动态量子电路。Phys. Rev. Lett. 127, 100501 (2021). 45. Yao, A. C.-C. 量子电路复杂度。载于 1993 IEEE 第 34 届计算机科学基础年会论文集，352–361 (IEEE, 1993). 46. Tsallis, C. & Stariolo, D. A. 广义模拟退火。Phys. A: Stat. Mech. its Appl. 233, 395–406 (1996). 47. Xiang, Y. & Gong, X. 广义模拟退火的效率。Phys. Rev. E 62, 4473 (2000). 48. tA-v 等, A. Qiskit：一个开源量子计算框架，数字对象唯一标识符: 10.5281/zenodo.2573505 (2021). 49. Hyndman, R. J. & Koehler, A. B. 再看预测准确度的度量。Int. journal forecasting 22, 679–688 (2006). 50. Hyndman, R. J. & Athanasopoulos, G. 预测：原理与实践（OTexts，2018）。51. Atiya, A. F. & Parlos, A. G. 关于循环网络训练的新结果：统一算法并加速收敛。IEEE transactions on neural networks 11, 697–709 (2000). 52. Dambre, J., Verstraeten, D., Schrauwen, B. & Massar, S. 动力系统的信息处理能力。Sci. reports 2, 514 (2012).

53. Inubushi, M. & Yoshimura, K. 超越记忆-非线性权衡的储备池计算。 *Sci. reports* **7**, 10199 (2017).**54.** Mackey, M. C. & Glass, L. 生理控制系统中的振荡与混沌。 *Science***197**, 287–289 (1977).**55.** Trouvain, N., Pedrelli, L., Dinh, T. T. & Hinaut, X. Reservoirpy：用于设计回声状态网络的高效且易用的库。载于国际人工神经网络会议，494–505（施普林格，2020）。**56.** Eckmann, J.-P., Kamphorst, S. O., Ruelle, D. & Ciliberto, S. 从时间序列中提取李雅普诺夫指数。 *Phys. Rev. A* **34**, 4971(1986).**57.** Schölzel, C. 动力系统的非线性度量，数字对象唯一标识符：10.5281/zenodo.3814723 (2019).

致谢

我们谨向以下人士致谢，感谢他们富有见地且建设性的讨论、建议、反馈与支持：Dimitris Alevras、Constantin Gonciulea、Luke Govia、Alma Ionescu、VaibhawKumar、Muyuan Li、Antonio Mezzacapo、Ryutaro Ohira、Jae-eun Park、Laura Schleeper、Charlee Stefanski、Francesco Tacchino、Anna Topol、Rukhsan Ul-Haq、Kavitha Yogaraj，以及 IBM Quantum 团队。我们还要感谢 Yudai Suzuki 参与最初的技术讨论。

作者贡献声明

概念构思，D.F.、A.D.、S.Y.-C.C.、V.R.、V.M.；方法，D.F.、A.D.、S.Y.-C.C.、V.R.、V.M.；软件，D.F.、S.Y.-C.C.、V.R.；验证，D.F.、S.Y.-C.C.、V.R.、V.M.；初稿撰写，D.F.、A.D.、S.Y.-C.C.、V.R.；审阅与编辑，D.F.、A.D.、S.Y.-C.C.、V.R.、V.M.；可视化，D.F.、A.D.、V.R。

伦理声明

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。

数据可用性

本研究中使用和/或分析的数据集可根据合理请求向通讯作者获取。

补充信息

本文所表达的观点仅代表作者本人，并不代表富国银行的观点。本文仅供参考。本文所含内容均不应被视为投资建议。对于与本文相关的任何法律、税务和会计影响，富国银行均不作任何明示或暗示的保证，并明确予以免责声明。