arXiv:2304.03601v1 [quant-ph] 7 Apr 2023

用于点云数据量子机器学习的置换不变编码

Jamie Heredge[1*]、Charles Hill[1,2]、、Lloyd Hollenberg[1] 和 Martin Sevior [1]

[1*]墨尔本大学物理学院，澳大利亚维多利亚州帕克维尔 3010。[2]墨尔本大学数学与统计学院，澳大利亚维多利亚州帕克维尔 3010。

*通讯作者。电子邮箱：heredgej@student.unimelb.edu.au；贡献作者：cdhill@unimelb.edu.au；lloydch@unimelb.edu.au；martines@unimelb.edu.au；

摘要

量子计算为执行机器学习提供了一种潜力巨大的新方法。然而，已有研究表明，随着量子比特数量增加，若干量子机器学习技术的泛化能力会变差 [1]。我们通过展示一种具有更优泛化性能的置换不变量子编码方法来解决这一问题，并将其应用于点云数据（由点构成的三维图像）。点云天然具有关于点的排列顺序的置换对称性，因此是应用该技术的理想对象。我们的方法在量子编码中捕获了这种对称性：该编码包含所有置换的等权量子叠加态，因此对点的顺序置换保持不变。我们使用量子支持向量机，在数值模拟中测试了这种编码方法，以对取自球面或环面几何的点云进行分类。我们证明，随着点云所含点的数量增加，置换不变编码的准确率会提高，而非不变量子编码的准确率则会下降。这表明，将置换不变性融入编码能够提升模型的泛化能力。

关键词： 量子机器学习、量子计算、几何量子机器学习、量子编码方法、三维计算机视觉、点云数据

1 引言

量子机器学习（QML）是量子技术在现实应用中一个颇具前景的方向 [2]。近年来，人们开发了大量不同的技术，旨在利用量子计算机执行机器学习任务 [3, 4]，量子机器学习技术也已应用于众多领域，包括粒子物理学 [5, 6]，医疗数据 [7, 8]，空气动力学 [9] 和自然语言处理 [10]。在许多量子机器学习技术中，经典数据被编码到指数级更大的量子空间中，在那里数据可能更容易被分离 [11]。这被认为是量子优势相对于经典算法的一个潜在来源，前提是执行该编码的量子电路无法被经典地高效模拟 [12]。在尝试寻找合适的

针对真实世界数据的量子机器学习技术，使用适合该数据的优势编码方法至关重要。目前一个活跃的研究领域是探索在量子设备中编码或表示不同类型数据的方法，例如，寻找表示二维图像的技术 [13–15].

许多量子机器学习技术，例如量子支持向量机（QSVM） [11], ，其动机都源于这样一种思想：将经典数据编码到更高维的量子希尔伯特空间中，可以简化数据分类。用于将经典数据编码为量子态的电路架构会影响量子机器学习算法能够学习的函数类别 [16]。因此，在任何量子机器学习方法中，为数据找到最优的量子编码至关重要。然而，随着量子比特数量增加以及希尔伯特空间的维数随之增大，一些量子机器学习技术的泛化能力并不理想 [1]。为了改善泛化能力，人们尝试通过向方法中引入某种形式的归纳偏置来降低量子机器学习方法的表达能力。这些尝试包括投影核方法，即仅测量有限数量的量子比特，从而投影到较低维的空间中 [17],；通过调节量子核超参数来引入归纳偏置 [18],；以及基于变分态的方法，这类方法能够将归纳偏置直接编码到量子态中，并且已被证明能够在零和博弈学习的背景下改善泛化能力[19]。在本文中，我们提出了一种方法，用于在底层数据呈现置换对称性时，将归纳偏置引入量子编码。通过将量子编码后的量子态投影到对称子空间中，该方法以指数方式降低了编码的维数，从而在我们的实验中实现了更好的泛化能力。

在本研究中，我们考虑点云数据类型，它们是由一组三维点组成的三维图像。点云可能代表需要分类的各种物体（例如钢琴、汽车、树木）。这可能涉及在自动驾驶车辆中识别行人 [20]，或在高能物理学实验中对不同的粒子衰变事件进行分类 [21]。研究置换不变机器学习方法的影响时，点云是一种自然的数据类型。虽然它们有时也会表现出数据内部特有的对称性，例如旋转或平移对称性，但本文关注的是它们输入模型时点的顺序置换对称性，并提出一种将这种对称性编码到量子态中的方法。置换对称性是点云数据所具有的一种性质，通常不会在经典输入向量中得到体现。点云中的点不存在固有的排序。因此，如果为点云中的点指定了顺序，那么该顺序应当对于这些点标签的任意置换保持不变。经典计算机通常被迫在输入点 $\mathbf{p}_i$ 时为其指定顺序，因为数据必须存储在内存中的数组里，而数组对点具有内在的排序。考虑输入数组 $[\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2]$；交换该数组中的两个点会产生不同的数组 $[\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1]$ ，将其输入给某个算法时，可能会得到不同的结果。一般而言，一个机器学习模型分类器模型 $f([\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2])$，如果没有经过有意的构造，在输入相同点的不同置换 $f([\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2]) \neq f([\mathbf{p}_2,\mathbf{p}_1])$时，将返回不同的答案，然而实际上，点云不会因这种重新排序而发生物理变化。通过创建一种对点排序的置换具有不变性的编码，我们可以在尊重数据底层对称性的同时，以指数级方式降低编码态的有效维度。图 1 展示了一个点云示例，说明了输入中各点的置换不变性。

还有其他机器学习方法通过将对称函数构建到模型中来遵循这种置换对称性，例如经典 PointNet [23]中的最大池化函数以及所提出的 PointNet 的量子扩展 [24]。同样，几何量子机器学习领域的技术已经表明，可以构造一个遵循量子比特置换的变分电路（因此，如果为每个量子比特编码一个点，也就遵循点置换） [25–28]。我们在本文中讨论的技术有所不同：我们专注于将这些对称性实现到编码电路中，这意味着算法的分类部分可以自由采用任何形式。近期研究表明，置换不变算子，例如置换等变变分电路，可能是

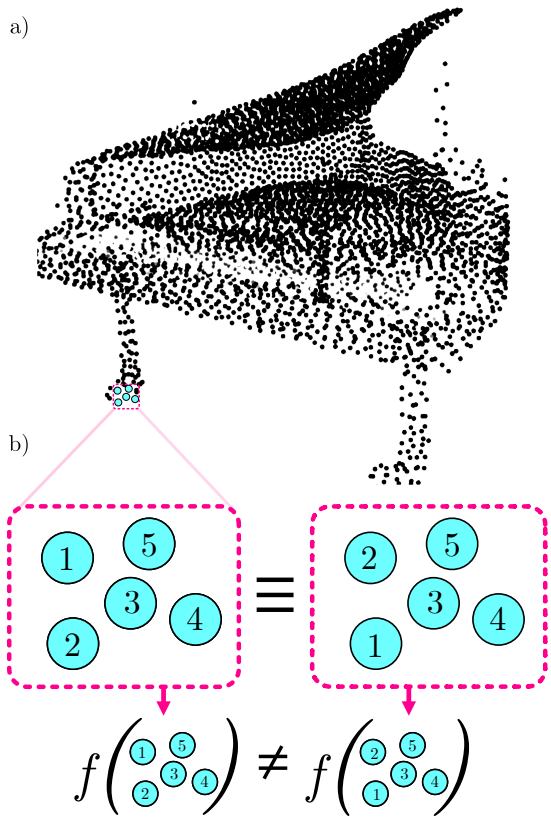

图 1 a) 使用 OpenAI 的 Point-E 演示生成的示例点云，提示词为“大钢琴” [22]。区分不同物体可以是一个使用点云数据的分类任务。b) 点云输入中的点置换对称性示意图。改变点云中各点的顺序，不会影响点云本身。然而，当点云作为经典输入数组存储在计算机内存中时，交换点的顺序会产生不同的数组。除非有意进行特殊构造（PointNet 就是如此） [23], , 一般的机器学习分类器函数（记为 f）可能会因输入中点的顺序置换不同而产生不同的分类输出

$$f\ x_1\ y_1\ z_1\ x_2\ y_2\ z_2\ \neq f\ x_2\ y_2\ z_2\ x_1\ y_1\ z_1$$

(,,,,,) (,,,,,)。

在某些条件下可进行经典模拟 [29]。在我们的案例中，量子模型不一定需要是置换不变算子，因为置换不变性已在编码步骤中得到体现。

2 置换不变编码

本节将在点云数据的背景下，从理论上概述置换不变量子态的结构和性质。选择点云作为这种编码的自然应用场景；不过，这种方法也适用于任何具有置换对称性的数据。我们将点云数据输入记为 X，并将其视为形式为 $X = [x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, ..., x_n, y_n, z_n]$ 的数值数组。因此，每个点云都由 n 个点组成，其中点云中的单个点可表示为 $\mathbf{p}_i = [x_i, y_i, z_i]$。首先，将每个点编码为量子态 $|\mathbf{p}_i\rangle$，所用量子电路为 U，由 k 个量子比特组成，并将三维经典数据$\mathbf{p}_i$ 映射为 2^k 维量子态 $U : \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}^{2^k}$。我们将此门作用于初始的 $|0\rangle^{\otimes k}$ 态，使得 $|\mathbf{p}_i\rangle = U(\mathbf{p}_i)|0\rangle^{\otimes k}$。虽然在我们的实验中，$U$ 是通过角度编码实现的，但这种通用技术可用于任何编码策略。为实现点交换不变性，我们构造一个处于所有 $|\mathbf{p}_i\rangle$ 置换态对称叠加中的量子态。对于仅含两个点的点云 X，即 $n = 2$，可将其表示为

$$|X_s\rangle = \mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle), \qquad (1)$$

它在两个点的顺序置换下保持不变。关于归一化常数 $\mathcal{N}$，需要注意的是，根据数据和编码方法 U，初始态 $|\mathbf{p}_1\rangle$ 和 $|\mathbf{p}_2\rangle$ 可能正交，也可能不正交。因此，对于 2 量子比特的情况，归一化常数 $\mathcal{N}$一般为

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\langle\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2)}}. \qquad (2)$$

点顺序不变的编码态 $|X_s\rangle$ 随后可通过量子支持向量机等技术进行评估，或传递给变分方法。由于输入量子态现在处于置换不变状态，量子分类算法$g(|X_s\rangle)$可采用任意设计，并且我们可以保证其在点顺序置换下保持置换不变性，如 $g\Big(\mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle+|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)\Big) =$

$g\Big(\mathcal{N}(|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle + |\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle)\Big)$ 无论量子分类函数的结构如何 g。这与一般的机器学习分类器$f([\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2])$形成对比，后者将其输入作为经典数组接受，根据输入中点的顺序不同，可能会给出不同的结果，使得 $f([\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2]) \neq f([\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1])$。对于 n 点，我们希望构造由以下内容定义的对称态

$$|X_s\rangle = \mathcal{N}_n \sum_{\sigma \in S_n} |\mathbf{p}_{\sigma_1}\rangle|\mathbf{p}_{\sigma_2}\rangle ... |\mathbf{p}_{\sigma_n}\rangle, \tag{3}$$

其中，我们对对称群中的所有置换求和 S_n。该对称态在对点进行任意置换后都保持不变。

通过将量子态组合成对称叠加态，我们利用态叠加这一固有的量子性质，将数据结构所具有的对称性实现于编码中。这种对称性利用使编码的表达能力得以降低，因为它将该态的有效维数呈指数级减少。考虑一个三量子比特态即可对此进行说明。一般而言，三量子比特态是 $2^3 = 8$ 维的，可以写成

$$\begin{aligned}|\psi\rangle = &\alpha_0|0\rangle|0\rangle|0\rangle \\ &+ \alpha_1|1\rangle|0\rangle|0\rangle + \alpha_2|0\rangle|1\rangle|0\rangle + \alpha_3|0\rangle|0\rangle|1\rangle \\ &+ \alpha_4|1\rangle|1\rangle|0\rangle + \alpha_5|1\rangle|0\rangle|1\rangle + \alpha_6|0\rangle|1\rangle|1\rangle \\ &+ \alpha_7|1\rangle|1\rangle|1\rangle.\end{aligned} \tag{4}$$

如果我们现在要求该态 $|\psi\rangle$ 关于其量子比特是完全对称的，那么通过交换方程4 中的量子比特，并确保该态在这一操作下保持不变，可以看出 $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3$ 以及 $\alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6$ [30]。因此，一个三量子比特的对称量子态实际上是 4 维的，其基态如下

$$\begin{aligned}|\psi\rangle = &\beta_0|0\rangle|0\rangle|0\rangle \\ &+ \beta_1(|1\rangle|0\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|0\rangle|1\rangle) \\ &+ \beta_2(|1\rangle|1\rangle|0\rangle + |1\rangle|0\rangle|1\rangle + |0\rangle|1\rangle|1\rangle) \\ &+ \beta_3|1\rangle|1\rangle|1\rangle.\end{aligned} \tag{5}$$

由此可知，一个相对于其量子比特具有置换不变性的 n 量子比特系统的维度为 $n+1$，该维度呈指数级缩小比 2^n [30]。在一般情况下，其中每个初- 始态$\mathbf{p}_i$ 具有 k 量子比特，已有研究表明，该对称态的维数是

$${}^{n+2^k-1}C_{2^k-1} = \frac{1}{(2^k-1)!} n^{2^k-1} + O(n^{2^k-2}), \tag{6}$$

其在 n 中呈现多项式级缩放；相比之下，一般情况下维度为 $(2^k)^n$，且维度会随 [30] 呈指数级增长。请注意，如果数据需要（例如出现训练数据欠拟合的情况），我们仍可通过打破对称性或增加每个点所使用的量子比特数 k，重新引入一定的表达能力。

本研究的理论结果采用了 Qiskit 态矢量模拟器，并结合算法中所述的解析对称化过程1 ，以数学方式构造置换不变量子态。关于如何在真实量子机器上实现这一过程的讨论，是第4节的重点。

3 球体与环面分类

我们比较了多种量子和经典机器学习技术在对两种点云数据分布——球体和环面——进行分类时的表现。为生成数据，我们从每种形状的表面随机抽取 n 个点，为每种分布构成一个点云。重复这一采样过程，直至总共获得 N 个点云样本，然后将生成的数据划分为训练集和测试集，分别占数据的80%和20%。随后，我们在测试集上评估各种模型的表现。接着，使用新生成的随机数据集重复整个过程，并记录10次重复实验的平均测试准确率。

球体和环面分布均以原点为中心。为确保球体和环面分布尽可能相似，对环面进行缩放，使环面分布表面上的点的平均大小与球体的半径相匹配。图中展示了这两种分布以及一个点云样本示例 2。所有数据

算法 1使用 Qiskit态矢量模拟器 和解析对称化，以实现具有点置换不变性的点云数据编码。该算法通过包含 $\mathcal{O}(n!)$ 次经典计算，以计算效率低为代价，直观地展示了编码的数学结构。

输入：数组 X 包含 n 个点 $\mathbf{p}_i$ 其中 $0 < i \leq n$1：对于 i，在 $(0, n]$ 中执行 2：在独立寄存器上对 $U(\mathbf{p}_i)|0\rangle^{\otimes k} = |\mathbf{p}_i\rangle$ 进行评估 3：使用态矢量模拟器评估 $|\mathbf{p}_i\rangle$ 4：结束循环 5：初始化空的对称态矢量 $|X_s\rangle$6：对对称群 S_n中的所有置换 σ 执行 7：$|X_\sigma\rangle \Leftarrow |\mathbf{p}_{\sigma_1}\rangle$ 8：$j \Leftarrow 2$ 9：当 $j \leq n$ 时执行 10：$|X_\sigma\rangle \Leftarrow |X_\sigma\rangle \otimes |\mathbf{p}_{\sigma_j}\rangle$ 11：$j \Leftarrow j + 1$ 12：结束 while 循环 13：$|X_s\rangle \Leftarrow |X_s\rangle + |X_\sigma\rangle$ 14：结束 for 循环 15：归一化 $|X_s\rangle \Leftarrow \frac{|X_s\rangle}{\sqrt{\langle X_s|X_s\rangle}}$ 16：返回 $|X_s\rangle$输出：置换不变态矢量 $|X_s\rangle$

进行了归一化，使其处于 $\frac{\pi}{2}$ 至 $-\frac{\pi}{2}$ 的范围内，从而可以将其编码为旋转角度。

我们测试了多种量子和经典技术，汇总于表 1中，其中一些算法包含置换不变性，而另一些则不包含。为了完全专注于编码方法，而无需考虑变分组件的结构，我们使用量子支持向量机，采用不同的编码电路选择对数据进行分类。对于有序置换不变编码，我们测试了几种不同的点编码电路 U 用于对单个点进行编码，并展示了性能最佳的电路结果，该电路记作 U_α ，同时还展示了一种更通用的点编码电路，该电路使用瞬时量子多项式 IQP编码 [11]，，记作 U_β。我们对所报告的不同方法作简要说明：

•置换不变 QSVM（最佳）——采用点编码电路的置换不变编码方法的量子支持向量机 U_α

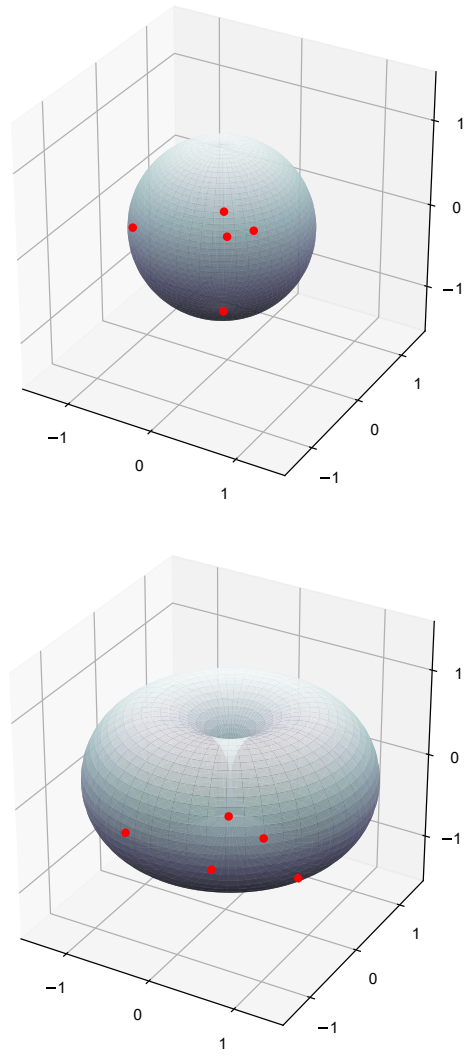

图 2（左）球体分布和（右）环面分-布表面，从中采样点以形成点云。每幅图中的红色点表示一个示例点云，其中包含从相应分布中抽取的 $n = 5$ 个点。每个数据集通过从这些分布中随机采样，生成一组 N 个不同的点云。

如图所示，该方法取得了最高准确率3。

• 置换不变 IQP QSVM - 一种采用置换不变编码方法的量子支持向量机，其中点编码电路 U_β 是 IQP 编码，如图 4所示。这是为了在

常规 IQP 编码和不变编码。

- IQP编码QSVM-AQSVM使用应用于输入中所有变量的IQP 编码（不具备置换不变性），如 Havlicek 等人所述。 [11]。
- PointNet——一种利用神经网络的经典点云分类算法，采用对称的最大池化函数来确保点顺序的置换不变性 [23]。PointNet运行了100个训练轮次。
- RBF 核 SVM- 使用径向基函数（RBF）核的经典支持向量机。超参数通过在交叉验证集上进行网格搜索进行了优化。

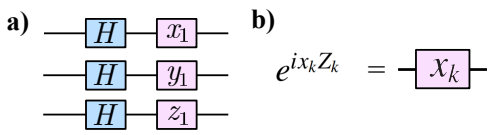

图 3a)在我们的研究中为球体 / 环面数据集找到的性能最佳点编码电路的单层 U_α ，该电路用于标题为“置换不变量子支持向量机（最佳）”的结果。b) 粉色方框表示参数化 Z 旋转门。

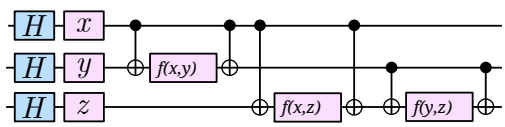

图 4a) 使用IQP编码 U_β 的点编码电路 [11],，其对应于标题为“置换不变IQP 量子支持向量机”的结果。纠缠函数定义为 $f(x, y) = \frac{1}{\pi}(\pi - x)(\pi - y)$。

我们的结果来自使用 Qiskit进行的无噪声模拟 [31]。图5展示了随着点云中的点数增加，各种技术如何扩展。尽管更多的点能够提供更多信息，但非置换不变IQP 量子支持向量机的性能会随着点数增加而下降。这一发现与先前的研究一致，后者表明，随着量子比特数量增加，通用 QSVM 方法可能难以实现泛化 [1]。相比之下，置换不变 IQP 编码的准确率随着点的数量增加。这一结果表明，对称化技术可能有助于避免由于编码中的表达能力降低而导致的性能缩放不佳。此外，我们的测试显示，使用最佳编码电路 U_α 会生成一个分类器，该分类器在此数据集上的性能可以优于经典 PointNet算法。这一点在表 2 所示的结果中得到了进一步证明。结果显示，对于小型数据集，置换不变量子编码优于非置换不变量子/经典方法以及置换不变经典方法 PointNet。

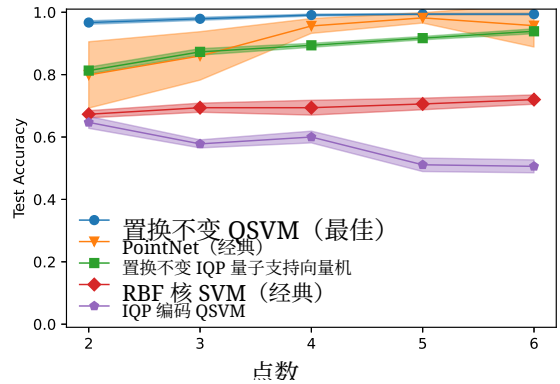

图 5 随着每个点云中的点数量增加，10 次重复实验的平均准确率。阴影区域表示平均准确率的误差界。每次实验均由一个包含500 个点云的随机数据集样本组成。每个点云均通过从环面或球体分布中随机采样一定数量的点生成。训练数据和测试数据分别占总数据的 80% 和 20%。

数据样本规模增大的影响如图所示6。在这种情况下，可用数据更多，但点的数量（因而量子比特的数量）固定。正如预期，所有经过测试的算法通常都会随着数据样本增多而有所改进。再次与图5 比较可见，虽然 IQP 编码通常会随着数据样本增多而改进，但在量子比特数量增加时，它明显表现不佳。置换不变编码则没有显现出这一问题。

对于较大的数据样本，PointNet 的准确率开始接近置换不变的量子支持向量机编码。值得注意的是，PointNet 使用深度神经网络，共包含 350 万个参数；当训练数据量较大时，这些参数能够得到更好的利用。

表 1 对测试的各种算法进行总结，指出其设计中是否包含置换不变性，以及其属于量子方法还是经典方法。

	量子	经典
置换不变	置换不变 QSVM（最佳） 置换不变 IQP QSVM	PointNet
非置换不变	IQP 编码 QSVM	RBF 核 SVM

表 2 10 次重复实验的平均准确率。每次实验都使用 Qiskit *statevector simulator*，并从随机数据集中抽取一个样本，该样本包含 100 个点云，每个点云由 3 个点组成。训练数据和测试数据分别占总数据的 80% 和 20%。

算法	准确率
置换不变（最佳）	0.950 ± 0.015
PointNet（经典）	0.765 ± 0.038
RBF 核 SVM（经典）	0.595 ± 0.022
置换不变 IQP 量子支持向量机	0.840 ± 0.038
IQP 编码 量子支持向量机	0.505 ± 0.036

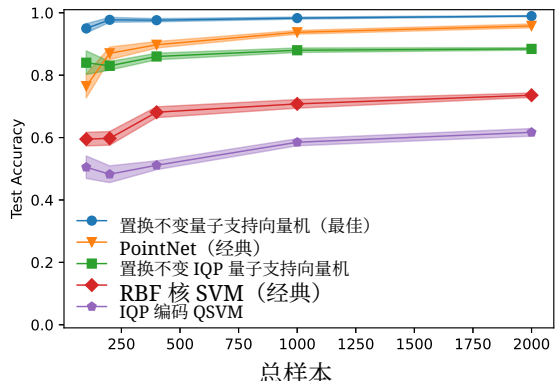

图 6 随着训练和测试数据集中的样本数量增加，10 次重复实验的平均准确率。阴影区域表示平均准确率的误差界。每次实验都由一个点云的随机数据集样本组成。每个点云都是通过从环面或球体分布中随机采样3 个点生成的。训练数据和测试数据分别包含总数据的 80% 和 20%。

此外，Point-Net 算法还涉及应对点云数据中几何对称性的其他方面，例如旋转不变性，而这些方面尚未在这种量子方法中实现。将这些几何对称性纳入编码可能是进一步研究的主题。

4 电路实现

第 3 节的结果表明，置换不变编码可能适用于点云数据。然而，这些结果是通过解析模拟得出的，需要 $\mathcal{O}(n!)$ 次经典运算。下面我们将讨论直接在真实量子设备上实现这些编码的实际问题。已有研究表明，无法通过酉变换完美实现对称化过程 $|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle \Rightarrow \mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)$[32]。不过，可以使用受控交换门和辅助量子比特，以概率方式实现该过程 [30]。对于仅包含两个点的数据样本，我们从每个点分别编码在一个独立量子态 $|\mathbf{p}_1\rangle = U(\mathbf{p}_1)|0\rangle^{\otimes k}$ 和 $|\mathbf{p}_2\rangle = U(\mathbf{p}_2)|0\rangle^{\otimes k}$ 开始，编码过程使用编码电路 U。对称化过程需要生成以下量子态

$$|X_s\rangle = \mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle),$$

使得交换输入中两个点的顺序不会改变这一新的量子态。在双量子比特情况下，可以通过使用 Hadamard 门将一个辅助量子比特制备为状态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$，并利用它对两个输入态 $|\mathbf{p}_1\rangle$ 和 $|\mathbf{p}_2\rangle$ 应用受控交换门，随后再对该辅助量子比特应用另一个 Hadamard 门来实现这一点。此操作使系统处于以下状态

$$\frac{1}{2}|0\rangle(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle+|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)+\frac{1}{2}|1\rangle(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle-|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle), \tag{7}$$

其中包含置换对称化态和反对称化态。通过测量辅助量子比特，并在辅助量子比特处于 $|1\rangle$ 态（对应于反对称态）时丢弃任何结果，当辅助量子比特被测量处于 $|0\rangle$ 态时，我们得到置换对称化态。检查方程 7 可以看出，概率

测量辅助量子比特 $|0\rangle$态的结果为 $\frac{1}{2}(1+|\langle \mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2)$ [32]，这意味着在最坏情况下，当输入态彼此正交时，概率为 $\frac{1}{2}$。该二量子比特系统的对称化过程如图 7所示。

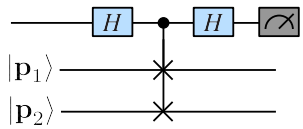

图 7 两个点的置换对称化电路。该电路由一个 $|p_1\rangle$ 态、一个 $|p_2\rangle$ 态，以及一个执行受控交换操作的辅助量子比特组成。该电路的最终态为 $\frac{1}{2}|0\rangle|\ _1\rangle|\ _2\rangle+|\ _2\rangle|\ _1\rangle+\frac{1}{2}|1\rangle|\ _1\rangle|\ _2\rangle-|\ _2\rangle|\ _1\rangle$ $|X\rangle$ (pppp) (pppp)。辅助量子比特测量为态 $|0\rangle$ 时，该态是对称的；测量为态 $|1\rangle$时，则是反对称的。通过测量辅助量子比特并舍弃测量结果为态 $|1\rangle$的情况，我们得到所需的对称量子态 $|X_s\rangle=\mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle+|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)$。

这一过程可以利用 Barenco 等人提出的技术推广到 n 个量子比特[30]。该技术通过使用辅助量子比特，迭代地应用受控交换对称化操作。在这一技术中，酉算子 V_f 将 f 个辅助量子比特制备为以下状态

$$\frac{1}{\sqrt{f+1}}(|00...0\rangle+|10...0\rangle+|01...0\rangle+...+|00...1\rangle). \tag{8}$$

这是为了实现 $f=1$ 到 $f=n-1$ 从而总共有 $c=\frac{1}{2}n\,(n-1)$ 个辅助量子比特。随后，利用这些辅助量子比特对输入态应用受控交换门，然后在测量辅助量子比特之前，对其应用酉操作 $V_f^\dagger$ 的逆操作。这样便会递归地对输入态应用每一种可能的量子比特置换；当辅助量子比特在态 $|0\rangle^{\otimes c}$ 中被测量时，即可得到所需的对称叠加态。四量子比特情形的示例电路如图8所示。当每个态由多个量子比特组成时，无需额外的辅助量子比特。相反，只需以相同的方式对额外的量子比特应用更多受控交换门 [32]即可。图 9展示了这一过程，其中给出了仅由两个点组成的二维点云的对称化过程。

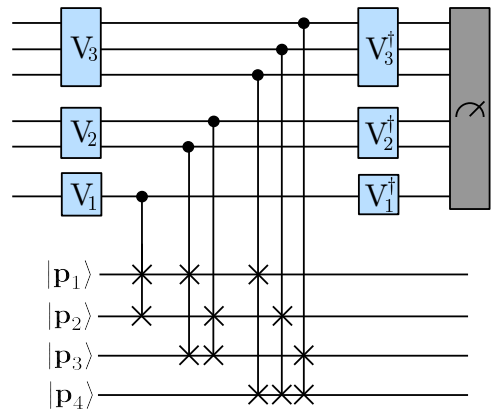

图 8 Barenco 等人提出的置换对称化过程的推广 [30]，，应用于包含四个输入态的电路。酉算子 V_3 对辅助量子比特进行变换，使其处于状态 $\frac{1}{\sqrt{4}}(|000\rangle+|100\rangle+|010\rangle+|001\rangle)$。类似地，$V_2$ 将其制备为 $\frac{1}{\sqrt{3}}(|00\rangle+|10\rangle+|01\rangle)$，而 V_1 将其制备为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$。通过实现受控交换门，这些辅助量子比特将对输入态执行所有可能的置换。应用受控交换门后，输入态的所有置换将形成等权叠加态；对辅助量子比特应用 $V^\dagger$ 后，再测量这些辅助量子比特，结果为 $|000000\rangle$ 态。此过程可推广至任意数量的输入态。

这种概率性实现方式的一个缺点是，当辅助量子比特不处于态 $|0\rangle^{\otimes c}$时，需要舍弃相应的态。发生这种情况的概率取决于这些态本身：如果输入态恰好完全相同，该概率为 1；而随着重叠度降低，该概率也会降低。对于两个量子比特的情况，测得辅助量子比特处于态 $|0\rangle$ 的概率可表示为 $\frac{1}{2}(1+|\langle \mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2)$。在本研究中，我们在点编码电路 U 中采用角度编码，以生成输入态 $|\mathbf{p}_1\rangle$和 $|\mathbf{p}_2\rangle$。这种技术使两个特定数据点彼此正交的概率相对较低。因此，即使数据点数量增加，平均成功概率仍能保持相对较高 n。关于这一结论的更多细节和支持证据见附录 E。

虽然这种方法适用于小型点云，但当点云包含大量点时，基于辅助量子比特的概率对称化的扩展性就会成为问题。这是因为，随着辅助量子

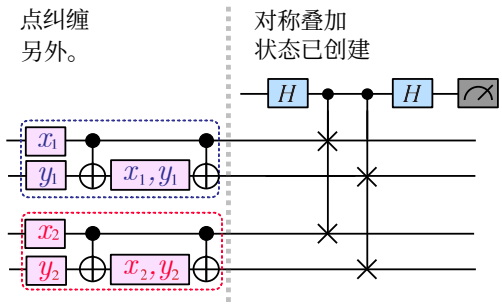

图 9 由两个点组成的二维点云的置换对称化。在左侧，我们首先使用编码函数 U 为每个点创建一个纠缠态。在右侧，我们对双态系统实施对称化过程。如果我们舍弃辅助量子比特处于 $|1\rangle$ 状态时的所有测量结果，就能制备出该点云的对称编码。

比特数量增加，电路中的门数量以及需要丢弃的状态数量也会随之增加。另一种方法是通过生成如下形式的状态来近似实现这些状态 $|X_e\rangle \approx \mathcal{N}_e(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)$。这或许可以通过遗传态制备算法 [33]或量子生成对抗网络 [34]等技术实现。生成具有一定误差 ϵ 的近似对称态，甚至可以用于引入参数化的对称性破缺项，从而帮助微调模型；已有研究表明，这在某些变分量子本征求解器中很有用 [35]。通过对称性破缺来增加问题维数的参数化方法，既能控制编码的表达能力，也有望使该编码更难以进行经典模拟。

或者，也可以不丢弃任何状态，而改用其他叠加态（相对于不同点的反对称与对称置换项的混合）。例如，在两点的情况下，可以接受反对称态$|X_a\rangle = \mathcal{N}_a(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle - |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle)$。这种状态具有准对称性：置换点会导致量子态发生相位偏移，但其相对幅度保持不变。准对称或近似对称编码对量子机器学习技术的影响，尤其是在模型可能能够学会克服这一特性的情形下，是一个值得进一步研究的课题。

5 结论

本研究提出了一种将点云数据编码为量子态的方法，该量子态对点的顺序置换保持不变；该方法通过对称化过程，构造点的所有顺序置换所对应的量子叠加态。这使编码的维数呈指数级降低，从而提升了编码的泛化能力。研究通过以下结果验证了这一点：随着点数增加，置换不变的 IQP 编码准确率随之提高，而非置换不变的 IQP 编码准确率则随点数增加而下降。这些发现表明，该方法或可望解决 QSVM 的泛化性能随量子比特数量增加而变差的问题 [1, 17], ，并有望应用于目标识别、粒子物理学等领域的未来量子机器学习算法。

本研究展示了一种可提升置换不变数据泛化能力的编码方法，但这并不必然保证其具有量子优势。近期研究结果表明，在某些条件下，量子比特置换不变算子可因维数降低而由经典方法高效处理 [29]。我们的工作与采用等变变分模型的方法 [25–28] 的一个关键区别在于，本文提出的方法将置换不变性直接纳入编码步骤，而不考虑分类模型。因此，变分模型无需具备置换不变性，也能捕捉这种对称性。进一步研究如何高效实现该技术，或可通过解决概率对称化电路中辅助量子比特按 $\mathcal{O}(n^2)$ 规模增长等问题 [30]，改进这一技术。

未来的工作可以重点研究将这种编码扩展到其他类型的对称性，例如旋转对称性或平移对称性，这可能与点云以及图像或时间序列等其他数据类型相关。那里

同样还可能面临这样的挑战：如何在真实设备上找到高效的实现方式，并评估这些编码在存在噪声时的表现。这里提出的技术可用于任何表现出置换不变性的数据，包括输入数据本身为量子数据的情况。不过，实际应用将取决于量子机器的技术进步速度；然而，近期的应用案例可以聚焦于仅包含少量点的点云，这在粒子物理学数据中往往很常见。

致谢。本研究得到了墨尔本大学通过在该大学设立IBM量子网络中心所提供的支持。本研究得到了澳大利亚研究理事会DP210102831号拨款的支持。JH感谢研究培训计划奖学金和N.D. Goldsworthy奖学金的支持。CDH获得了Laby基金会提供的研究资助。

声明

数据可用性。 本研究期间生成和/或分析的数据集，可根据合理请求向通讯作者获取。

竞争利益。代表所有作者，通讯作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1]Huang, H.-Y., Broughton, M., Mohseni, M., Babbush, R., Boixo, S., Neven, H., McClean, J.R.：量子机器学习中的数据力量。《自然·通讯》**12**(1), 2 6 3 1(2021). https://doi.org/10.1038/s41467-021-22539-9[2] Biamonte, J., Wittek, P., Pan- cotti, N., Rebentrost, P., Wiebe, N., Lloyd, S.：量子机器学习。《自然》**549**(7671)， 195–202 (2017).https://doi.org/10.1038/nature23474[3] Zeguendry, A.,Jarir, Z.,Quafafou,M.：量子机器学习：综述与案例研究。《熵》**25**(2), 287 (2023)。https://doi.org/10.3390/e25020287

[4] Sajjan, M.,Li, J., Selvarajan, R., Sureshbabu, S.H., Kale, S.S., Gupta, R., Singh, V., Kais, S.：面向化学与物理学的量子机器学习。《化学学会评论》**51**(15)，6475–6573 (2022).https://doi.org/10.1039/D2CS00203E[5] Heredge, J., Hill, C., Hollenberg, L., Sev- ior, M.：用于B介子衰变连续谱抑制的量子支持向量机。《大科学计算与软件》**5** (2021).https://doi.org/10.1007/s41781-021-00075-x[6] T¨uys¨uz, C., Rieger, C., Novotny, K.,Demirk¨oz, B., Dobos, D., Potamianos, K., Vallecorsa, S., Vlimant, J.-R., Forster, R.：用于粒子径迹重建的混合量子经典图神经网络。Quantum Machine Intelligence**3**(2),29 (2021).https://doi.org/10.1007/s42484-021-00055-9[7] Pregnolato, M., Zizzi, P.：SARS-CoV-2刺突蛋白与ACE2的类纠缠结合。Quantum Machine Intelligence**5**(1)， 8 (2023).https://doi.org/10.1007/s42484-023-00098-0[8] Azevedo, V., Silva, C., Dutra, I.：用于乳腺癌检测的量子迁移学习。Quantum Machine Intelligence**4**(1)， 5 (2022).https://doi.org/10.1007/s42484-022-00062-4[9] Yuan, X.-J., Chen, Z.-Q., Liu, Y.-D., Xie, Z., Jin, X.-M., Liu, Y.-Z., Wen, X., Tang, H.：用于空气动力学分类的量子支持向量机（2022）ar Xiv:2208.07138

[10] Meichanetzidis, K.,Toumi,A.,deFelice, G., Coecke, B.：量子计算机上的语法感知句子分类。Quantum Machine Intelligence **5**（1），10（2023）。https://doi.org/10.1007/s42484-023-00097-1

[11]Havl´ıˇcek, V., C´orcoles, A.D., Temme, K., Harrow, A.W., Kandala, A., Chow, J.M., Gambetta, J.M.: 使用量子增强特征空间进行监督学习。《自然》**567**(7747), 209–212（2019）。https://doi.org/

10.1038/s41586-019-0980-2

[12]Liu, Y.、Arunachalam,S.、Temme, K.：《监督机器学习中严谨且稳健的量子加速》。《自然》物理学**17**（9），1013–1017（2021）。https://doi.org/10.1038/s41567-021-01287-z

[13]Lisnichenko, M., Protasov, S.：量子图像表示：综述。Quantum Machine Intelligence **5**(1), 2(2022)。https://doi.org/10.1007/s42484-022-00089-7

[14] Anand, A., Lyu, M., Baweja, P.S.,Patil, V.：量子图像处理。arXiv（2022）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2203.01831

[15] West, M., Sevior, M., Usman, M.：用于增强图像分类的反射等变量子神经网络（2022）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2212.00264

[16]Schuld, M., Sweke, R., Meyer, J.J.：数据编码对变分量子机器学习模型表达能力的影响。Phys. Rev.A **103**,032430（2021）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.032430

[17]K¨ubler, J.M., Buchholz, S., Sch¨olkopf, B.: 量子核的归纳偏置（2021）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2106.03747

[18] Shaydulin, R., Wild, S.M.:量子机器学习中核带宽的重要性。Phys. Rev. A **106**, 042407（2022）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.042407

[19] Bowles, J., Wright,V.J., Farkas,M.,Killoran, N., Schuld, M.: 量子机器学习中的情境性与归纳偏置。arXiv. arXiv:2302.01365 [quant-ph]（2023）。http://arxiv.org/abs/2302.01365 访问日期: 2023-03- 24

[20]Chen, S., Liu, B., Feng, C., Vallespi-Gonzalez, C., Wellington, C.: 自动驾驶的三维点云处理与学习：对地图创建、定位和感知的影响。IEEESignal Processing Mag- azine **38**(1), 68–86（2021）。https://doi.org/10.1109/MSP.2020.2984780

[21]Mikuni,V., Canelli, F.：应用于对撞机物理学的点云变换器。机器学习：科学与技术 **2**（3），035027（2021）。https://doi.org/10.1088/2632-2153/ac07f6[22] Nichol, A., Jun, H.,Dhariwal, P., Mishkin,P.,Chen,M.：Point-E：从复杂提示生成三维点云的系统。arXiv（2022）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2212.08751[23]Qi, C.R., Su, H., Mo, K.,Guibas, L.J.：PointNet：用于三维分类和分割的点集深度学习。arXiv（2016）。https://doi.org/10.48550/arxiv.1612.00593[24] Shi,R., Tang,H., Jin, X.-m.：通过投影使用Nesterov加速梯度估计训练量子PointNet。（2020）。发表于第三十四届神经信息处理系统会议（NeurIPS 2020）第一届机器学习量子张量网络研讨会。https://tensorworkshop.github.io/NeurIPS2020/accepted papers/simptnetcameraready v2.pdf[25]Meyer, J.J., Mularski, M., Gil-Fuster, E., Mele, A.A., Arzani,F., Wilms,A., Eisert,J.：利用变分量子机器学习中的对称性不变性。arXiv（2022）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2205.06217[26] Nguyen, Q.T., Schatzki, L., Braccia, P., Ragone, M., Coles, P.J., Sauvage,F., Larocca,M.,Cerezo, M.：等变量子神经网络理论。arXiv（2022）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2210.08566[27] Schatzki, L., Larocca, M., Nguyen,Q.T.,Sauvage, F., Cerezo, M.：置换等变量子神经网络的理论保证（2022）。https://arxiv.org/abs/2210.09974[28]Kazi, S., Larocca, M., Cerezo, M.：关于 S_n-等变 k-体门的通用性（2023）。https://arxiv.org/abs/2303.00728

[29]Anschuetz、E.R.、Bauer、A.、Kiani、B.T.、Lloyd、S.：用于模拟对称量子系统的高效经典算法。arXiv:2211.16998 [quant-ph]（2023）。https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.16998

[30]Barenco, A.、Berthiaume, A.、Deutsch, D.、Ekert, A.、Jozsa, R.、Macchiavello, C.：通过对称化稳定量子计算。arXiv（1996）。https://doi.org/10.48550/arxiv.quant-ph/9604028

[31] Abraham, H., AduOffei, Agarwal, R., Akhalwaya, I.Y., Aleksandrowicz, G.,等ˇCepulkovskis：Qiskit：用于量子计算的开源框架（2019）。https://doi.org/10.5281/zenodo.2562110

[32]Buzek, V., Hillery, M.：量子比特的最优操控：通用量子纠缠器。Physical Review A **62**(2), 022303（2000）。https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.022303

[33]Creevey, F.M.,Hill, C.D.,Hollenberg, L.C.L.：GASP——用于状态制备的遗传算法（2023）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2302.11141

[34] Zoufal, C., Lucchi, A., Woerner, S.：用于学习和加载随机分布的量子生成对抗网络。《npj 量子信息》**5**(1), 1–9 (2019)。https://doi.org/10.1038/s41534-019-0223-2

[35]Park, C.-Y.：通过对称性破缺层在变分量子本征求解器中高效制备基态。arXiv（2021）。https://doi.org/10.48550/arxiv.2106.02509

附录 A 实现

本研究采用的方法是量子支持向量机（量子支持向量机）方法。量子支持向量机技术基于将经典数据（记为 X）编码到更高维空间中，以执行分类任务。编码电路 $\mathcal{U}$ 建立了一个映射 $\mathcal{U}: X \rightarrow |\psi(X)\rangle\langle\psi(X)|$，将经典数据 X 转换为由密度矩阵 $|\psi(X)\rangle\langle\psi(X)|$表示的量子态。重要的是，无需显式定义高维编码 $|\psi(X)\rangle\langle\psi(X)|$，只需定义高维空间中数据点之间的内积，即 $|\langle\psi(X_i)|\psi(X_j)\rangle|^2$。两点 i 和 j之间的内积成为核矩阵 K的条目 $K_{i,\ j}$。因此，实际的设备实现包括计算两个量子态之间的重叠度，以近似核矩阵；该矩阵由测量以下量值确定$K_{i,\ j} = |\langle 0|\mathcal{U}(X_i)\mathcal{U}^{\dagger}(X_j)|0\rangle|^2$。因此，需要一个编码电路 $\mathcal{U}$，其中包括所提出的置换对称化步骤及其共轭版本。

在模拟实现中，我们采用 Qiskit 态矢量模拟器，通过数学方法确定精确的对称态并计算核函数。一个点云 X 包含 n 个点，点 i 的坐标为 $\mathbf{p}_i$。在我们的编码电路 $\mathcal{U}$中，每个点 $\mathbf{p}_i$ 最初都通过点编码电路U 编码为量子态：$\mathbf{p}_i \rightarrow |\mathbf{p}_i\rangle$。由于此过程使用了态矢量模拟器，因此所有 $|\mathbf{p}_i\rangle$的振幅都是已知的。于是，我们可以通过求所有点量子态的张量积来构造一个置换。随后，对所有 $n!$ 个可能的置换求和，即可得到整个点云的置换不变态矢量$|X_s\rangle = \mathcal{N}\sum\sigma \in S_n|\mathbf{p}_{\sigma_1}\rangle|\mathbf{p}_{\sigma_2}\rangle\cdots|\mathbf{p}_{\sigma_n}\rangle$，并对该状态进行归一化。因此，可以直接计算任意两个点云的量 $|\langle\psi(X_i)|\psi(X_j)\rangle|^2$。进而，无需模拟完整电路，便能以比经典方式模拟完整电路更简单的方式，计算数据集的整个核矩阵。本文所展示的理论结果以此算法为基础。置换不变态的生成过程总结于算法 1。

在本研究中，我们采用量子支持向量机方法，仅关注编码步骤，而不考虑任何变分拟设结构。然而，在实践中，使用第 4 节讨论的实际电路实现时，量子支持向量机方法可能效率较低，因为使用该方法计算核矩阵元素时，需要同时构造两个置换不变态。这意味着在实际应用中，使用置于编码电路之后的变分拟设电路可能更高效。

附录 B 分布规格

环面分布使用以下方法生成

$$x = \Big(1 + \cos(s)\Big)\cos(t) \tag{B1}$$

$$y = \Big(1 + \cos(s)\Big)\sin(t) \tag{B2}$$

$$z = \sin(s). \tag{B3}$$

随后计算得出，该分布中各点的平均模长约为 1.28。接着，我们按此因子缩小该分布，使平均模长为 1，与球体的半径相符。

附录 C 概率对称编码

此处我们将讨论使用 Barenco 等人建议的电路制备对称态时，最坏情况下成功概率的缩放。 [30] 回顾图 7 所示的双量子比特示例，我们从处于状态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle$ 的控制量子比特开始。该控制量子比特用于控制交换门，该门作用于两个初始态 $|\mathbf{p}_1\rangle$ 和 $|\mathbf{p}_2\rangle$，从而得到以下状态

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle). \tag{C4}$$

随后，该过程在测量控制量子位之前对其应用一个 Hadamard 门。

Z基。这将使状态变为以下形式

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle) + \frac{1}{2}|1\rangle(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle - |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle) \tag{C5}$$

由此，测量辅助量子比特处于 $|0\rangle$ 态的概率可通过应用概率算符 $P(\mathbf{0}) = \langle\psi|\Big(|0\rangle\langle 0| \otimes I \otimes I\Big)|\psi\rangle$得到。可将其写为

$$\frac{1}{4}\Big(\langle\mathbf{p}_1|\langle\mathbf{p}_2| + \langle\mathbf{p}_2|\langle\mathbf{p}_1|\Big)\Big(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle\Big), \tag{C6}$$

然后可计算得到

$$\frac{1}{2}\Big(1+|\langle\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2\Big). \tag{C7}$$

请注意，在 $|\langle\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle| = 0$的情况下，这一数值所能达到的最低概率是$_{1\ 2}$ 。一旦我们测量 $|0\rangle$ 辅助量子比特，我们就会将该状态坍缩为对称叠加，该叠加在量子比特置换下保持不变。我们可以将该状态写为

$$|X_s\rangle = \mathcal{N}(|\mathbf{p}_1\rangle|\mathbf{p}_2\rangle + |\mathbf{p}_2\rangle|\mathbf{p}_1\rangle).$$

为了计算归一化常数 $\mathcal{N}$，只需注意到 $|\langle X_s|X_s\rangle| = 1$ ，由此我们可以计算

$$|\mathcal{N}|^2(2 + 2|\langle\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2) = 1, \tag{C8}$$

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{2(1+|\langle\mathbf{p}_1|\mathbf{p}_2\rangle|^2)}}. \tag{C9}$$

附录 D 概率性对称辅助量子比特制备

在 Barenco 等人提出的方法中。 [30]其中一个步骤包括应用一个酉变换 V_f 将 f 辅助量子比特制备为态

$$\frac{1}{\sqrt{f+1}}(|00...0\rangle + |10...0\rangle + |01...0\rangle + ... + |00...1\rangle) \tag{D10}$$

为了创建这一状态，我们需要定义两个酉算子

$$R_f = \frac{1}{\sqrt{f+1}}\begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{f} \\ \sqrt{f} & 1 \end{pmatrix}, \tag{D11}$$

$$T_f, j = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{f-j+1}} & \frac{\sqrt{f-j}}{\sqrt{f-j+1}} & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{f-j}}{\sqrt{f-j+1}} & \frac{1}{\sqrt{f-j+1}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{D12}$$

如果我们有 f 个控制量子比特，且它们初始处于 $|0\rangle^{\otimes f}$ 态。那么，我们可以通过对第一个量子比特应用 R_f，并对从 $j = 1$ 到 $j = f-1$ 的相邻量子比特应用 $T_f,\ j$，来制备所需的态。整个过程会生成酉操作 V_f。对 $f = 1$、2、..... $n-1$ 重复此过程，其中总共有 n 个量子比特需要对称化，最终使用的辅助量子比特总数为 $c = \frac{1}{2}n(n-1)$。

附录 E 对称态制备的成功概率

我们简要研究了使用 Barenco 等人提出的概率性技术制备置换对称态时的成功概率。 [30]我们使用随机输入进行角度编码，以生成初始态，结果如表 E1 所示。

表 E1 使用 X旋转门进行角度编码，随机初始化输入态时，生成置换对称化态的平均概率 [30]。这对应于测量辅助量子比特处于状态$|0\rangle^{\otimes c}$ 的概率。每个电路均使用 Qiskit *qasm simulator* 运行 10,000 次测量，并统计测得 $|0\rangle^{\otimes c}$ 的比例。随后使用每次随机初始化的输入态，分别重复运行 1000 次，并报告所有运行中得到的平均概率。请注意，概率下界要低得多，但使用角度编码随机初始化输入态时，不太可能达到该下界。

初始态 n	平均概率
2	0.842
3	0.752
4	0.630
5	0.530

当输入态初始化为彼此最大程度正交时，得到的概率最低。请注意，实际使用随机初始态时，平均概率远高于此值，因为随机态不太可能彼此最大程度正交。还要注意，如果使用基态编码而非角度编码，那么出现正交态的可能性可能会高得多，因此成功实现态对称化的机会会显著降低。