arXiv:2603.16321v1 [quant-ph] 17 Mar 2026

量子电路究竟如何学习：对真正量子贡献的因果识别

Cyrille Yetuyetu Kesiku[1]* 和 Begonya Garcia-Zapirain[1] *Department of Computer Science, Electronics and Telecommunications, University of Deusto, Bilbao, Spain*(日期：2026年3月18日)

如何将量子机器学习中的性能增益归因于真正的量子资源，而非经典架构扩展，仍是一项尚未解决的方法学挑战。为此，我们提出反事实因果中介框架，将架构间性能差异分解为直接效应（归因于电路参数化和表达能力）以及由量子信息论观测量介导的间接效应；这些观测量包括纠缠熵、纯度、线性熵和量子互信息。将该框架应用于五种电路拓扑结构和三个基准数据集（涵盖 43 种经验证的配置）后发现，直接架构贡献系统性地超过量子介导效应，平均比率为 13.1:1，平均间接贡献为 0.82%。这些结果表明，当前的变分量子电路远未发挥其量子潜力，而基于原则的资源感知型电路设计，是实现可测量的量子介导性能增益的一条可行路径。

一、引言

量子机器学习（QML）[1] 已成为在含噪声中等规模量子（NISQ）时代 [2]实现实际优势的一条有前景的途径。人们的核心预期是，量子系统能够利用纠缠、叠加和量子关联等内禀的非经典现象，以经典模型 [1, 3]难以甚至无法实现的方式编码、处理和提取信息。以一个分析医学影像数据的量子电路为例：随着电路深度增加，纠缠随之增强，准确率也有所提高。但这种提升究竟源自真正的量子关联，还是仅仅源于参数数量增加和经典表达能力增强？这一问题体现了量子机器学习核心处一个深刻的概念鸿沟。

尽管变分量子算法和混合架构在从模式识别到动力系统预测等任务中迅速发展 [4], ，我们仍缺乏严谨的方法来确定量子资源如何影响模型性能 [5]。该领域主要依赖经典模型与量子模型之间的性能比较，并将性能提升解读为量子行为的间接证据 [3, 6]。然而，架构选择——电路深度、参数数量、经典优化方案以及纠缠连接性 [7, 8] ——本身就可能带来显著的性能变化[9]，而这些变化与量子效应无关。更深的电路或许只是函数逼近能力更强，而与其是否产生纠缠无关。目前我们无法回答：（i）何时量子模型是否真的会“利用”量子资源来提升性能？（ii）哪些量子属性——纠缠、相干性、关联——发挥中介作用，促成性能提升？（iii）我们如何区分量子介导的效应与一般的架构效应 [7]？如果缺乏这样的理解，量子优势的主张就难以解读、复现或验证 [5]。这种黑箱方法既阻碍了理论理解，也妨碍了实际部署，使我们几乎无法预测：在不同量子属性以不同速率退化的含噪硬件上，模拟中观察到的优势能否持续。这种对机制理解的缺失造成了一个关键的模糊之处：当量子模型在保持可由经典计算模拟 [10, 11], 的同时取得有竞争力的性能时，我们无法判断这反映的是量子计算的根本局限，还是仅仅未能充分利用现有量子资源——这一差别对理论理解和硬件投资优先事项[5, 6]都有深远影响。在这项工作中，我们提出了一个反事实因果中介 [12, 13]框架，对量子资源如何影响预测性能进行具有机制解释且有数学依据的分解。我们不再追问“发生了什么？”，而是提出反事实问题：“如果电路深度增加的同时，纠缠仍保持在基线水平，会发生什么？”我们不再将量子电路视为不透明的函数逼近器 [4], ，而是将学习过程形式化为一个因果系统 [14] ：架构干预（更深的电路、更丰富的连接性）通过直接架构效应和由特定量子属性介导的间接效应[8]影响结果。借助可微量子电路 [15]以及量子信息论观测量——纠缠.....

* kesiku.cyrille@deusto.es

熵、纯度、线性熵和量子互信息，我们识别出量子资源促进学习的可解释因果路径 [16]。我们构建了一个结构方程模型，将性能总差异分解为直接效应（归因于参数数量和优化几何）与间接效应（由量子资源介导）。这一分解满足严格的因果可识别性条件，从而确保反事实解释有效。

我们提出两项指标：平均绝对中介贡献(MAMC)，用于衡量 Quantum 中介变量的平均因果影响；以及相对 *Quantum* 贡献(RQC)，用于量化各中介变量的相对重要性。将这一框架应用于三个基准数据集和五种电路拓扑结构后，我们揭示了显著的任务依赖模式。通过将问题从“量子计算是否有帮助？”[4, 5, 17] 转变为“量子计算如何发挥作用？”，我们的工作为资源感知型量子机器学习奠定了方法论基础，即通过设计电路来增强与任务相关的 Quantum 特性。这使得我们能够对电路性能进行机理诊断、识别未充分利用的资源，并有原则地修改架构。这代表着一种范式转变，类似于经典深度学习从启发式搜索转向基于梯度流和归纳偏置的机理驱动设计 [18, 19]

II. 结果

A. 反事实因果中介作用框架

我们首先将反事实因果中介框架形式化（图 1），该框架将参数化量子电路预测性能的变化归因于架构直接效应，以及由量子资源介导的间接效应。经典反事实推理依赖想象性、回溯性的探究，通过提出“如果今天下过雨，情况会怎样？”之类的问题来揭示因果关系。将这种方法转换到量子模型场景中，便会提出同样尖锐的问题：观察到的纠缠增加，究竟是性能提升的真正原因，还是架构扩展的副作用？如果在电路深度增加的同时，将纠缠 [20, 21]固定在其基线水平，会发生什么？如果性能得到提升，我们如何确定这一增益源自真正的量子效应，而不仅仅是增强的经典表达能力？至关重要的是，我们的框架运行于架构间反事实对比的层面，而非电路内部动态的层面，其核心对象因此并非单个模型的绝对性能，而是由架构干预 [4, 5], 所引起的性能差异，这构成了可识别的因果估计量。

设 $s = 1, \ldots, N$ index 为从数据分布中抽取的独立测试样本。我们定义 $t \in \{0, 1\}$ 为二元架构干预，其中，t $= 0$ 表示浅层电路（基线），t $=$ 1 表示深层纠缠电路（增强）。$Y_{s,t}$ 表示测试样本 s 在架构 t 下、使用训练参数 θ_t^*，$M_{s,t} =$ 得到的观测预测结果（例如预测概率）。$\big(S_A^{(s,t)}$，$\gamma_A^{(s,t)}$，$L_A^{(s,t)}$，$I(A:B)^{(s,t)}\big)$：样本 s 在架构 t 下的量子中介变量向量，其中 S_A 为纠缠熵（子系统不可分性），γ_A 为纯度（态相干性），L_A 为线性熵（混合度），$I(A:B)$ 为量子互信息（总关联）。实验设计产生配对观测：对于每个测试样本 s，我们观测到来自浅层（基线）架构的元组 (M_s, 0,Y_s,0)，以及来自深层（增强）架构的元组 (M_s,1, Y_s,1)。样本层面的总因果效应通过以下方式获得：

$$\Delta Y_s = Y_{s,1} - Y_{s,0} \tag{1}$$

并且，测试分布上的平均总效应可计算为：

$$\mathbb{E}[\Delta Y_s] = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^{N} (Y_{s,1} - Y_{s,0}) \tag{2}$$

我们使用线性结构方程模型对配对观测的数据生成过程进行建模：

$$M_{s,t} = \alpha_0 + \alpha\, t + \epsilon_s^{(M)}, \quad t \in \{0, 1\} \tag{3}$$

$$Y_{s,t} = \tau_0 + \tau\, t + \beta^\top M_{s,t} + \epsilon_s^{(Y)}, \tag{4}$$

其中，$\alpha = (\alpha_{S_A}, \alpha_{\gamma_A}, \alpha_{L_A}, \alpha_{I(A:B)})$ 是一个向量，用于捕捉架构干预 t 对每个量子中介变量的平均效应。$\beta = (\beta_{S_A}, \beta_{\gamma_A}, \beta_{L_A}, \beta_{I(A:B)})^\top$ 是一个向量，用于捕捉在给定架构的条件下，每个中介变量与预测结果之间的关联。τ 表示架构 t对结果 Y 的直接效应，该效应不通过 M中的量子属性传递。$\epsilon_s^{(M)}$，$\epsilon^{(Y)_s}$ 是均值为零的误差项，用于捕捉样本特异性变异（例如，由数据异质性导致的变异）。关键的是，同一样本 s 在两种处理下的误差彼此相关，这反映了配对设计。

在这一表述中，系数 α 量化了架构干预引起的每个量子中介变量的平均变化

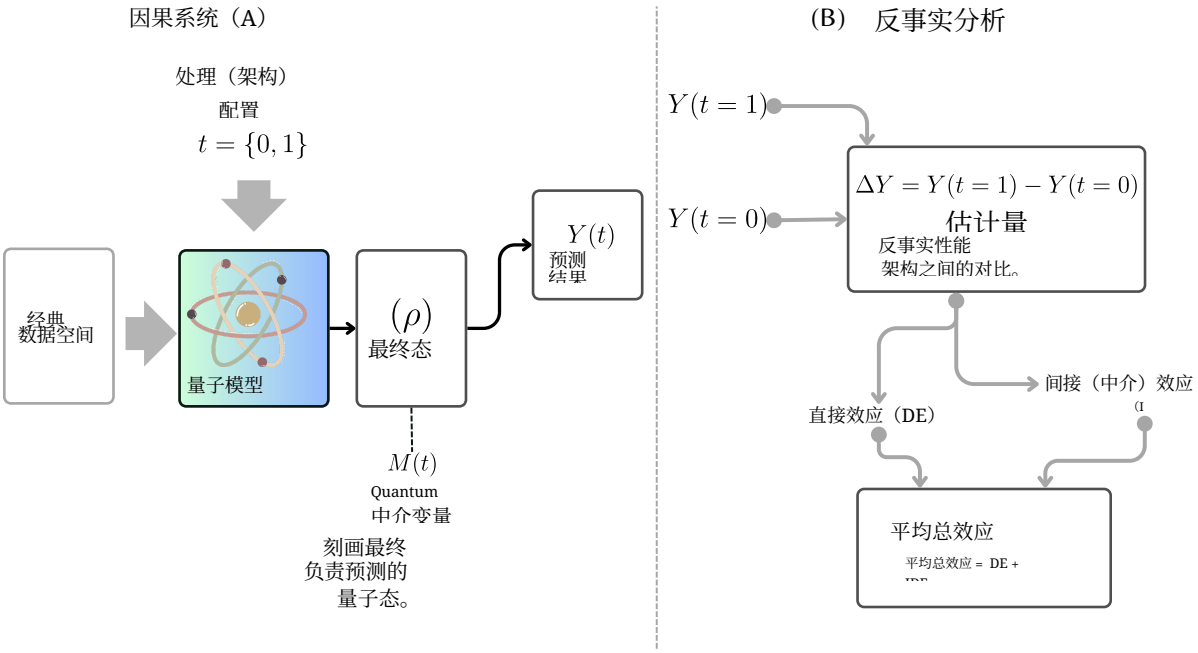

图 1. **量子机器学习架构的反事实因果中介框架。**（**A**）将学习流程表示为反事实因果系统的概念性因果图。架构干预 t 对比了两种完整的量子学习流程：基线浅层电路（$t = 0$）和增强的、更深且纠缠更多的电路（$t = 1$）。该干预通过非量子架构因素（例如参数化、表达能力、优化几何）直接影响预测结果 Y，也通过一组量子信息论中介变量 M间接影响预测结果。这些中介变量根据训练后的量子态计算得出 *post hoc*，用于量化架构诱导的纠缠熵（S_A）、纯度（γ_A）、线性熵（L_A）和量子互信息（I（A： B））的变化。（**B**）架构之间性能对比的反事实分解。因果估计量是架构间的反事实差异 Y（t=1） $- Y$（t=0），针对相同的测试样本进行评估。在结构因果模型中，该总效应可加性地分解为架构直接效应（DE）（记为 τ）和量子中介间接效应（IDE）（表示为 $\sum_k \alpha_k \beta_k$）。这种分解能够将性能变化非冗余地归因于真正的量子资源利用，而非经典架构扩展，且无需对内部电路动力学建模。

而系数 β 则衡量了在给定架构的条件下，跨独立训练的流水线，每个中介变量的变化与预测性能变化之间的统计关联。

定理1（架构效应的反事实因果分解）。 在线性结构模型（由公式(3)和(4)定义）下，平均总效应 $\mathbb{E}[\Delta Y_s]$ 可进行如下加性分解：平均总效应（*ATE*）：

$$ATE = \tau + \beta^\top \alpha = \underbrace{\tau}_{direct\ effect} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \beta_k}_{indirect\ effect} \qquad (5)$$

对于增强架构 $t = 1$，直接效应和中介效应可能并存，体现出架构扩展与真正的量子资源利用之间的协同作用。通过对比浅层电路和深层电路，该框架能够以有原则的方式区分由纠缠、相干性和关联带来的量子优势（即量子资源对性能提升的真实贡献）与一般的架构效应。图 2 展示了这一分解在多个数据集和架构中的情况，揭示出显著的上下文依赖性。可归因于量子中介作用的性能变化比例随任务结构和电路拓扑而大幅变化，这表明量子优势（若存在）是通过高度特定的信息通道产生的，而非普遍存在。

在这一表述中，估计得到的总效应、直接效应和间接效应量化了受控的架构干预如何在量子资源中引发因果变化，并进而调节量子模型的内部响应统计量。因此，所识别的因果路径应被理解为揭示了量子资源在模型内部动力学中的机制作用，

而非下游任务级性能的直接决定因素。当且仅当通过与可测量量子属性相关的中介路径，解释了式（2）所定义的架构间反事实性能差异中不可忽略的一部分时，性能提升量子驱动的性能提升 才可归因于量子效应。形式上，当定理1中引入的汇总中介贡献超过（定义的阈值）时，即可识别出量子驱动的性能提升。该标准以因果且对比的方式将量子优势 [16]定义为（对性能提升的真实量子资源贡献）：它并非绝对性能的一种属性，而是指架构诱发的量子资源变化在多大程度上解释了观测到的性能差异。

B. 因果假设与可识别性范围

定理1中推导的因果分解依赖一组识别假设，这些假设使得估计得到的直接效应和间接效应能够被解释为因果量。这些假设改编自因果中介分析的序贯可忽略性框架 [12]，并且在我们的配对实验设计中得到明确满足；该设计恰好在定义明确的 NISQ 体制内运行。 [23]

假设 1 (配对设计的序贯可忽略性**)**。 对于所有 t、$t' \in \{0,1\}$ 和中介变量值m，处理分配的可忽略性：

$$\{Y_s(t', m), M_s(t)\} \perp t.$$

以及中介变量取值分配的可忽略性：

$$Y_s(t', m) \perp M_s(t) \mid t.$$

在我们的实验设置中，假设 1 通过设计得以满足：(i) 成立，因为 t（架构）是确定性分配的；浅层（$t = 0$）和深层（$t = 1$）模型是独立训练的。不存在同时影响 t 的分配以及潜在结果或中介变量的共同原因。(ii) 成立，因为中介变量 $M_{s,\ t}$ 是根据固定且已训练模型的量子态事后计算得出的。一旦架构 t 固定，中介变量取值便仅由训练参数和输入数据决定；对于给定架构，不存在同时影响中介变量和结果的混杂过程。因此，识别无需额外协变量；配对设计也消除了观察性研究中通常需要的无混杂假设。

假设2 （无处理-中介变量交互作用）。 中介变量 M 对结果 Y 的影响不取决于处理 $t \in \{0,1\}$：

$$\mathbb{E}[Y_s(t, m) - Y_s(t, m')] = \beta^\top (m - m'). \qquad (6)$$

这一假设内含于我们的线性模型（式*4*），并且可以通过在结果模型中加入 t 和 M 之间的交互项进行经验检验。

假设 3 (一致性和稳定单元处理值假设**)**。 观测到的结果和中介变量对应于指定处理下的潜在结果：$Y_{s,\ t} = Y_s(t) \quad M_{s,\ t} = M_s(t)$。在基于模拟的评估中，这一点由构造保证：每个测试样本都在两种架构体制下进行评估。此外，稳定单元处理值假设（*SUTVA*）也得到了满足，因为一个模型的训练和评估不会干扰另一个模型（无干扰），且每种架构干预都只有一个版本（无多个版本）。

在假设1、假设2和假设3下，根据方程3和4得到的 α、β 和 τ 的普通最小二乘估计对于因果参数是一致的，而方程5中的分解则将总架构效应分解为直接和间接（中介）分量，构成有效的因果分解。在 [24] 中，作者通过表明在深度相当时，中介变量与结果之间的关联在局部是稳定的，确立了表达能力与可训练性之间的基本权衡，从而支持假设2。

需要指出的是，我们的因果分析针对的是架构间的反事实对比，而非随机分配处理或对内部电路变量进行干预。处理变量 $t \in \{0,1\}$ 确定性地标识两种完整的学习流程，每种流程均由固定的电路架构、训练程序和优化后的参数集定义。因此，主要因果估计量 ΔY_s （方程1）通过构造被识别为架构之间定义明确的反事实对比，且关于处理混杂偏差的标准担忧并不适用 [25]。具体而言，不存在同时影响 t 和 Y 的未观测变量，而且总架构效应无需调整即可直接估计。

在我们的框架中，量子信息理论量与经典中介分析中可操控的中介变量所发挥的作用存在根本差异。中介变量 $M = \{S_A, \gamma_A, L_A, I(A:B)\}$ 并未受到干预 [12]；它们是在事后根据与各架构相关联的训练后量子态计算得出的。因此，中介分析应被理解为对架构间因果效应的机制性分解，

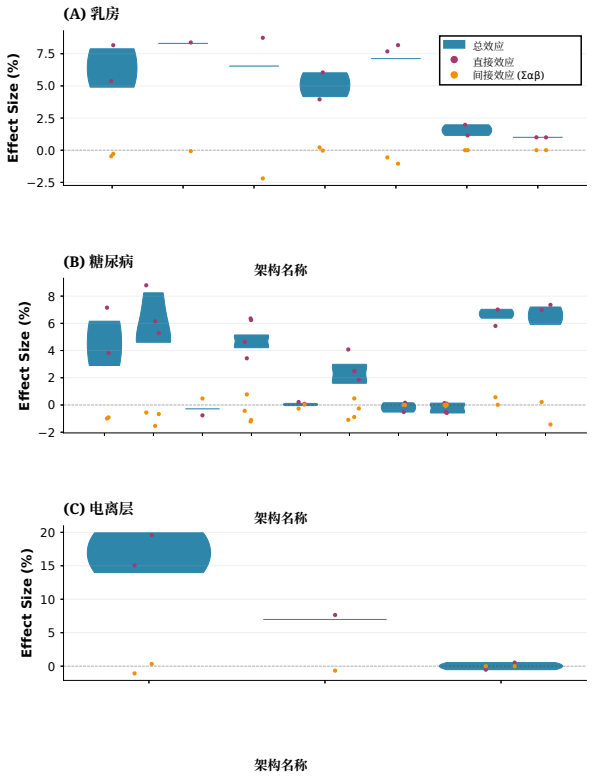

图 2. **依赖数据集的因果分解揭示了架构贡献对量子介导路径的主导作用**。小提琴图展示了 43/90 种配置（架构 {n 量子比特} {n 层}）中的总效应（ΔY）、直接效应（τ，紫色）和间接效应（$\sum \alpha\beta$，橙色），验证了两个假设（糖尿病 n =26、乳腺癌 n=12、电离层 n=5）。直接架构贡献始终占主导地位（平均比率 13.1）：糖尿病直接效应为 3.39±3.11%，间接效应为 -0.34 ± 0.65%；乳腺癌为 5.14±3.17% 和 -0.37 ± 0.67 8 46±8 83 $-0.28 \pm$ %; 0.57 电离层为 . . % 和 %。量子介导效应分别仅占总变异的 11.1%、7.8% 和 3.5%。环形和深层拓扑结构的直接效应最强（6 - 17%），而成对结构在各数据集中贡献微乎其微。该框架成功区分了经典缩放与量子增强，93% 的配置被归类为中性机制。

而非对单个量子资源的干预层面的因果效应进行识别。间接效应量化了在给定架构干预条件下，架构诱导的量子属性变化如何在统计上解释观测到的性能差异。

式 3 和式 4 中采用的线性结构方程，旨在作为局部归因模型，用于分解有限反事实对比，而非对学习动力学作全局函数描述。我们并不假设量子资源与预测结果之间的关系在全局范围内呈线性，或在不同架构间保持不变。分解的经验验证通过比较基于回归的估计与观测到的反事实差异进行一致性检验（见方法）。此外，我们并不假设不同数据集间的中介模式保持不变；量子中介变量相对贡献的变化被视为依任务和架构而异的经验属性，而非普适的因果定律。因此，该框架旨在支持在特定实验情境下对量子模型进行资源感知型解释与比较，而非宣称量子优势具有独立于数据集的普遍性。

C. 量子贡献的量化 ns

为了从定性洞见转向定量指标，我们引入两个度量：绝对中介贡献均值（MAMC）和相对量子贡献（RQC）。MAMC 刻画了某个中介变量在整个数据集中的因果影响平均幅度。作者在 [26]中证明，纠缠对量子机器学习性能的影响取决于测量访问，呈现双重效应，这直接促使我们将 MAMC 作为一种刻画量子中介作用幅度（不论正负）的度量。

定义 1（绝对中介贡献均值）。 对于量子中介变量 M_k，*MAMC* 刻画其在测试分布中的中介因果影响的平均幅度：

$$\overline{\mathcal{E}}_{M_k} = \frac{1}{N}\sum_{s=1}^{N} |\alpha_k \beta_k|. \tag{7}$$

等式成立，是因为在我们的线性模型中， α_k 和 β_k 在各个样本中均为常数。

MAMC 为量化量子贡献提供了若干关键优势。首先，通过采用绝对值，它不受方向影响地捕捉中介效应的大小，关注的是因果影响的强度，而非其正负号。这一点在量子系统中尤为重要，因为量子属性与性能之间的关系可能是非单调的，也可能取决于具体情境。其次，对样本取平均可确保结果不易受离群值影响，并能稳定估计各中介变量的总体重要性。MAMC 值的解读遵循一套有原则的框架：接近零的值表示量子中介作用可以忽略不计，而较大的值则表明经由量子属性产生的因果路径更强。为实现有意义的比较

在不同量子属性和架构情境之间进行比较，我们引入了归一化度量，以便将中介贡献的绝对值置于具体背景中加以解读。

定义2 (相对量子贡献)。中介变量 M_k 的相对量子贡献（*RQC*）用于量化其在总中介效应中的相对重要性：

$$RQC_{M_k} = \frac{\overline{\mathcal{E}}_{M_k}}{\sum_{j=1}^{K} \overline{\mathcal{E}}_{M_j}} \times 100\%. \tag{8}$$

这一归一化指标便于直接比较不同量子属性的因果重要性。

RQC 为量子算法设计提供了极具价值的见解。例如，若发现纠缠熵占总中介效应的 60%，而纯度仅占 20%，这将有力地表明，对于特定学习任务，应优先选择能够增强纠缠而非相干性的架构。图3展示了在3个数据集上的实验评估结果。

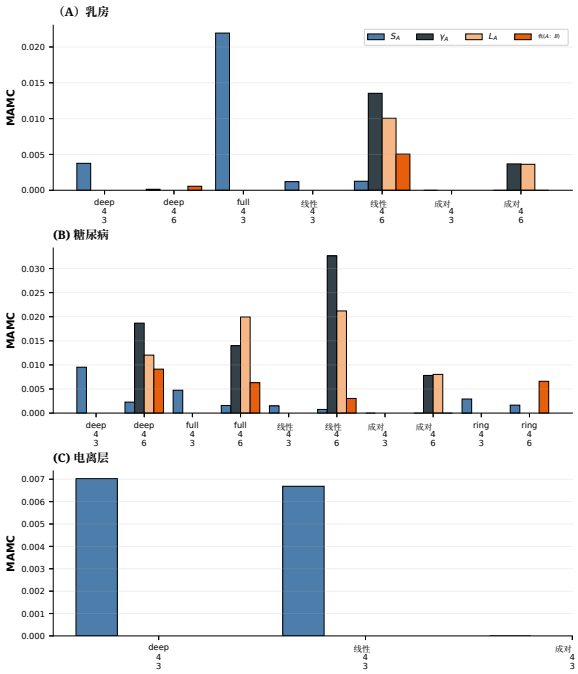

图3. **中介变量特定的贡献揭示了依任务而异的量子资源利用**。平均绝对中介贡献（MAMC）量化了每个量子中介变量的因果影响。在糖尿病数据集中，纯度（γ_A）占主导地位（1.82 %）；在乳腺癌数据集中，纯度（γ_A）同样占主导地位（0.86%），分别是纠缠熵（S_A：0.20%、0.29%）的9.1倍和3.0倍，表明保持相干性是主要的量子路径。电离层数据集中，S_A（0.42%）是唯一可量化的中介变量。线性熵（L_A）在糖尿病数据集中贡献显著（1.58%）；而互信息（I（A： B））由于函数依赖于 S_A，仍然较弱。跨数据集的模式表明，在当前含噪声中等规模量子实现中，基于相干性的中介作用比纠缠更占主导地位，从而为通过中介增强策略实现架构与任务的匹配提供了可行的优化方向。[27]

D. 量子机器学习中的因果中介机制

如式(1)和式(5)所示，两种量子架构之间的反事实性能对比可分解为直接架构贡献和由量子资源中介的间接贡献。尽管这种分解能够进行定量归因，但其主要科学价值在于揭示了架构干预如何 转化为学习行为这一方面的定性见解。为使这一见解具有可操作性，我们将中介作用结果归纳为少数几种因果中介机制。如（表I）所总结，每种机制均根据直接效应 τ 与汇总的量子中介贡献 $\sum_k \alpha_k \beta_k$的相对符号和大小来定义，并以预测性能中的保守相关性阈值（ϵ）为参照。实验结果见图4和图5

表I. 因果机制总结。机制根据直接架构效应（τ）、汇总的量子中介贡献（$\sum_k \alpha_k \beta_k$）与由此产生的性能差异（ΔY）之间的定性关系定义，并相对于相关性阈值（ϵ）进行评估。注： ≈ 0 ：-阈值 $\leq$ 效应$\leq$ 阈值； $+$、 $-$ 分别表示效应 $>$ 阈值或 $<$ -阈值。

中介机制	直接效应 (τ)	$\sum_k \alpha_k \beta_k$	ΔY
量子优势	$+$	$+$	$+$
掩蔽量子	$-$	$+$	$-$
双重有害	$-$	$-$	$-$
经典主导	$+$	$-$	$+$
中性	≈ 0	≈ 0	≈ 0
补偿性	$+$	$-$	≈ 0
经典可扩展	$+$	≈ 0	$+$

1. *Physically Interpretable Mediation Regimes*

架构直接效应与量子介导路径之间的相互作用，产生了数量有限、性质各异的行为，每种行为都对应着量子机器学习中一种可辨识的物理与算法情景。

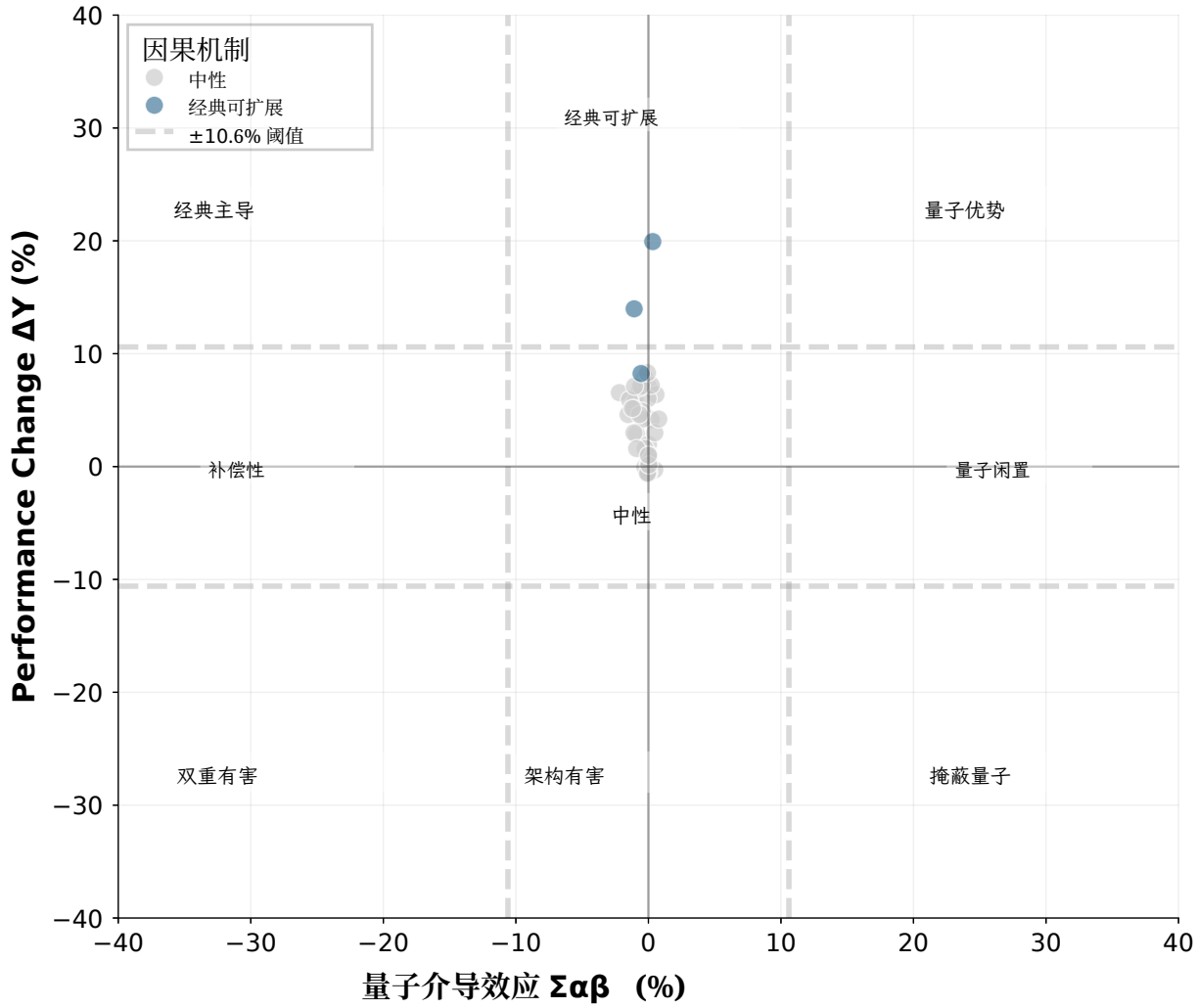

图 4。图 4。**状态分类表明，在严格的因果可识别性标准下不存在量子优势。**满足所有中介假设的 43/90 配置，均根据 ±10.6% 的数据驱动显著性阈值（所有架构-数据集对中的最大值；各配置的单独阈值有所不同，见方法 IV）定位于间接效应性能空间（$\Sigma\alpha\beta$，ΔY）中。每个点代表一个架构-数据集配置；该阈值划定了统计上可忽略的因果贡献与实质性因果贡献之间的边界。状态分布：93。0% 为中性（直接效应和间接效应均低于阈值），7。0% 为经典可扩展（直接增益显著，但量子中介作用可忽略）。没有任何配置达到量子优势机制（$\tau >$ 阈值、$\sum \alpha\beta >$阈值、$\Delta Y >$ 阈值），这证实在所有电路拓扑结构和数据集中，量子中介贡献始终低于显著性阈值。即使是性能最高的配置（电离层 深层 4 3，$\Delta Y \approx 17\%$），其间接效应也低于 1%，表明性能增益完全由直接架构扩展驱动。

a. 量子优势机制。这一机制下的架构表现出性能提升，而这种提升有量子介导路径的因果支持。架构修改会激活量子资源，而这些资源有助于提高预测准确率。这一机制构成了最明确的经验证据，表明量子态的非经典属性在学习过程中发挥了功能性作用。

b. 掩蔽量子状态。在这种状态下，量子介导效应虽有益，但其贡献被负面的架构效应所抵消。因此，尽管存在建设性量子中介作用，整体性能仍会下降。这一模式揭示了被次优电路设计或优化所压制的潜在量子潜力，而标准的基于性能的评估无法发现这一点。

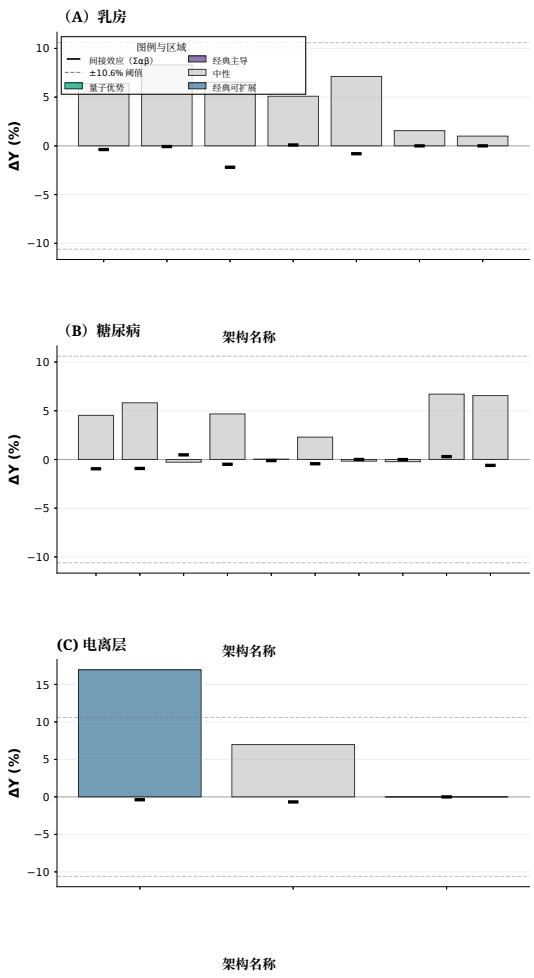

图 5. **架构特定分解揭示了三个数据集中的拓扑依赖中介模式**。条形图展示了总性能变化（ΔY，条形高度）和量子介导间接效应（$\sum \alpha\beta$，橙色标记），并标出因果机制分类；分析仅限于同时满足两项识别假设的配置。 ΔY与 $\sum \alpha\beta$ 之间的垂直间距量化了直接架构贡献 τ。**(A) 乳腺癌**：深层 4 3 的总效应最大（$\Delta Y \approx 5\%$），且完全由直接路径驱动（$\tau \approx 5.4\%$，间接效应为 $\approx -0.5\%$）；各层的成对配置均低于 2%。**(B) 糖尿病**：环形和深层拓扑实现了最显著的提升（总效应为 6 - 8%）；该数据集中观测到的最大间接效应（全连接 4 6： $\Sigma\alpha\beta \approx 2.3\%$）仍低于显著性阈值，因此所有配置均归为中性或经典可扩展。**(C) 电离层**：在所有数据集中，深层 4 3 的总效应最高-（$\Delta Y \approx 14$ - 17%），间接效应低于 1%，证实其优势完全由直接路径主导。成对配置在所有数据集中均未奏效（$\Delta Y < 1$），这与其局部二部纠缠结构相符。这些依赖于拓扑的模式表明，可采取有针对性的改进措施，通过保持纯度的编码或稳定纠缠的 ans¨atze 来放大中介效应，使配置从中性状态转向量子优势机制。

c. 双重有害机制。 架构贡献和量子介导效应均对性能产生负面影响。这类架构既无法利用量子资源，又同时引入不利的结构效应，表明电路拓扑、任务结构与优化动力学之间存在根本性的不匹配。

d. 经典主导机制。尽管量子介导效应有害，性能仍有所提升。在这种情况下，经典架构的扩展主导了学习动态，抵消了不利的量子贡献。这一机制表明，仅凭准确率提升不能被视为量子优势的证据。

e. 中性机制。 当直接效应和中介效应均可忽略时，架构干预对性能几乎没有因果影响。这种情况通常反映出电路参数不足、表达能力有限，或任务未能充分利用量子模型的表征能力。

f. 补偿机制。 负面的量子介导效应被正面的架构贡献抵消，因此性能净变化接近于零。尽管这类架构看起来可能很稳定，但量子资源起到的是限制因素而非改进驱动力，这表明随着量子硬件改进，其可扩展性可能较差。

g. 经典可扩展机制。此机制中的架构仅通过直接的架构效应得到改进，不存在具有统计显著性的量子中介作用。尽管性能增益可能相当可观，学习动态仍实质上是经典的，进一步投入量子资源不太可能带来额外收益。 [28]中的作者表明，即使是无贫瘠高原的浅层电路，也可能因损失景观陷阱而无法训练；这直接支持了中性机制的解释（93%的配置）：可忽略不计的因果效应源于优化动力学不佳，而非量子资源缺失。

2. *Excluded Regimes and Physical Plausibility*

尽管基于中介的分类在 $(\Sigma\alpha\beta, \Delta Y)$ 平面中识别出九种不同机制，但其中两种机制（量子闲置机制和架构有害机制）被有意排除在进一步分析之外。这种排除并非基于实证，而是基于概念考量，其动机在于物理合理性、因果可识别性，以及认证量子介导的性能增益这一目标。

a. 量子闲置机制 这种机制对应于间接（量子介导）效应 $\Sigma\alpha\beta$ 超过显著性阈值，而总性能变化 ΔY 在统计上仍可忽略的配置。从因果视角来看，这种机制代表一种退化配置：中介变量非零，却未转化为任何可观测的结果变化。这类配置本质上不可识别：存在可测量的中介效应，却没有相应的总效应，这意味着相反路径之间发生了精确抵消，使量子贡献无法付诸行动，也无法认证。因此，这种机制并不代表一种稳定且具有物理可解释性的量子增强模式，而是一个容易受到噪声、有限采样或架构补偿效应影响的实验边界区域。文献 [29]中作者对量子电路建立了以$\sqrt{T/N}$ 为尺度的泛化界，这为排除退化机制（量子闲置）提供了理论依据：在此类机制中，中介效应虽存在，却没有可观测的性能变化，这正是过拟合而非真正量子贡献的典型特征。

b. 架构有害机制。该机制描述的是这样一类配置：在不存在可测量的间接效应时，性能（$\Delta Y < 0$）显著下降。在此机制中，性能损失完全归因于架构或优化因素，例如电路深度过大、过度参数化，或经典-量子集成不理想。由于量子中介变量实际上处于非活跃状态，该机制不包含有关量子贡献的因果信息，因此不属于基于中介分析的量子优势认证的范畴。

3. Implications for Quantum Advantage and Circuit Design

因果中介机制为反事实估计与科学结论之间搭建了结构化的解释桥梁。它们区分了真正利用量子资源的架构与性能由经典机制驱动的架构，并指出了量子贡献虽存在、却被架构缺陷掩盖的情形。从设计角度看，始终展现出量子优势行为的架构是扩展规模和部署硬件的理想候选。掩蔽量子状态凸显了通过架构改进释放潜在量子优势的机会。[30, 31] 相比之下，经典主导和补偿状态提醒我们，不应将成功归因于量子效应，也表明增加量子复杂度的长期回报有限。

III. 讨论

当代量子机器学习面临一个核心矛盾：许多性能出色的量子模型仍可由经典计算模拟 [10, 11], ，这引发了人们对量子优势主张有效性的疑问 [4, 5]。然而，这种表面上的矛盾掩盖了更为微妙的现实：经典可模拟性并不排除量子优势 [32] ；它揭示的是量子资源利用不足，而非这些资源无关紧要 [3]。我们的因果框架直接处理了这一模糊之处：即使两者都可由经典计算模拟，也能区分通过经典机制实现性能的架构与能够利用量子资源的架构。中性机制占主导地位（占配置的 93%），而量子介导效应仅次之（均值为 0.82%）；这表明当前的含噪声中等规模量子实现 [33] 远未发挥其量子潜力，而非量子资源从根本上毫无助益。这一诊断改变了量子优势论述：我们不再争论量子计算是否能够带来帮助，而是可以识别哪些量子属性——纠缠、相干性、关联——在因果层面处于休眠状态，以及如何通过有针对性的架构调整将其激活。通过量化可用量子资源与已利用量子资源之间的差距，我们的方法为电路设计提供了切实可行的指导，有助于有意增强与任务相关的量子路径 [4, 5, 34]。当量子介导贡献在统计上占据主导地位时，经典可模拟性自然会退居次位；这并非因为外部基准 [27], ，而是因为真正利用量子资源所产生的结果。这一观点将量子优势重新界定为一种设计目标：它能够通过系统性的资源优化实现，而不是一种只能寄望于黑箱比较中出现的难以捉摸的属性 [35]。

除了架构选择之外，我们的框架揭示的因果结构还为电路设计和优化提供了具体指导。在经典深度学习中，架构方面的进步历来由对梯度流、表示学习和归纳偏置的机制性洞见所推动 [36]。我们的结果表明，量子机器学习也可能发生类似的转变。通过追踪中介模式如何随电路深度、纠缠拓扑或参数

约束而演变，设计者可以直接观察架构修改是否会增强或削弱量子因果路径 [37]。这使电路优化从黑箱搜索过程转变为由反馈驱动、可解释的流程。该框架还揭示了表达能力、可训练性和抗噪性之间的权衡。例如，增加电路深度可能会增强由纠缠介导的效应，同时降低纯度或优化稳定性 [21]。因果分解能够定量地区分这些相互竞争的影响，从而支持明智的设计选择，而非依赖启发式调参。

尽管我们的实证分析聚焦于采用变分量子电路的监督学习，但所提出的框架具有更广泛的适用性。在广泛的量子计算场景中，中介变量可微以及能够进行因果分解这两项关键要求均可满足[38]。因此，该框架可以扩展至无监督学习、强化学习、生成建模和量子优化。更广泛地说，任何性能可与可测量量子属性相关联的量子算法，原则上都适用于因果中介分析。潜在应用包括量子模拟、变分本征求解器以及混合量子—经典控制系统 [4]。该框架还可以扩展，纳入其他中介变量，例如噪声诱导的熵产生、表达能力度量或特定于硬件的约束。

本研究仍存在若干值得讨论的局限。首先，因果模型依赖于对中介效应进行局部线性近似。尽管这确保了可解释性和统计稳健性，但可能无法捕捉量子资源之间的高阶或强非线性交互。将框架扩展至非线性中介分析，仍是未来研究的重要方向。其次，我们的分析并未确立计算复杂性理论意义上的量子优势的充分条件。相反，它提供了资源层面的刻画，可与渐近分离分析形成互补。弥合这两种视角是一项重大的理论挑战。最后，可扩展性仍是一个开放问题。解决这一问题既需要理论进展，也需要在下一代硬件上进行实证验证。

尽管所有数据集中均未发现显著交互项，这为假设2提供了经验证据，但在量子情境下，对其解释仍需谨慎。该假设认为，量子中介变量对预测性能的影响在不同架构体制下保持不变。然而，从物理角度看，诸如纠缠熵之类的量，即使取值相同，也可能因电路深度和连接性不同而对应不同的关联模式，进而可能改变它们在学习中的功能作用。

先前研究已证实，纠缠生成、表达能力和可训练性对电路拓扑及深度十分敏感 [7, 8], ，并且量子优势的评估本质上取决于架构 [5]。因此，深度依赖的中介效应在概念上是合理的；而鉴于本文采用的测试集规模适中（$N_{\text{test}} \approx 100$–$170$），检测微弱交互效应的统计功效本就有限，这类效应可能仍无法在统计上被检出。然而，关键在于，这并不会推翻定理1所推导的分解：我们的结论明确限定于所研究的具体架构差异，而假设2最好理解为一种局部线性近似，而非量子资源的普遍属性。将该框架扩展到非线性或依赖架构的中介模型，是未来研究的一个重要方向。

总而言之，我们的结果支持向资源感知型 *Quantum* 机器学习转变的更广泛范式。与其问某个 Quantum 模型是否优于经典模型，不如关注以下相关问题：哪些 Quantum 属性在何种条件下、以多大程度发挥作用？我们的框架为严谨且透明地回答这一问题提供了工具。

IV. 方法

实验设计与因果框架

我们采用样本内配对设计，对每个测试样本 $s \in \{1, \ldots, N_{\text{test}}\}$ 分别在两种架构体制下进行评估：具有 $d_0 = 1$ 层的基线浅层架构（$t = 0$）和具有 $d_1 \in \{3, 6\}$ 层的增强型深层架构（$t = 1$）。关键在于，深层架构通过重复应用浅层模型中使用的完全相同的参数化纠缠模块构建而成，且不改变编码、连接性、门结构或测量，因此电路深度构成严格嵌套的组合式扩展，而非架构类别的改变。这种配对结构确保处理分配 t 由实验者确定性地控制，从设计上满足序贯可忽略性假设（假设 1）。对于每个样本，我们都获得了配对观测 $(M_{s,\,0},\ Y_{s,\,0})$ 和 $(M_{s,\,1},\ Y_{s,\,1})$，其中 $M_{s,\,t} \in \mathbb{R}^4$ 表示量子中介向量，而 $Y_{s,\,t} \in [0, 1]$ 表示方向性预测概率。数据

生成过程通过线性结构方程 3 和 4 形式化，且全部三项识别假设 IIB 均使有效的因果解释成为可能。

数据集与预处理

为评估不同数据模态下的量子资源贡献，我们选取了三个公开可用的二分类数据集：(a) 威斯康星州乳腺癌（诊断）数据集， N =569 个样本，包含 30 个形态学特征（平均半径、纹理、周长、面积、平滑度、紧密度、凹度、对称性、分形维数），这些特征由乳腺肿块细针穿刺抽吸物（FNA）的数字化图像提取而来。二分类：恶性（1）与良性（0）。(b) 糖尿病数据集，$N = 442$ 个样本，包含 10 个临床特征（年龄、性别、体质指数、血压、六项血清测量值）。连续目标变量（疾病进展）以中位数为界二值化，用于二分类。(c) 电离层数据集， $N = 351$ 条雷达回波，包含 34 个表示经处理雷达信号的连续属性。二分类："良好"（电离层中存在结构）与"较差"（不存在结构）。所有数据集均采用分层 70-30 训练集—测试集划分（随机种子为 42 和 142），且未进行数据增强。使用 scikit-learn 的 StandardScaler 将特征标准化为均值为零、方差为一。通过主成分分析（PCA）将维度降低至 $n_{\text{qubits}} = 4$ ，在保留足够方差的同时匹配量子电路宽度。

量子电路架构

系统地评估了五种参数化量子电路（PQC）拓扑结构，每种均探究不同的量子资源机制（补充图 1）：(a) 深层（砖墙式）：在砖墙式结构中进行单量子比特 $R_X(\theta)$和 $R_Y(\phi)$旋转，随后施加带周期性边界的交错最近邻 CNOT 门。只需 $\lceil \log_2 n \rceil$ 层即可实现全局纠缠，同时保持硬件高效。(b) 全连接（全连接）：对每个量子比特进行完整旋转，随后施加全连接 CNOT 连接，实现 $\binom{n}{2}$ 个双量子比特门。以二次方门成本在一层内达到最大纠缠，但限制了含噪声中等规模量子系统的可扩展性。(c) 线性（最近邻链）：对每个量子比特进行三轴旋转，并采用 CNOT 链式耦合（i， $i+1$），用于$i \in \{0, \ldots, n-2\}$。产生面积律纠缠关联，并提升可训练性。(d) 环形电路：在线性拓扑结构基础上扩展并加入周期性边界，从而确保纠缠均匀传播，并与环形连接的超导架构相匹配。导架构。(e) 成对（不相交的量子比特对）：对不相交的量子比特对（0，1)，(2，3)施加双轴旋转和 CNOT 耦合。形成独立的二分子系统和局域关联。每种拓扑结构均采用多种配置$C_{n,\ d}$包含 $n = 4$ 个量子比特和 $d \in \{1, 3, 6\}$ 层。数据编码采用振幅编码：对于输入 $x \in \mathbb{R}^4$，我们在可训练拟设之前，对量子比特 i施加 $R_Y(x_i)$旋转。所有电路均使用 PennyLane v0.32 实现，并通过 default.qubit 设备进行精确态矢量模拟（无噪声）。

模型训练与优化

对于每种架构配置和处理水平，均使用 Adam优化器（学习率 $\eta = 0.005$，批量大小为 16）独立训练量子模型，训练 50 轮并监测验证损失。训练数据按 70:30 的比例划分为训练子集和验证子集。优化目标是最小化二元交叉熵损失：

$$\mathcal{L}(\theta) = -\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[y_i \log p_i(\theta) + (1-y_i)\log(1-p_i(\theta))\right] \tag{9}$$

其中， $p_i(\theta) = \frac{1-\langle Z_0 \rangle_i}{2}$ 是样本 i 的预测概率，由第一个量子比特上的 Pauli-Z 可观测量的期望值获得。可训练参数 $\theta \in \mathbb{R}^{d \times n \times k}$ （其中 $k \in \{2, 3\}$ 是每个量子比特的旋转角数量）使用 NumPy 的随机数生成器从 $\mathcal{N}(0, 0.01)$ 中初始化，并采用固定种子以确保可复现性。 $t = 0$ 和 $t = 1$模型之间不进行参数迁移；每个模型都从头开始训练。

量子中介变量计算

对于每个测试样本 s 和训练参数θ_t^*，我们使用 PennyLane 的 qml.state() 函数提取量子态 $|\psi_s(t)\rangle = U(\theta_t^*)|0\rangle^{\otimes n}$。我们根据二分划分 $A|B$ 的约化密度矩阵$\rho_A = \text{Tr}_B[|\psi_s(t)\rangle\langle\psi_s(t)|]$ 计算了四种量子信息论中介量，其中 A由前 $\lceil n/2 \rceil$个量子比特组成：

(a) 纠缠熵：子系统 A 的冯·诺依曼熵为

$$S_A = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A] = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i \tag{10}$$

其中 λ_i 是通过特征分解计算得到的 ρ_A 特征值，并在 $\lambda_i < 10^{-16}$ 处进行数值截断以确保稳定性。对于纯二分态， S_A

量化了跨越该划分的纠缠。子系统 A的量子纯度： (b)

$$\gamma_A = \mathrm{Tr}[\rho_A^2] = \sum_i \lambda_i^2 \tag{11}$$

量子相干性（$\gamma_A = 1$对于纯态， $\gamma_A = 1/\dim(\mathcal{H}_A)$对于最大混合态）。(c) 作为计算高效的混合度度量的线性熵：

$$L_A = 1 - \gamma_A = 1 - \mathrm{Tr}[\rho_A^2] \tag{12}$$

(d) 量子互信息，即子系统 A 和 B之间的总相关性：

$$I(A:B) = S_A + S_B - S_{AB} \tag{13}$$

对于复合系统的纯态，通过施密特分解得到 $S_{AB} = 0$和 $S_A = S_B$ ，从而得到函数关系：

$$I(A:B) = 2S_A \tag{14}$$

我们在所有模拟中验证了 $S_{AB} < 10^{-10}$ ，证实了纯态近似。约化密度矩阵通过偏迹获得：

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B[|\psi\rangle\langle\psi|] = \sum_{k_B} \langle k_B|\psi\rangle\langle\psi|k_B\rangle \tag{15}$$

通过将密度矩阵重塑为张量形式 $\rho \to \mathcal{T} \in (\mathbb{C}^2)^{\otimes 2n}$ ，并对子系统 B 的指标进行迹运算来实现。

方向概率变换

为确保结果变量 Y 反映与正确类别的接近程度（而非类别 1 的原始概率），我们采用了方向性变换：

$$Y_{s,t}^{\mathrm{dir}} = \begin{cases} p_{s,t} & \text{if } y_s = 1 \\ 1 - p_{s,t} & \text{if } y_s = 0 \end{cases} \tag{16}$$

其中 $p_{s,\,t} = \frac{1-\langle Z_0\rangle_s}{2}$ $_{\,t}$ 是原始预测概率，$y_s \in \{0,1\}$ 是真实标签。该变换确保 $Y_{\mathrm{dirs},\,t} \in [0,1]$ 代表预测质量，数值越高表示与真实标签越一致。所有因果分析均使用 Y^{dir} 作为结果变量。

统计估计与推断

使用普通最小二乘法对合并数据集 $\mathcal{D}_{\mathrm{pooled}} = \{(t,\, M_{s,\,t},\; Y_{s,\,t}) : s \in \mathcal{S},\; t \in \{0,1\}\}$ 估计参数

包含 $2N_{\mathrm{test}}$ 个配对观测。中介变量系数：

$$\hat{\alpha} = \frac{1}{N_{\mathrm{test}}} \sum_{s=1}^{N_{\mathrm{test}}} (M_{s,1} - M_{s,0}) \tag{17}$$

ˆ . 结果变量系数 (ˆτ_0, ˆτ, β) 如下：

$$\arg\min_{\tau_0,\tau,\beta} \sum_{s=1}^{N_{\mathrm{test}}} \sum_{t\in\{0,1\}} \left(Y_{s,t} - \tau_0 - \tau t - \beta^\top M_{s,t}\right)^2 \tag{18}$$

为处理配对设计中的样本内相关性，我们计算了 Eicker-Huber-White 聚类稳健标准误，并在样本层面进行聚类：

$$\widehat{\mathrm{Var}}(\hat{\theta}) = (X^\top X)^{-1} \left(\sum_{s=1}^{N_{\mathrm{test}}} X_s^\top \hat{u}_s \hat{u}_s^\top X_s \right) (X^\top X)^{-1} \tag{19}$$

其中 X_s 包含样本 s对应的两行（分别对应 $t = 0$ 和 $t = 1$），ˆu_s 为相应的残差。对于间接效应 $\alpha_k\beta_k$ （参数的乘积），我们采用非参数百分位自助法构建置信区间，设置为 $B = 2000$；有放回地重抽样 $s^* \in \{1,\ldots,N_{\mathrm{test}}\}$；针对自助法样本 b 重新估计 (ˆ$\alpha^{(b)}$, ˆ$\beta^{(b)}$)，计算 ˆ$\theta_k^{(b)}$ = ˆ$\alpha_k^{(b)}$ ˆ$\beta_k^{(b)}$ 。95% 置信区间：根据经验四分位数计算 [ˆ$\theta_k^{(0.025)}$, ˆ$\theta_k^{(0.975)}$] 。通过对完整的样本配对进行重抽样，保留了配对结构。

模型验证

我们验证了，基于回归的分解能够通过相对一致性误差准确重构观测到的总效应：

$$\epsilon_{\mathrm{rel}} = \frac{|\widehat{\mathrm{ATE}} - (\hat{\tau} + \hat{\beta}^\top \hat{\alpha})|}{|\widehat{\mathrm{ATE}}| + 10^{-12}} \tag{20}$$

其中， $\widehat{\mathrm{ATE}} = N_{\mathrm{test}}^{-1} \sum_s (Y_{s,\,1} - Y_{s,\,0})$ 为经验总效应。所有 90 种架构-数据集配置均满足 $\epsilon_{\mathrm{rel}} < 0.05$ （中位数 2.1×10^{-15}），证实线性加性模型能够捕捉因果结构，且不存在系统性偏差。为验证假设2（处理与中介变量之间不存在交互作用），我们在方程 4 中加入交互项 $\gamma^\top (t \cdot M_{s,\,t})$，并通过似然比检验检验 H_0： $\gamma = 0$ 。在所有数据集中均未检测到显著交互作用，这支持了线性模型设定。标准诊断检验证实模型适 adequ：同方差性——残差与拟合值图显示垂直散布均匀，且

没有漏斗形态（补充图 5A）。正态性方面，Q-Q 图与理论正态分位数几乎完美对齐（补充图 5B）。数据集内残差分布的独立性检验显示散布程度相近（补充图 5D），证实不存在系统性的数据集特异偏差

数据驱动的阈值确定

我们没有采用任意设定的固定阈值，而是采用数据驱动的方法来确定因果效应的统计显著性。对于每种架构-数据集配置，我们计算了总效应的样本内变异性：

$$\epsilon_{\text{intra}} = c \cdot \text{SD}(\Delta Y_s) \tag{21}$$

其中 $\Delta Y_s = Y_{s,\ 1} - Y_{s,\ 0}$ 表示样本层面总效应，SD(·)表示各测试样本间的标准差，$c \in [0.5, 1.0]$ 是一个保守的比例常数。我们将 $c = 0.5$ 设为一个严格的阈值，以反映数据中的自然变异。超过 $\pm\epsilon_{\text{intra}}$ 的效应被归类为在统计和实际意义上均显著。该阈值考虑了数据集特定的噪声特征，并提供了一个有理据的标准，用于区分实质性效应与随机波动。

因果机制分类

每种架构-数据集配置均根据直接效应 τ、间接效应 $\sum \alpha_k \beta_k$ 和总效应 ΔY 相对于数据驱动阈值 ϵ 的符号与大小，被归入七种具有可解释性的因果中介机制之一：量子优势（$\tau > \epsilon$、$\sum \alpha_k \beta_k > \epsilon$、$\Delta Y > \epsilon$）：性能增益由量子介导路径支撑。掩蔽量子（$\tau < -\epsilon$、$\sum \alpha_k \beta_k > \epsilon$、$\Delta Y < -\epsilon$）：负向架构效应抑制了有益的量子中介作用。双重有害（$\tau < -\epsilon$、$\sum \alpha_k \beta_k < -\epsilon$、$\Delta Y < -\epsilon$）：两条路径均有害。经典主导（$\tau > \epsilon$、$\sum \alpha_k \beta_k < -\epsilon$、$\Delta Y > \epsilon$）：尽管量子中介作用为负，架构效应仍为正。中性（$|\tau| \leq \epsilon$、$|\sum \alpha_k \beta_k| \leq \epsilon$、$|\Delta Y| \leq \epsilon$）：两条路径上的效应均可忽略不计。补偿性（$\tau > \epsilon$、$\sum \alpha_k \beta_k < -\epsilon$、$|\Delta Y| \leq \epsilon$）：相反的效应相互抵消。经典可扩展（$\tau > \epsilon$、$|\sum \alpha_k \beta_k| \leq \epsilon$、$\Delta Y > \epsilon$）：性能增益完全来自直接架构效应。另有两种机制（量子闲置和架构有害）未纳入主要分析，因为它们代表缺乏可操作因果解释的退化配置（见正文）。

数据可用性

乳腺癌威斯康星、糖尿病和电离层数据集均可从 UCI 机器学习库数据源公开获取。处理后的数据和量子态可在完整代码中获取，以确保可复现性。

代码可用性

复现所有分析和图表的完整代码可在 GitHub 仓库中获取。该仓库包含用于量子电路训练、中介变量计算、因果分析、假设验证和生成可视化内容的脚本。

致谢

我们衷心感谢德乌斯托 FPI 资助计划（德乌斯托大学项目合同）对本研究的资助，并感谢德乌斯托大学 eVida 研究小组提供的坚定支持和宝贵资源，使本研究得以开展。该研究小组获巴斯克政府认可（IT1536-22）。

V. 作者贡献

C.Y.K. 构思了本研究，开发了理论框架，实现了软件，开展了实验，并撰写了初稿。B.G.Z. 对研究进行监督，提供了重要反馈，并协助完善稿件。两位作者均审阅并批准了最终稿。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

[1] Jacob Biamonte、Peter Wittek、Nicola Pancotti、Patrick Rebentrost、Nathan Wiebe 和 SethLloyd。量子机器学习。 *Nature*，549(7671)：195–

202, 2017年。[2] John Preskill. 含噪中等规模量子时代及未来的量子计算。 *Quantum*, 2:79, 2018年。[3]Hsin-Yuan Huang, Michael Broughton, Jordan Cotler, Sitan Chen, Jerry Li, Masoud Mohseni, Hartmut Neven, Ryan Babbush, Richard Kueng, John Preskill 等。从实验中学习的量子优势。 *Science* 376 6598 1182 1186, , 2022 ( ): – 。[4] Marco Cerezo, Guillaume Verdon, Hsin-Yuan Huang, Lukasz Cincio, and Patrick J Coles. 量子机器学习中的挑战与机遇。 *Nature computational science* 2 9 567 576, , ( ): – 。[5] 2022 Maria Schuld and Nathan Killoran. 量子优势是否应当成为量子机器学习的正确目标? *Prx Quantum*, 3(3):030101, 2022年。[6]Hsin-Yuan Huang, Michael Broughton, Masoud Mohseni, Ryan Babbush, Sergio Boixo, Hartmut Neven, and Jarrod R McClean. 数据在量子机器学习中的力量。 *Nature communications* 12 1 , ( ):2631, 2021年。[7]Sukin Sim, Peter D Johnson, and Al´an Aspuru-Guzik. 混合量子-经典算法中参数化量子电路的表达能力与纠缠能力。 *Advanced Quantum Technologies* 2 12 1900070, 2019 , ( ): 。[8] Shikun Zhang, Yang Zhou, Zheng Qin, Rui Li, Chunxiao Du, Zhisong Xiao, and Yongyou Zhang. 机器学习对参数化量子电路纠缠—可训练性相关性的洞见。 *Physical Review A*, 111(5):052403, 2025年。[9] Thomas Hubregtsen, Josef Pichlmeier, Patrick Stecher, and Koen Bertels. 参数化量子电路的评估：分类准确率、表达能力与纠缠能力之间的关系。 *Quantum Machine Intelligence* 3 1 9, , ( ): 。[10] 2021 Pablo Bermejo, Paolo Braccia, Manuel S Rudolph, Zo¨e Holmes, Lukasz Cincio, and Marco Cerezo. 量子卷积神经网络（实际上）可由经典计算模拟。 *arXiv preprint arXiv:2408.12739* 2024 , 。[11] Joseph Bowles, Shahnawaz Ahmed, and Maria Schuld. 比经典方法更好吗? 量子机器学习模型基准测试的微妙艺术。 *arXiv preprint arXiv:2403.07059*, 2024年。[12] Kosuke Imai, Luke Keele, and Dustin Tingley. 因果中介分析的一般方法。 *Psychological methods* 15 4 309, 2010 , ( ): 。[13] Jonas Peters, Dominik Janzing, and Bernhard Sch ¨ *Elements of causal inference: foundations and learning algorithms* olkopf. 。 2017 麻省理工学院出版社, 。[14]Bernhard Sch¨olkopf, Francesco Locatello, Stefan Bauer, Nan Rosemary Ke, Nal Kalchbrenner, Anirudh Goyal, and Yoshua Bengio. 迈向因果表征学习。 *Proceedings of the IEEE*, 109 5 612( ): –634, 2021年。[15] Kosuke Mitarai, Makoto Negoro, Masahiro Kitagawa, and Keisuke Fujii. 量子电路学习。 *Physical Review A*, 98(3):032309, 2018年。[16]Maria Schuld、Ryan Sweke 和 Johannes Jakob Meyer。数据编码对变分量子机器学习模型表达能力的影响。 *Physical Review A*，103(3):032430，2021年。[17] Hsin-Yuan Huang、Richard Kueng 和 John Preskill。机器学习中量子优势的信息论界。 *Physical Review Letters* 126 19 190505, 2021 , ( ): 。[18] Elies Gil-Fuster、Jens Eisert 和 Carlos Bravo-Prieto。要理解量子机器学习，也需要重新思考泛化。 *Nature Communications* 15 1 2277, 2024 , ( ): 。[19] Azar C Nakhl、Thomas Quella 和 Muhammad Usman。校准纠缠在变分量子电路中的作用。 *Physical Review A*, 109(3): 032413，2024年。[20]Marco Ballarin、Stefano Mangini、Simone Montangero、Chiara Macchiavello 和 Riccardo Mengoni。量子神经网络中的纠缠熵产生。 *Quantum*, 7:1023，2023年。[21]Michael Ragone、Bojko N Bakalov、Fr´ed´eric Sauvage、Alexander F Kemper、Carlos Ortiz Marrero、Mart´ın Larocca 和 Marco Cerezo。深层参数化量子电路贫瘠高原的李代数理论。 *Nature Communications*，15 1( ):7172，2024年。[22] Judea Pearl。 *Causality*。剑桥大学出版社，2009年。[23] Sitan Chen、Jordan Cotler、Hsin-Yuan Huang 和 Jerry Li。NISQ 的复杂性。 *Nature Communications* 14 1 , ( ):6001, 2023年。[24] Zo¨e Holmes、Kunal Sharma、Marco Cerezo 和 Patrick J Coles。将拟设表达能力与梯度幅值及贫瘠高原联系起来。*quantum* 3 1 010313, 2022 *PRX* , ( ): 。[25] Donald B Rubin。估计随机研究和非随机研究中的治疗因果效应。*Journal of educational Psychology*，66(5):688，1974年。[26] Xinbiao Wang、Yuxuan Du、Zhuozhuo Tu、Yong Luo、Xiao Yuan 和 Dacheng Tao。纠缠数据在量子机器学习中的作用转变。 *Nature Communications* 15 1 3716, 2024 , ( ): 。[27] Marco Cerezo、Martin Larocca、Diego Garc´ıa-Mart´ın、Nelson L Diaz、Paolo Braccia、Enrico Fontana、Manuel S Rudolph、Pablo Bermejo、Aroosa Ijaz、Supanut Thanasilp 等。可证明不存在贫瘠高原是否意味着经典可模拟性? *Nature Communications*，16(1):7907，2025年。[28] Eric R Anschuetz 和 Bobak T Kiani。变分量子算法深陷各种陷阱。 *Nature Communications* 13 1 7760, 2022 *Na* , ( ): 。[29] Matthias C Caro、Hsin-Yuan Huang、Marco Cerezo、Kunal Sharma、Andrew Sornborger、Lukasz Cincio 和 Patrick J Coles。基于少量训练数据的量子机器学习泛化。 *Nature communications* 13 1 4919, 2022 *Nature com* , ( ): 。[30] Martin Larocca、Supanut Thanasilp、Samson Wang、Kunal Sharma、Jacob Biamonte、Patrick J Coles、Lukasz Cincio、Jarrod R McClean、Zo¨e Holmes 和 Marco Cerezo。变分量子计算中的贫瘠高原。 *Nature Reviews Physics*, 7(4):174–

189，2025年。[31]Elies Gil-Fuster、Casper Gyurik、Adri´an P´erez-Salinas 和 Vedran Dunjko。变分量子学习模型的可训练性与去量子化之间的关系。 *arXiv preprint arXiv:2406.07072* 2024 ，。[32] Jarrod R McClean、Sergio Boixo、Vadim N Smelyanskiy、Ryan Babbush 和 Hartmut Neven。量子神经网络训练景观中的贫瘠高原。 *Nature communications*，9(1):4812，2018年。[33]Samson Wang、Enrico Fontana、Marco Cerezo、Kunal Sharma、Akira Sone、Lukasz Cincio 和 Patrick J Coles。变分量子算法中的噪声诱导贫瘠高原。 *Nature communications* 12 1 ，( ):6961, 2021年。[34] Martin Larocca、Nathan Ju、Diego Garc´ıa-Mart´ın、Patrick J Coles 和 Marco Cerezo。量子神经网络过度参数化理论。 *Nature Computational Science* 3 6 542 551, 2023 ，( ): – 。[35] Supanut Thanasilp、Samson Wang、Marco Cerezo 和 Zo¨e Holmes。量子核方法中的指数集中。 *Nature communications*，15 1( ):5200，2024年。[36] Johannes Jakob Meyer、Marian Mularski、Elies Gil-Fuster、Antonio Anna Mele、Francesco Arzani、Alissa Wilms 和 Jens Eisert。利用变分量子机器学习中的对称性。 *quantum* 4 1 010328, 2023 ，( ): 。[37] Yuxuan Du、Tao Huang、Shan You、Min-Hsiu Hsieh 和 Dacheng Tao。变分量子算法的量子电路架构搜索。 *npj Quantum Information* 8 1 62, 2022 ，( ): 。[38] Sofiene Jerbi、Lukas J Fiderer、Hendrik Poulsen Nautrup、Jonas M K¨ubler、Hans J Briegel 和 Vedran Dunjko。超越核方法的量子机器学习。 *Nature Communications*，14 1( ):517，2023年。[39] A Colin Cameron 和 Douglas L Miller。聚类稳健推断实用指南。 *Journal of human resources* 50 2 317 372, 2015 ，( ): – 。

补充信息

附录 A：符号与初步定义

1. 索引集与概率空间

考虑：

- $\mathcal{S} = \{1, 2, \ldots, N_{\text{测试}}\}$：测试样本的索引集
- $\mathcal{T} = \{0, 1\}$：二元处理空间，其中 $t = 0$ 表示基线（浅层）架构，$t = 1$ 表示增强（深层）架构
- $\mathcal{M} \subseteq \mathbb{R}^4$：包含量子信息论量的中介空间
- $\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}$：包含预测性能指标的结果空间

2. Quantum 中介变量

对于每个测试样本 $s \in \mathcal{S}$ 和架构 $t \in \mathcal{T}$，我们定义中介向量：

$$\boldsymbol{M}_s(t) = \begin{pmatrix} S_A^{(s,t)} \\ \gamma_A^{(s,t)} \\ L_A^{(s,t)} \\ I(A:B)^{(s,t)} \end{pmatrix} \in \mathcal{M} \tag{A1}$$

其中：

- $S_{(s,t)\ A} = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A]$：约化态 $\rho_A = \text{Tr}_B[|\psi_s(t)\rangle\langle\psi_s(t)|]$的冯·诺伊曼熵，用于量化二分划分 $A|B$ 上的纠缠
- $\gamma_{(s,t)\ A} = \text{Tr}[\rho_A^2]$：子系统 A 的纯度，用于衡量相干性
- $L_{(s,t)\ A} = 1 - \gamma_{(s,t)\ A}$：线性熵，用于量化混合度
- $I(A:B)_{(s,t)} = S_{(s,t)\ A} + S_{(s,t)\ B} - S_{(s,t)\ AB}$：量子互信息，用于衡量总关联

注释 1 (纯态关系**)**。对于复合系统 AB 的纯态 $|\psi_s(t)\rangle$，我们有 $S_{AB} = 0$ 和 $S_A = S_B$，因此：

$$I(A:B)^{(s,t)} = 2S_A^{(s,t)} \tag{A2}$$

$$L_A^{(s,t)} = 1 - \gamma_A^{(s,t)} \tag{A3}$$

3. 潜在结果框架

我们添采用扩展至中介分析的 Neyman-Rubin 潜在结果框架。

定义 3 （潜在中介变量）。对于每个样本 $s \in \mathcal{S}$ 和处理 $t \in \mathcal{T}$，$\boldsymbol{M}_s(t)$ 表示在架构 t 下本应观测到的潜在中介变量向量，而不论实际分配的处理为何。

定义 4 (潜在结果**)**。对于每个样本 $s \in \mathcal{S}$、处理 $t \in \mathcal{T}$ 和中介变量值 $\boldsymbol{m} \in \mathcal{M}$,$Y_s(t, \boldsymbol{m})$ 表示在架构 t 被指定且中介变量被设为 $\boldsymbol{m}$ 时所能观测到的潜在结果（预测性能）。

定义 5 (观测量**)**。 在一致性（假设 *6*）下，观测到的中介变量和结果为：

$$\boldsymbol{M}_{s,t} = \boldsymbol{M}_s(t) \quad \textit{when treatment } t \textit{ is assigned} \tag{A4}$$
$$Y_{s,t} = Y_s(t, \boldsymbol{M}_s(t)) \equiv Y_s(t) \quad \textit{when treatment } t \textit{ is assigned} \tag{A5}$$

4. 实验设计

配对实验设计生成的数据集：

$$\mathcal{D} = \{(\boldsymbol{M}_{s,0}, Y_{s,0}, \boldsymbol{M}_{s,1}, Y_{s,1})\}_{s=1}^{N_{\text{test}}} \tag{A6}$$

其中，每个测试样本在两种架构体制下均产生观测值。

定义 6 (样本层面总效应**)**。

$$\Delta Y_s \equiv Y_{s,1} - Y_{s,0} = Y_s(1) - Y_s(0) \tag{A7}$$

定义 7 (平均总效应（平均总效应）**)**。

$$ATE \equiv \mathbb{E}[\Delta Y_s] = \frac{1}{N_{test}} \sum_{s=1}^{N_{test}} (Y_{s,1} - Y_{s,0}) \tag{A8}$$

附录B：结构因果模型

1. 线性结构方程

我们通过线性结构方程指定数据生成过程：

$$\boldsymbol{M}_s(t) = \boldsymbol{\alpha}_0 + \boldsymbol{\alpha} t + \boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)} \tag{B1}$$
$$Y_s(t, \boldsymbol{m}) = \tau_0 + \tau t + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{m} + \epsilon_s^{(Y)} \tag{B2}$$

定义 8 （结构参数）。我们定义：

- $\boldsymbol{\alpha}_0 \in \mathbb{R}^4$：在 $t = 0$ 下的基线中介变量值
- $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_{S_A}, \alpha_{\gamma_A}, \alpha_{L_A}, \alpha_{I\,(A:\,B)})^\top \in \mathbb{R}^4$：架构对每个中介变量的因果效应
- $\tau_0 \in \mathbb{R}$：在 $t = 0$ 下且中介变量为零时的基线结果
- $\tau \in \mathbb{R}$：架构对结果的直接因果效应，且不通过 $\boldsymbol{M}$中介
- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_{S_A}, \beta_{\gamma_A}, \beta_{L_A}, \beta_{I\,(A:\,B)})^\top \in \mathbb{R}^4$：在给定架构的条件下，每个中介变量对结果的因果效应

定义 9 （误差结构）。 误差项满足：

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)}] = \mathbf{0} \quad \forall s \in \mathcal{S} \tag{B3}$$
$$\mathbb{E}[\epsilon_s^{(Y)}] = 0 \quad \forall s \in \mathcal{S} \tag{B4}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)} \boldsymbol{\epsilon}_{s'}^{(M)\top}] = \boldsymbol{\Sigma}_M \mathbb{1}_{s=s'} \quad \textit{(within-sample correlation only)} \tag{B5}$$
$$\mathbb{E}[\epsilon_s^{(Y)} \epsilon_{s'}^{(Y)}] = \sigma_Y^2 \mathbb{1}_{s=s'} \quad \textit{(within-sample correlation only)} \tag{B6}$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma}_M \succ 0$ 和 $\sigma_Y^2 > 0$ 均为有限值。

注释 2 (配对设计相关性**)**。 允许误差 $\epsilon_s^{(M)}$和 $\epsilon_s^{(Y)}$在同一样本 s的不同处理之间相关，以反映样本特异性异质性。通过聚类稳健推断（*E* 节）对这种相关性进行明确处理。

2. 因果效应定义

定义 10 (自然直接效应（NDE）**)**。 样本级自然直接效应为：

$$NDE_s \equiv Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0)) - Y_s(0, \boldsymbol{M}_s(0)) \tag{B7}$$

这量化了在将中介变量保持在其基线值 $\boldsymbol{M}_s(0)$ 时，将架构从 $t = 0$ 更改为 $t = 1$ 的效应。平均自然直接效应为：

$$NDE \equiv \mathbb{E}_s[NDE_s] = \frac{1}{N_{test}} \sum_{s=1}^{N_{test}} NDE_s \tag{B8}$$

定义 11 （自然间接效应（NIE））。 样本级自然间接效应为：

$$NIE_s \equiv Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(1)) - Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0)) \tag{B9}$$

这量化了在将架构保持在 $t = 1$ 时，将中介变量从 $\boldsymbol{M}_s(0)$ 更改为 $\boldsymbol{M}_s(1)$ 的效应。平均自然间接效应为：

$$NIE \equiv \mathbb{E}_s[NIE_s] = \frac{1}{N_{test}} \sum_{s=1}^{N_{test}} NIE_s \tag{B10}$$

附录 C：识别假设

我们正式重述第二节 B 中引入的识别假设

假设 4 （序贯可忽略性）。 对于所有 $s \in \mathcal{S}$， t， $t' \in \mathcal{T}$和 $\boldsymbol{m} \in \mathcal{M}$:

1. 处理可忽略性：

$$\{Y_s(t', \boldsymbol{m}), \boldsymbol{M}_s(t)\} \perp t \tag{C1}$$

2. 条件中介可忽略性：

$$Y_s(t', \boldsymbol{m}) \perp \boldsymbol{M}_s(t) \mid t \tag{C2}$$

备注 3 （设计保证的满足性）。 我们考虑：

- 条件 ***(1)*** 成立，因为处理 t 由实验者确定性地分配。浅层 （$t = 0$）和深层 （$t = 1$）架构彼此独立训练，不存在同时影响处理分配和潜在结果的共同原因。

- 条件 ***(2)*** 成立，因为中介变量 $\boldsymbol{M}_{s,\ t}$ 是通过确定性函数，从训练后的量子态$|\psi_s\ (t)\ \rangle$ 事后计算得出的。一旦架构 t 确定，中介变量取值便完全由训练参数 θ_t^* 和输入数据 x_s决定。在给定架构的条件下，不存在同时影响中介变量和结果的未测量混杂过程。

假设 5 (无处理-中介交互作用**)**。 对于所有 $s \in \mathcal{S}$； $t \in \mathcal{T}$； $\boldsymbol{m}$， $\boldsymbol{m}' \in \mathcal{M}$:

$$\mathbb{E}[Y_s(t, \boldsymbol{m}) - Y_s(t, \boldsymbol{m}')] = \boldsymbol{\beta}^\top (\boldsymbol{m} - \boldsymbol{m}') \tag{C3}$$

也就是说，中介变量对结果的影响不取决于处理水平 .

注释 4 (经验可检验性**)**。 这一假设通过不包含交互项 $t \times \boldsymbol{m}$，体现在公式 (B2) 中。可以通过在结果模型中加入交互项并检验其联合显著性，对该假设进行经验检验。

假设 6 （一致性和稳定单元处理值假设）。 我们定义：

1. 一致性：对于所有 $s \in \mathcal{S}$ 和 $t \in \mathcal{T}$：

$$\boldsymbol{M}_{s,t} = \boldsymbol{M}_s(t), \quad Y_{s,t} = Y_s(t) \tag{C4}$$

当处理 t 被分配给样本 s时。

2. 无干扰：样本 s 的潜在结果不取决于分配给其他样本 $s' \neq s$的处理。

3. 无隐藏版本：每个处理水平 $t \in \{0, 1\}$都只有一个定义明确的版本。

备注 5 (构造性满足)。 在我们的基于仿真的评估中，所有组成部分均得到满足：

- 一致性由确定性计算保证
- 无干扰：模型独立训练和评估
- 无隐藏版本：架构均有精确定义

Appendix D: Main Theoretical Results

1. 因果分解定理1

在线性结构模型（由方程 (B1)–(B2) 和假设 4–6 定义）下，平均总效应可唯一地分解为以下加性形式：

$$\boxed{\text{ATE} = \tau + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\alpha} = \underbrace{\tau}_{\substack{\text{Direct Effect} \\ \text{NDE}}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \beta_k}_{\substack{\text{Indirect Effect} \\ \text{NIE}}}} \tag{D1}$$

其中：

- τ 量化了对性能的架构直接效应，不通过量子资源进行中介
- $\alpha_k \beta_k$ 量化了通过第 k 个量子属性介导的贡献
- 自然直接效应 $= \tau$ 和自然间接效应 $= \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\alpha}$

证明。 根据定义：

$$\begin{aligned}
\text{自然直接效应} &= \mathbb{E}[Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0)) - Y_s(0, \boldsymbol{M}_s(0))] && \text{(D2)} \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\tau_0 + \tau \cdot 1 + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{M}_s(0) + \epsilon_s^{(Y)}\right) - \left(\tau_0 + \tau \cdot 0 + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{M}_s(0) + \epsilon_s^{(Y)}\right)\right] && \text{(D3)} \\
&= \mathbb{E}[\tau] && \text{(D4)} \\
&= \tau && \text{(D5)}
\end{aligned}$$

其中第三个等号用到了 $\mathbb{E}[\epsilon_s^{(Y)}] = 0$ 和期望的线性性。由方程（B1）可得：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{M}_s(1) - \boldsymbol{M}_s(0) &= (\boldsymbol{\alpha}_0 + \boldsymbol{\alpha} \cdot 1 + \boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)}) - (\boldsymbol{\alpha}_0 + \boldsymbol{\alpha} \cdot 0 + \boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)}) && \text{(D6)} \\
&= \boldsymbol{\alpha} && \text{(D7)}
\end{aligned}$$

注意，误差 $\boldsymbol{\epsilon}_s^{(M)}$ 因样本而异，但不随处理而变，因此在差值中抵消。根据定义和假设 5：

$$\begin{aligned}
\text{NIE} &= \mathbb{E}[Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(1)) - Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0))] && \text{(D8)}\\
&= \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\beta}^\top (\boldsymbol{M}_s(1) - \boldsymbol{M}_s(0))\right] \quad \text{(by Assumption 5)} && \text{(D9)}\\
&= \boldsymbol{\beta}^\top \mathbb{E}[\boldsymbol{M}_s(1) - \boldsymbol{M}_s(0)] \quad \text{(linearity of expectation)} && \text{(D10)}\\
&= \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\alpha} && \text{(D11)}\\
&= \sum_{k=1}^{K} \alpha_k \beta_k && \text{(D12)}
\end{aligned}$$

在一致性（假设 6）下：

$$\begin{aligned}
\text{ATE} &= \mathbb{E}[Y_s(1) - Y_s(0)] && \text{(D13)}\\
&= \mathbb{E}[Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(1)) - Y_s(0, \boldsymbol{M}_s(0))] && \text{(D14)}
\end{aligned}$$

加上并减去反事实项 $Y_s(1,\ \boldsymbol{M}_s(0))$：

$$\begin{aligned}
\text{ATE} &= \mathbb{E}[Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(1)) - Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0))] + \mathbb{E}[Y_s(1, \boldsymbol{M}_s(0)) - Y_s(0, \boldsymbol{M}_s(0))] && \text{(D15)}\\
&= \text{NDE} + \text{NIE} && \text{(D16)}\\
&= \tau + \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\alpha} && \text{(D17)}
\end{aligned}$$

□

2. 纯态下的可识别性

引理 2（中介变量秩亏）。 对于纯量子态，中介变量矩阵的秩为 *2*：

$$rank(\boldsymbol{M}) = 2 \quad due\ to \begin{cases} I(A:B) = 2S_A \\ L_A = 1 - \gamma_A \end{cases} \tag{D18}$$

命题 1（总间接效应的可识别性）。 尽管引理 *2* 中存在秩亏，总间接效应 $NIE = \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{\alpha}$ 仍可被唯一识别，且不受中介变量基选择的影响。

证明。 总间接效应仅取决于总和 $\sum_{k=1}^{K} \alpha_k \beta_k$，而非各个单独系数。在以下线性约束下：

$$\begin{aligned}
\alpha_{I(A:B)} &= 2\alpha_{S_A} && \text{(D19)}\\
\alpha_{L_A} &= -\alpha_{\gamma_A} && \text{(D20)}
\end{aligned}$$

同理，对于 β，我们有：

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{4} \alpha_k \beta_k &= \alpha_{S_A}\beta_{S_A} + \alpha_{\gamma_A}\beta_{\gamma_A} + \alpha_{L_A}\beta_{L_A} + \alpha_{I(A:B)}\beta_{I(A:B)} && \text{(D21)}\\
&= \alpha_{S_A}\beta_{S_A} + \alpha_{\gamma_A}\beta_{\gamma_A} + (-\alpha_{\gamma_A})\beta_{L_A} + (2\alpha_{S_A})\beta_{I(A:B)} && \text{(D22)}\\
&= \alpha_{S_A}(\beta_{S_A} + 2\beta_{I(A:B)}) + \alpha_{\gamma_A}(\beta_{\gamma_A} - \beta_{L_A}) && \text{(D23)}
\end{aligned}$$

这可以仅使用具有复合系数的独立中介变量（S_A，γ_A）重新参数化，从而得到相同的总间接效应。

□

附录 E：统计估计与推断

1. 普通最小二乘法估计

定义 12 (堆叠数据集**)。** 定义合并数据集：

$$\mathcal{D}_{pooled} = \{(t, \boldsymbol{M}_{s,t}, Y_{s,t}) : s \in \mathcal{S}, t \in \mathcal{T}\} \tag{E1}$$

包含 $|\mathcal{D}_{pooled}| = 2N_{test}$ 个观测值。

定义 13 (OLS估计量**)。** 我们定义：

1. 中介变量系数：

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \frac{1}{N_{test}} \sum_{s=1}^{N_{test}} (\boldsymbol{M}_{s,1} - \boldsymbol{M}_{s,0}) \tag{E2}$$

2. 结果变量系数：

$$(\hat{\tau}_0, \hat{\tau}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) = \arg\min_{\tau_0, \tau, \boldsymbol{\beta}} \sum_{s=1}^{N_{test}} \sum_{t \in \{0,1\}} \left[Y_{s,t} - \tau_0 - \tau t - \boldsymbol{\beta}^\top \boldsymbol{M}_{s,t} \right]^2 \tag{E3}$$

定理 3 (OLS估计量的一致性**)。** 在假设 *4–6* 和标准正则条件下：

$$(\hat{\tau}, \hat{\boldsymbol{\beta}}, \hat{\boldsymbol{\alpha}}) \xrightarrow{p} (\tau, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}) \quad as\ N_{test} \to \infty \tag{E4}$$

证明。 这是正确设定和外生性条件下线性回归理论的标准结果（由假设 4 保证）。

□

2. 聚类稳健推断

定义 14 (聚类稳健标准误**)。** 为考虑样本内相关性，我们计算 *Eicker-Huber-White* 聚类稳健标准误 *[39],*，并在样本层级进行聚类：

$$\widehat{Var}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \left(\sum_{s=1}^{N_{test}} \boldsymbol{X}_s^\top \hat{\boldsymbol{u}}_s \hat{\boldsymbol{u}}_s^\top \boldsymbol{X}_s \right) (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \tag{E5}$$

其中， $\boldsymbol{X}_s$ 包含样本 s的两行$(t = 0, t = 1)$，而$\hat{}\boldsymbol{u}_s$ 是相应的残差。

3. Bootstrap 置信区间

定义 15 （非参数百分位自助法）。 对于间接效应 $\alpha_k \beta_k$ （即参数的乘积）：

- *Resample* $s^* \in \{1, \ldots, N_{test}\}$ *with replacement,* $B = 2000$ *times*
- *For each bootstrap sample* b*, estimate* $(\hat{\boldsymbol{\alpha}}^{(b)}, \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(b)})$
- *Compute* $\hat{\theta}_k^{(b)} = \hat{\alpha}_k^{(b)} \hat{\beta}_k^{(b)}$
- 95% *CI:* $[\hat{\theta}_k^{(0.025)}, \hat{\theta}_k^{(0.975)}]$ *using empirical quantiles*

4. 模型验证

定义 16（相对一致性误差）。

$$\epsilon_{rel} = \frac{|\widehat{ATE} - (\hat{\tau} + \hat{\boldsymbol{\beta}}^\top \hat{\boldsymbol{\alpha}})|}{|\widehat{ATE}| + 10^{-12}} \tag{E6}$$

其中 $\widehat{\text{平均总效应}} = N_{test}^{-1} \sum_s (Y_{s,\ 1} - Y_{s,\ 0})$ 为经验总效应。

命题 2 (拟合优度准则**)**。 若 $\epsilon_{rel} < 0.05$ （容差为 *5%*），则接受该线性模型，这表明基于回归的分解能够准确重构观测总效应。

附录 F：补充图

本节汇集的补充图是对正文的重要扩展，为反事实因果中介框架的每个分析阶段提供层次分明的视觉证据。这些图并非仅仅是辅助材料，而是共同奠定了本研究因果结论所依据的经验与统计基础，旨在使所有报告结果均可接受独立审查并完全复现。

这些图围绕三个互补的方面组织。第一个方面涉及实验设定与可观测性能：补充图 6 展示了五种参数化量子电路拓扑——全连接、成对、线性、环形和深层——精确的门级架构，每种拓扑分别探测一种性质迥异的纠缠态；补充图 7 则系统报告了所有 43 种通过假设验证的配置以及三个基准数据集上的分类准确率、F1 分数和 ROC 曲线下面积，揭示了显著依赖于拓扑结构和任务的学习动态。

第二个维度涉及统计严谨性和模型验证。补充图8提供了一个四面板诊断，确认加性分解平均总效应 $= \tau + \sum_k \alpha_k \beta_k$ 在所有配置下均达到机器精度，其相对重构误差为 10^{-11}% 量级，观测总效应与预测总效应之间呈完美的线性对应关系（$R^2 = 1.000$），并且通过设计完全满足两项识别假设。补充图9通过皮尔逊和斯皮尔曼相关分析，考察了单个中介变量贡献与总性能变化之间的双变量关联；补充图10则展示了标准回归诊断，包括残差与拟合值图、正态 Q-Q 图以及按数据集划分的残差分布，确认了同方差性、高斯误差结构，并表明不存在系统性的数据集特异性偏差。

第三个维度涉及因果归因和中介结构。补充图11提供了所有配置下基于数据的显著性分类，从拓扑层面厘清了直接架构扩展与量子介导路径的相对贡献。补充图12记录了中介变量相关矩阵和方差分解，以实证方式确认了纯态量子力学（引理 2）所预测的中介空间秩-2结构，并验证了命题 1中确立的总间接效应的基不变可识别性。这些图共同构成了正文中所有因果解释的定量基础。

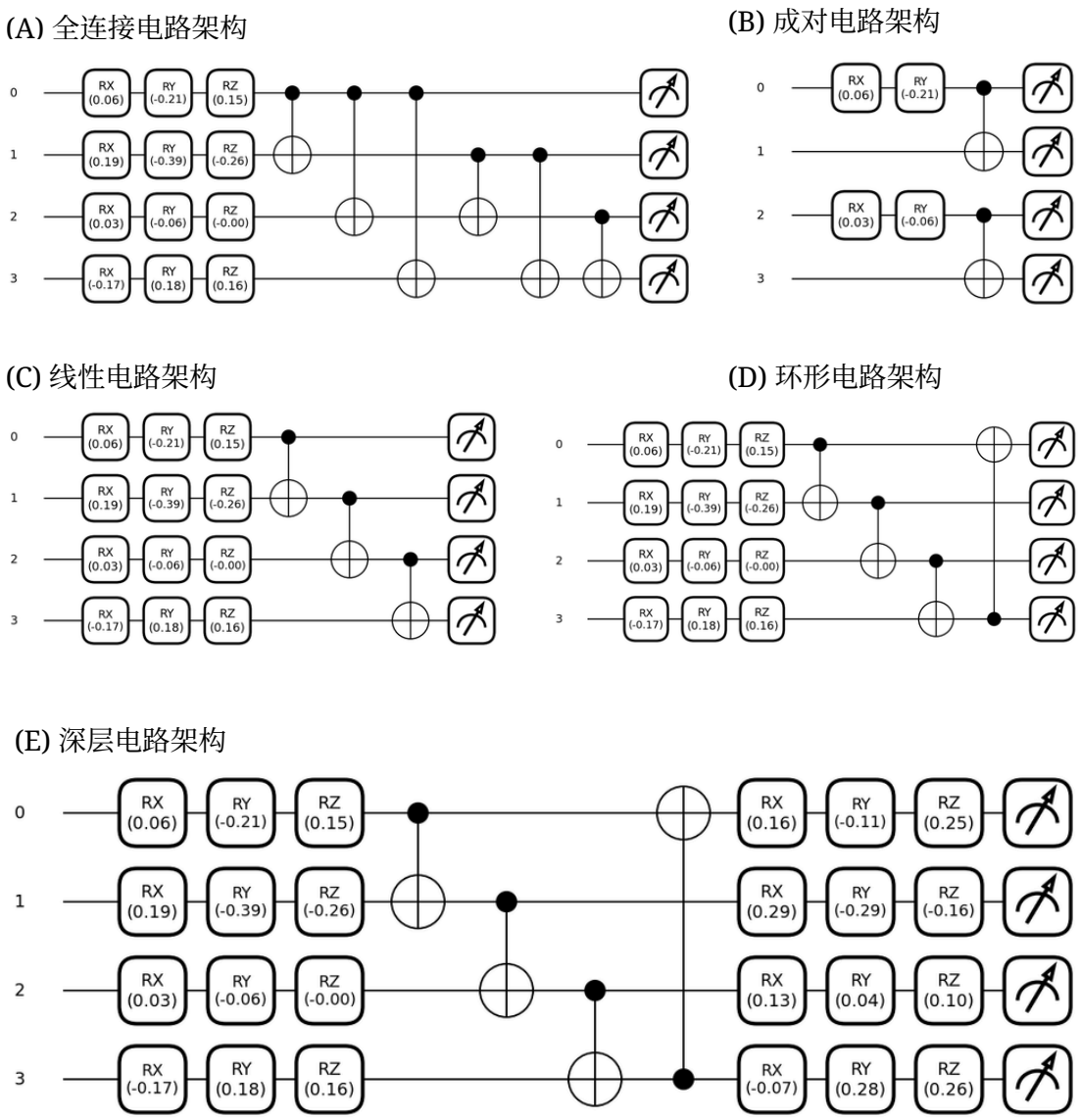

图 6. **五种量子电路架构探究了不同的纠缠机制。(A) 全连接：**全连接连接性（$n^2/2$ CNOT门）可在一层内实现最大纠缠，但门成本呈二次增长，且面临可训练性挑战。**(B) 成对：**不相交量子比特对 (0,1)、(2,3) 形成彼此独立的二分子系统，其关联具有局域性，限制了全局量子资源利用。**(C) 线性：**最近邻链式耦合产生面积律纠缠，并提升优化稳定性。**(D) 环形：**周期性边界确保纠缠传播均匀，与超导硬件拓扑结构相匹配。**(E) 深层：**采用交错排列的 CNOT 门的砖墙式结构，可在 $\lceil \log_2 n \rceil$ 层内实现全局纠缠，同时保持硬件效率。每种拓扑均采用 n=4 个量子比特、 $T_0 = 1$ 基线层和 $T_1 \in \{3,6\}$ 增强层实例化，从而能够系统地探索架构与量子资源耦合在三种分类任务（糖尿病、乳腺癌、电离层）中的表现。

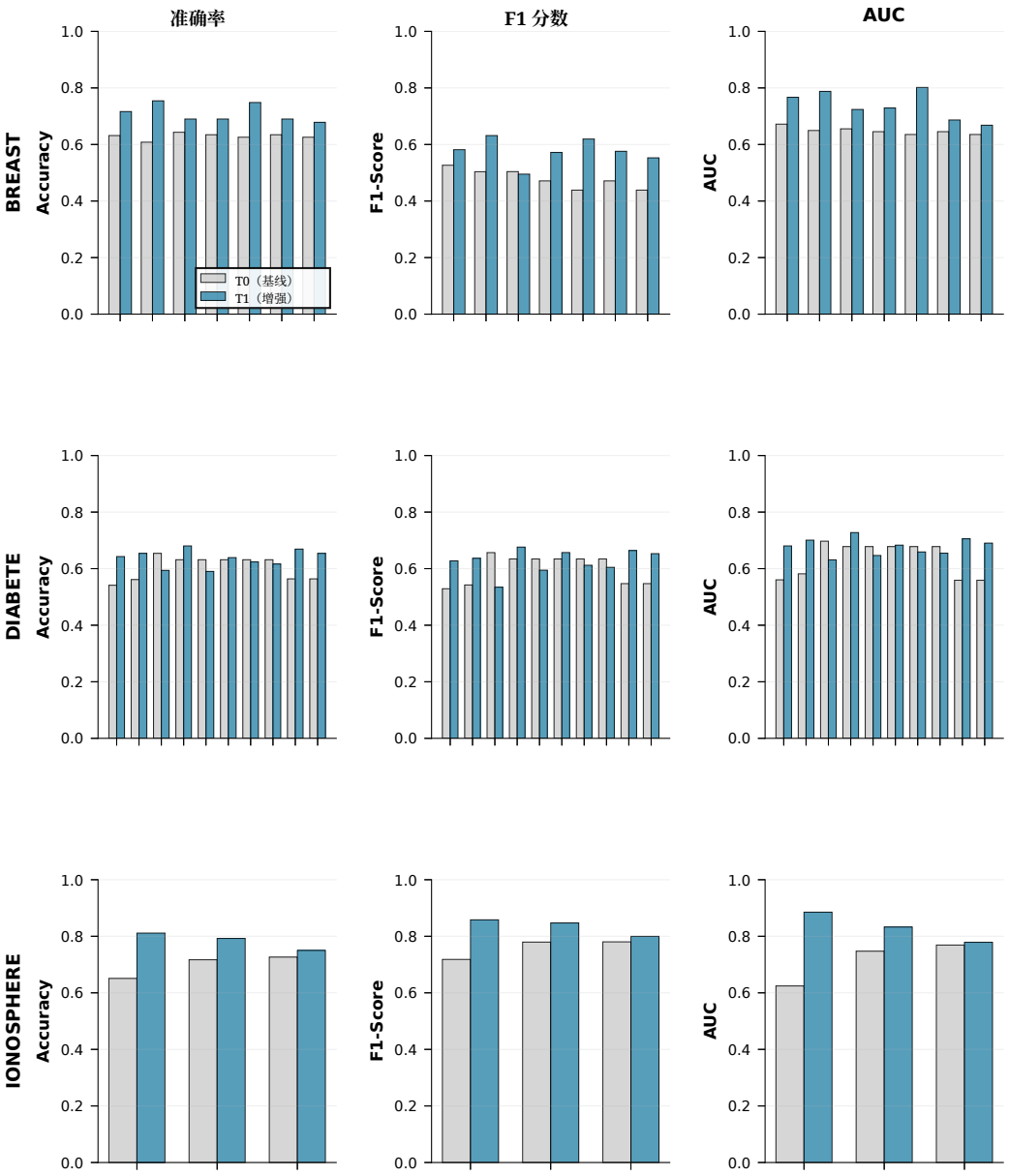

图 7. **综合性能指标揭示了架构和任务依赖的学习动态**。 条形图展示了 43/90 种经验证假设的架构配置在三个数据集上的准确率、F1 分数和曲线下面积，对比了基线（T_0）与增强（T_1）架构。**乳腺癌：** 深层和线性配置的 T_1 提升幅度最大（准确率为 65-75%），而全连接电路表现出较高的方差，反映了其对优化的敏感性。**糖尿病：** 性能有所提升（处于 60-70% 区间），其中环形和深层架构表现最佳，成对架构则始终表现较差（$\approx 60\%$）。**电离层：** 绝对性能最高（ 75-85%），深层架构的提升尤为显著（$\Delta Y \approx 20\%$）。在所有数据集和指标中，成对拓扑的 $T_0 - T_1$ 对比度普遍最低。

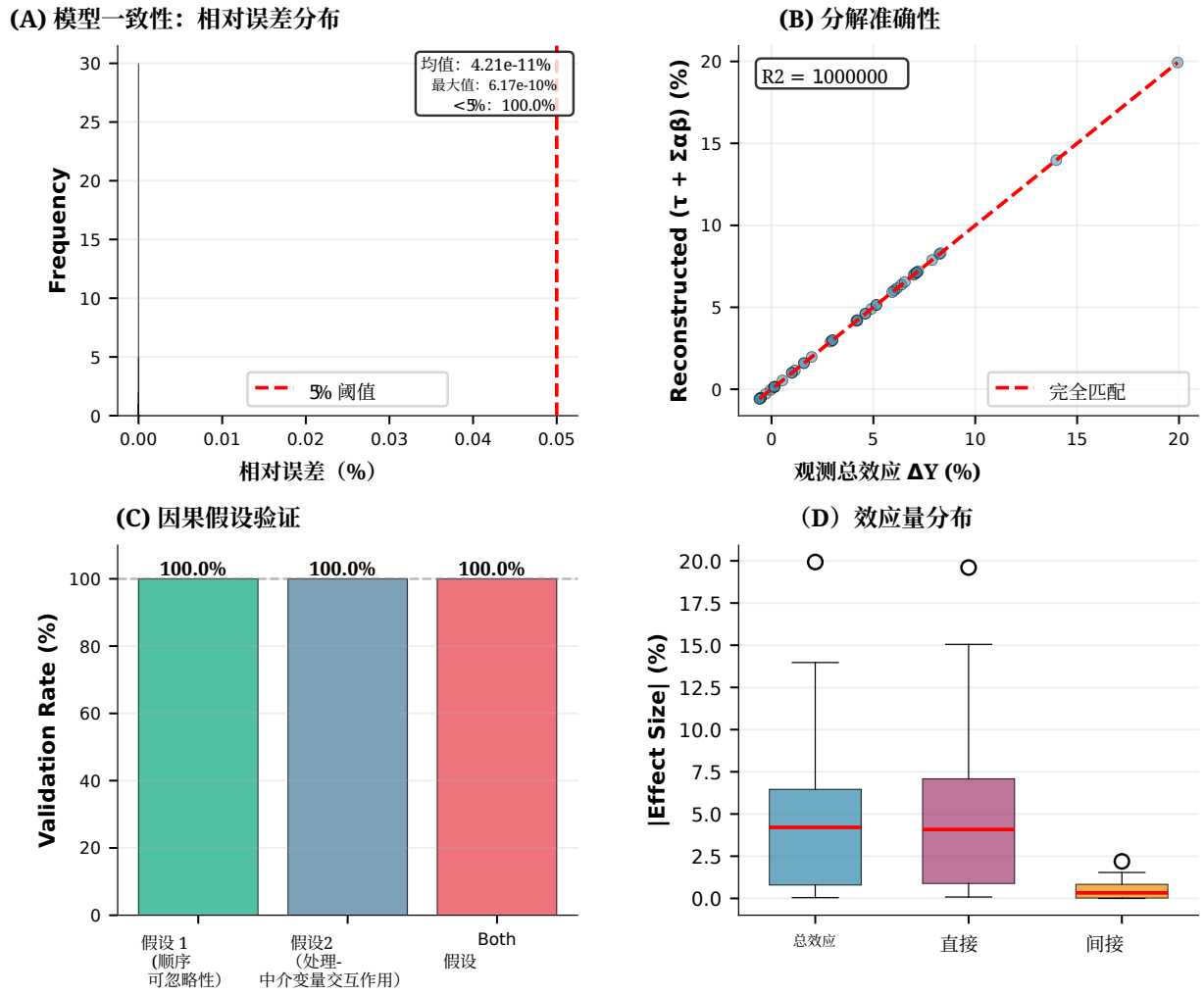

图 8. **严格的统计验证证实了结构方程模型设定和因果可识别性。**（**A**）相对误差分布（均值 4.21×10^{-11}%，最大值 6.17×10^{-10}%）表明实现了完美重构：100% 的配置均满足 5% 的容差，证实加性分解中平均总效应 $= \tau + \sum \alpha\beta$ 严格成立。（**B**）观测到的总效应与重构的总效应之间呈完美线性拟合（$R^2 = 1.0$），验证了基于回归的因果推断未检测到系统性偏差。（**C**）所有 43 种配置均通过设计满足序贯可忽略性（A1）和无处理-中介交互作用（A2）假设：确定性处理分配、事后中介变量计算以及独立训练流程共同保证了在不存在未测量混杂的情况下实现因果可识别性。（**D**）效应量分布显示直接效应占主导地位（中位数 5%，四分位距 2 - 7%），而间接效应仍处于次要地位（中位数 0.5%，四分位距 0 - 2%）；总效应范围为 0 - 20%。

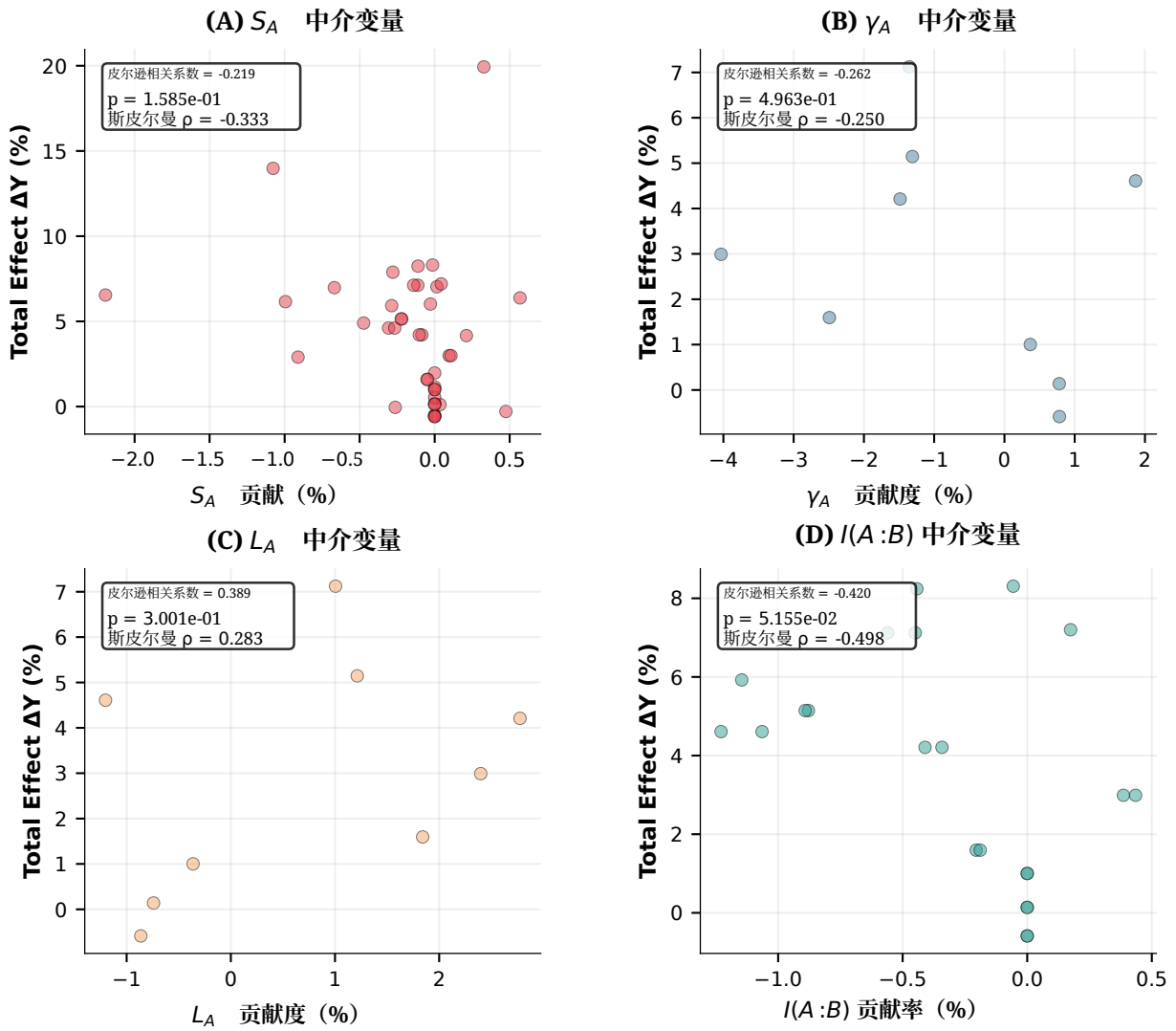

图 9. **中介变量-结果相关性显示，在 43 种配置中，路径特异性关联较弱。** 散点图展示了各个中介变量贡献（$\alpha_k\beta_k$）与总性能变化（ΔY）之间的双变量关系。**(A)** S_A**：** 弱负相关（皮尔逊 $r = -0.22$， $p = 0.16$；斯皮尔曼 $\rho = -0.33$），表明纠缠熵贡献并不会系统性地推动性能增益。**(B)** γ_A**：** 关联可忽略（$r = -0.26$， $p = 0.50$）；尽管纯度在 MAMC 指标中占主导地位，但其贡献仍低于显著性阈值。**(C)** L_A**：** 弱正向趋势（$r = 0.39$， $p = 0.30$），但不显著，反映混合度是次要中介变量。**(D)** I（$A:\ B$）**：** 负相关最强（$r = -0.42$， $p = 0.05$； $\rho = -0.50$），接近显著，但不足以确立量子优势机制。所有相关性均不显著或仅边缘显著（$p > 0.05$），这证实量子介导路径相较于架构直接效应仍处于次要地位，与正文中 93% 的配置处于中性机制的发现一致。

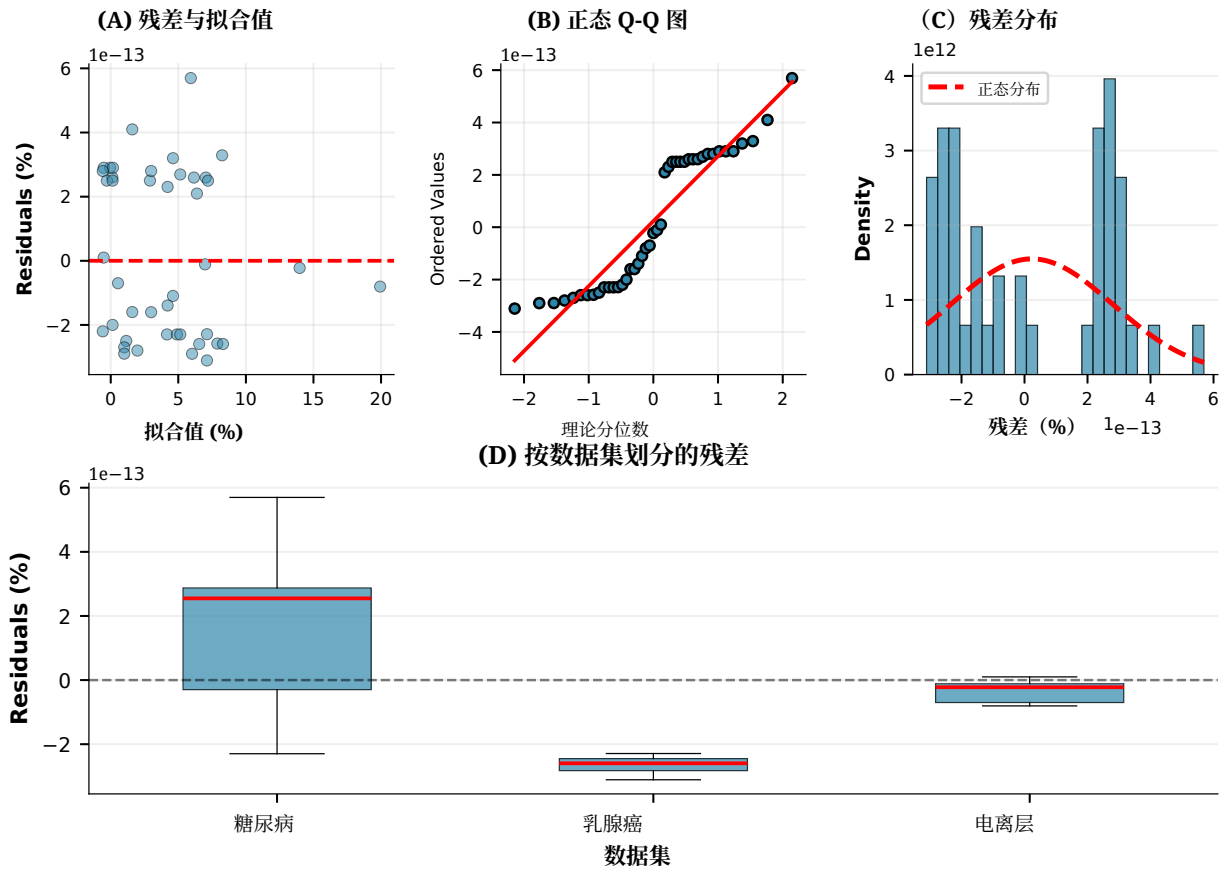

图10。**残差诊断验证了线性模型假设：正态性、同方差性和独立性。(A)** 残差与拟合值图显示垂直方向的散布均匀，没有漏斗形态，证实在整个性能范围内均满足同方差性（恒定方差）。**(B)** $Q-Q$ 图显示残差与理论正态分位数几乎完美对齐（残差为 $\approx 10^{-13}$%，达到机器精度），验证了高斯误差假设$E[\epsilon_s^{(y)}] = 0$。**(C)** 残差直方图呈现以零为中心的对称钟形分布，并叠加理论正态曲线，实证验证了正态性。**(D)** 按数据集划分的残差显示，糖尿病、乳腺癌和电离层数据集的散布程度相近，中位数均接近零，证实不存在违反模型设定的系统性数据集特异性偏差或异质性。该诊断图组整体验证了线性结构方程（方程 B1 和 B2）在配对实验设计下能对因果参数（τ，β，α）给出无偏且一致的估计，从而能够通过定理1的分解进行有效的反事实推断。

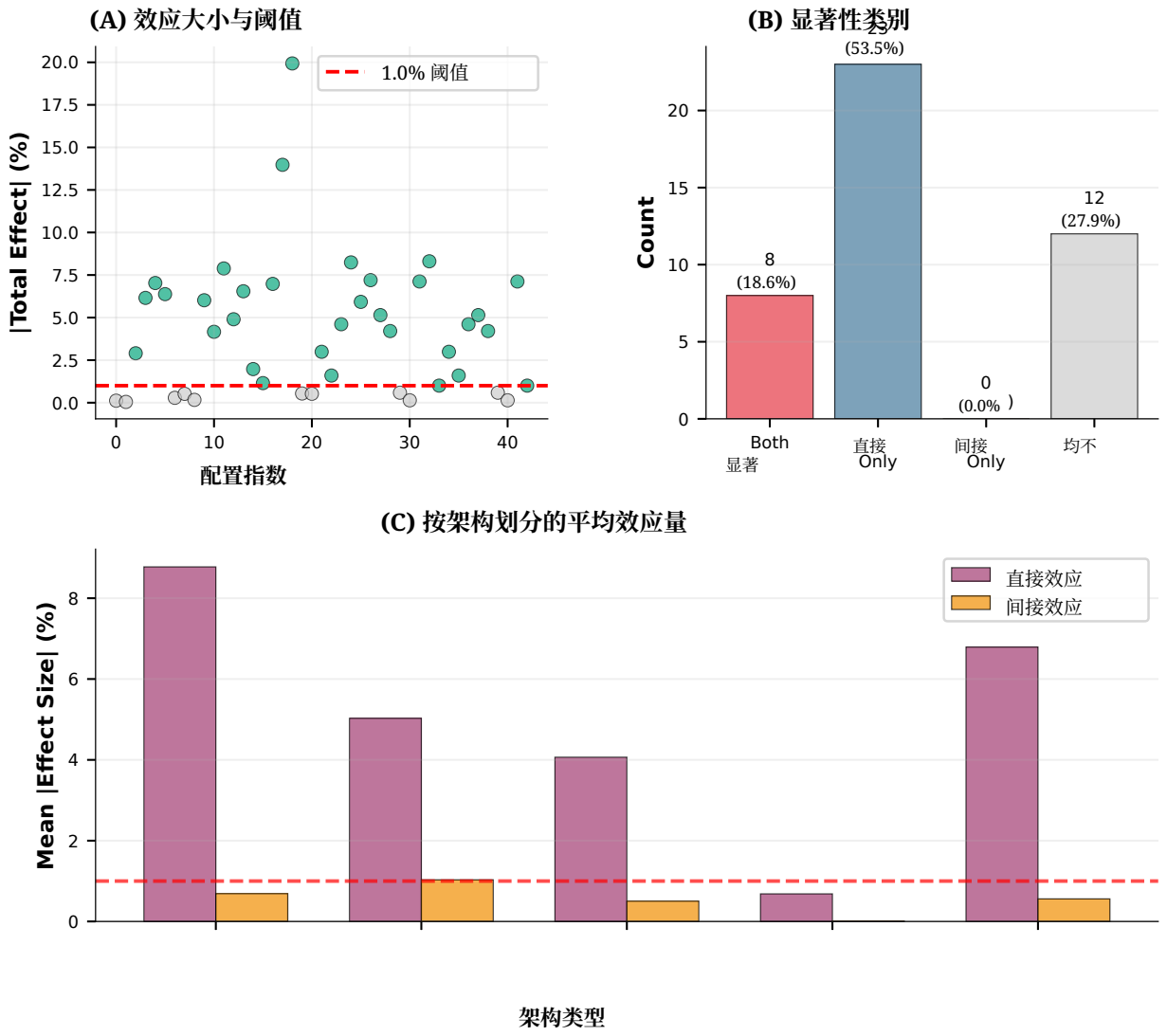

图11. **数据驱动的显著性检验可区分实质性的因果效应与数值精度伪影。(A)** 总效应大小（43种配置）与1.0%阈值的对比图。**(B)** 显著性分类：18.6%的配置中直接效应和间接效应均显著（两者均显著），53.5%仅直接效应显著（架构扩展而无量子中介作用），0%仅间接效应显著（不存在纯粹的量子优势），27.9%两者均不显著（中性机制）。仅间接效应显著的配置为零，这证实量子资源从未脱离架构因素而独立驱动性能增益。**(C)** 特定架构模式：深层架构和环形架构的直接效应最大（分别为≈ 8%和7%），而所有拓扑结构中的间接效应始终明显较小（<1.5%）。成对架构在两种路径上的效应均接近于零，证实了先前的发现。严格的统计方法确保报告的效应反映真实的因果机制，而非分解伪影。

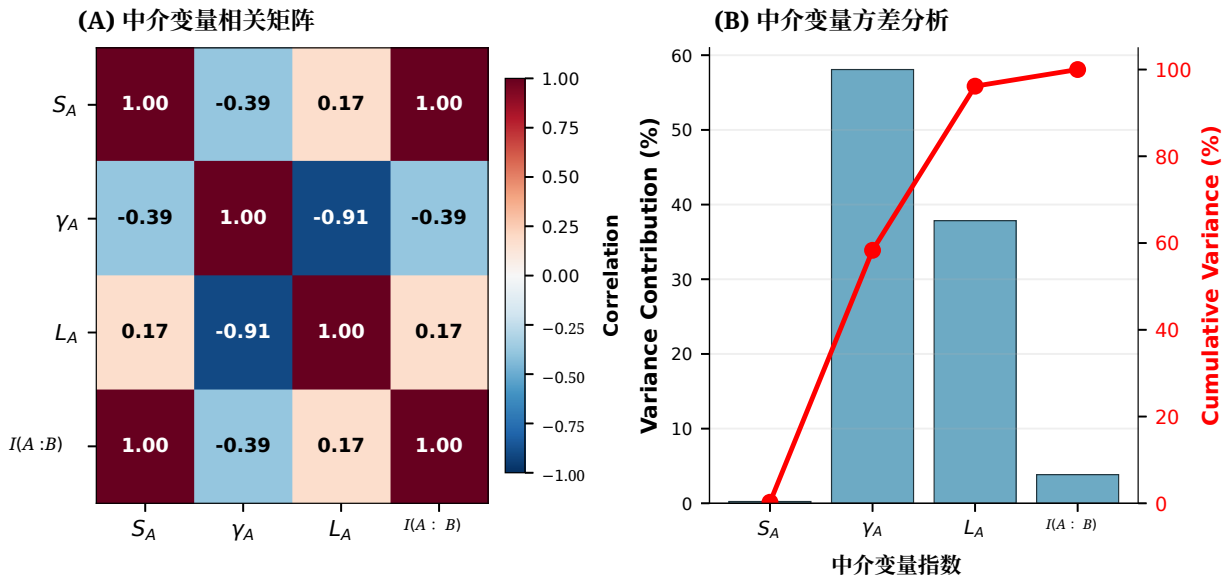

图12. **中介变量之间的完全相关反映了纯态理论约束，验证了命题 1 的可识别性。(A)** 相关矩阵揭示了函数依赖： S_A 和 I（A: B）完全相关（r=1.00），这是由纯态关系 I（A： B） $= 2S_A$ （式 A2）导致的； γ_A 和 L_A 根据定义 $L_A = 1 - \gamma_A$ （式 A3）呈强负相关（$r = -0.91$）。交叉相关较弱（$|r| < 0.40$），表明 S_A 和γ_A 捕捉的是相互独立的量子属性（纠缠与相干性）。**(B)** 方差分析： S_A 占中介变量总方差的 58%， γ_A 37%， L_A 和 I（A： B）因函数依赖而影响极小。两个主成分解释了 95% 的累积方差，证实中介变量矩阵的秩为 2（引理 2）。尽管存在共线性，总间接效应 $NIE = \sum \alpha_k \beta_k$ 仍可被唯一识别，且不随中介变量基的选择而改变（命题 1 证明）；即使存在冗余，分解仍然有效。协方差结构在理论上得到预测、在经验上得到证实，并在数学上得到解决。

附录G：补充表格

以下表格报告了本研究评估的全部 90 种架构-数据集配置的全面数值结果，涵盖五种量子电路拓扑（深层、全连接、线性、成对、环形）和三个基准分类数据集（乳腺癌、糖尿病、电离层）。每种配置均在基线浅层架构（$T_0 = 1$ 层）和增强型深层架构（$T_1 \in \{3, 6\}$层）下进行评估，并使用两个独立的随机种子（42 和 142）来评估可复现性。对于每种配置，表格报告：

（i）数据驱动的显著性阈值 $\epsilon_{\text{intra}} = c \cdot \text{SD}(\Delta Y_s)$，其中 $c = 0.5$，用于将因果效应划分为具有统计实质意义或可忽略；（ii） T_0 和 T_1的原始预测性能指标——准确率、F1 分数和曲线下面积，以绝对值和架构间差异的百分点表示；（iii）每个量子中介变量（S_A, γ_A, L_A, $I(A{:}B)$）的平均绝对中介贡献（MAMC），用于量化各中介变量在测试分布中的平均因果影响大小；ˆ（iv）估计的直接效应 ˆτ、总间接效应 $\sum_k$ ˆ $\alpha_k \beta_k$和总效应 ΔY，均以百分点表示；以及（v）两项识别假设——假设 1（序贯可忽略性，A1）和假设 2（无处理-中介交互作用，A2）——的满足状态，编码为完全满足（✓）、部分满足（∼）或不满足（×）。

表中列出了中介变量子集（一个、两个或四个中介变量）的结果，以说明因果分解对中介变量选择的敏感性，这与命题1中的可识别性论证一致。

符号“–”表示在给定子模型中被排除的中介变量。为确保完整性，表中保留了未满足全部43项经验证的假设的配置，但正文报告的主要因果分析不包括这些配置。补充表II列出威斯康星乳腺癌数据集的结果；补充表III列出糖尿病数据集的结果；补充表IV列出电离层数据集的结果。综合来看，这些表格完整呈现了所有因果估计的数值依据，从而能够独立验证所报告的效应和状态分类。

Arch	层 T0	T1	种子	阈值	性能（%） ACC	F1	曲线下面积	MAMC（%） S_A	γ_A	L_A	I（A: B）	效应（%） 直接效应	间接效应	总效应	假设 A1	A2
deep	1	3	42	9.9	+4.7	-0.9	+5.7	0.47	-	-	-	5.38	-0.47	4.90	✓	✓
	1	3	142	8.7	+12.3	+11.9	+13.4	0.28	-	-	-	8.17	-0.28	7.89	✓	✓
	1	6	42	10.5	+7.6	+2.4	+7.1	0.24	-	-	0.96	8.05	-1.20	6.85	×	✓
	1	6	42	10.5	+7.6	+2.4	+7.1	0.23	0.92	0.34	0.91	8.57	-1.72	6.85	×	✓
	1	6	142	8.5	+14.6	+12.8	+13.8	0.01	-	-	0.06	8.38	-0.07	8.31	✓	✓
	1	6	142	8.5	+14.6	+12.8	+13.8	0.01	0.94	1.50	0.04	7.80	0.51	8.31	×	×
full	1	3	42	10.3	+4.7	-0.9	+6.8	2.19	-	-	-	8.74	-2.19	6.55	✓	✓
	1	3	142	9.1	+3.5	+7.0	+6.7	4.10	-	-	-	8.76	-4.10	4.66	×	∼
	1	6	42	9.1	+9.9	+7.3	+11.9	0.77	-	-	3.08	11.93	-3.86	8.08	×	×
	1	6	42	9.1	+9.9	+7.3	+11.9	0.77	3.02	2.45	3.08	12.50	-4.42	8.08	×	×
	1	6	142	8.2	+11.1	+17.7	+15.0	0.58	-	-	2.34	9.02	-2.92	6.10	×	×
	1	6	142	8.2	+11.1	+17.7	+15.0	0.58	2.74	3.20	2.32	8.54	-2.44	6.10	×	×
线性	1	3	42	10.2	+4.1	+4.6	+7.6	0.03	-	-	-	6.05	-0.03	6.02	✓	✓
	1	3	142	7.1	+7.0	+15.5	+9.1	0.21	-	-	-	3.95	0.21	4.16	✓	✓
	1	6	42	9.8	+8.2	+4.0	+9.9	0.20	-	-	0.81	8.31	-1.01	7.29	×	×
	1	6	42	9.8	+8.2	+4.0	+9.9	0.19	2.05	2.39	0.78	7.93	-0.63	7.29	×	×
	1	6	142	8.5	+12.3	+18.1	+16.6	0.11	-	-	0.45	7.68	-0.56	7.12	✓	✓
	1	6	142	8.5	+12.3	+18.1	+16.6	0.14	1.35	1.01	0.56	8.17	-1.05	7.12	✓	✓
成对	1	3	42	3.7	+5.3	+8.3	+5.2	0.00	-	-	-	1.97	0.00	1.97	✓	✓
	1	3	142	3.7	+5.8	+12.6	+3.1	0.00	-	-	-	1.15	0.00	1.15	✓	✓
	1	6	42	3.8	+5.8	+9.4	+5.2	0.00	-	-	0.00	1.99	0.00	1.99	✓	×
	1	6	42	3.8	+5.8	+9.4	+5.2	0.00	0.28	0.24	0.00	1.95	0.04	1.99	✓	∼
	1	6	142	3.5	+5.3	+11.4	+3.3	0.00	-	-	0.00	1.00	0.00	1.00	✓	✓
	1	6	142	3.5	+5.3	+11.4	+3.3	0.00	0.37	0.36	0.00	1.00	0.01	1.00	✓	✓
ring	1	3	42	10.3	+15.2	+0.5	+15.2	1.57	-	-	-	11.52	-1.57	9.95	×	∼
	1	3	142	8.8	+11.1	+4.4	+13.8	2.15	-	-	-	10.91	-2.15	8.76	×	∼
	1	6	42	10.0	+14.0	+3.2	+14.4	0.06	-	-	0.23	9.91	0.28	10.19	×	✓
	1	6	42	10.0	+14.0	+3.2	+14.4	0.10	0.04	0.01	0.39	9.73	0.46	10.19	×	×
	1	6	142	9.5	+16.4	+13.8	+16.5	0.23	-	-	0.94	12.34	-1.17	11.17	×	×
	1	6	142	9.5	+16.4	+13.8	+16.5	0.24	0.93	1.60	0.94	11.67	-0.51	11.17	×	×

表II. **乳腺癌数据集的综合实验结果**。针对 5 $T_0 = 1$ $T_1 \in$ 种量 $\{3, 6\}$ 42, 142 ϵ_{intra} 子电路架构（深层、全连接、线性、成对、环形）下的 30 种配置，每种配置均使用随机种子进行评估，并采用基线层和增强层。阈值表示用于统计显著性检验的数据驱动阈值（）。性能指标显示改进（$T_1 - T_0$）的百分点：正值表示性能提升，负值表示性能下降。平均绝对中介贡献（MAMC）量化了每个量子中介变量的因果影响，其中 I（A: B）在各种配置中表现出最强中介效应。平均直接效应：7.43%，平均间接效应：-1.03%。100% 的配置显示出显著的总效应（$|\Delta Y| > 1\%$）。47% 的情况下满足假设 A1（序贯可忽略性）。假设 A2（无处理-中介交互作用）：完全满足（15），部分满足（4），不满足（11）。

Arch	层		种子阈值		性能 (%)			MAMC (%)				效应 (%)			假设	
	T0	T1			ACC	F1	曲线下面积	S_A	γ_A	L_A	$I(A:B)$	直接效应	间接效应	总效应	A1	A2
deep	1	3	42	8.2	+17.3	+14.6	+18.9	0.99	-	-	-	7.15	-0.99	6.16	✓	✓
	1	3	142	6.7	+3.0	+5.1	+5.1	0.91	-	-	-	3.81	-0.91	2.90	✓	✓
	1	6	42	8.1	+20.3	+18.3	+24.2	0.11	-	-	0.44	8.80	-0.55	8.24	✓	✓
	1	6	42	8.1	+20.3	+18.3	+24.2	0.12	0.32	0.11	0.47	8.62	-0.38	8.24	×	×
	1	6	142	8.3	+3.8	+5.0	+5.8	0.31	-	-	1.23	6.15	-1.54	4.61	✓	✓
	1	6	142	8.3	+3.8	+5.0	+5.8	0.27	1.87	1.20	1.06	5.28	-0.67	4.61	✓	✓
full	1	3	42	6.8	-6.0	-12.2	-6.6	0.47	-	-	-	-0.76	0.47	-0.29	✓	✓
	1	3	142	7.7	+3.8	+0.6	+3.7	1.87	-	-	-	3.71	-1.87	1.84	×	∼
	1	6	42	8.9	+1.5	-0.0	+4.6	0.22	-	-	0.88	6.24	-1.10	5.15	✓	✓
	1	6	42	8.9	+1.5	-0.0	+4.6	0.22	1.31	1.21	0.89	6.36	-1.21	5.15	✓	✓
	1	6	142	8.7	+8.3	+8.4	+5.3	0.09	-	-	0.34	4.64	-0.43	4.21	✓	✓
	1	6	142	8.7	+8.3	+8.4	+5.3	0.10	1.49	2.78	0.41	3.43	0.78	4.21	✓	✓
线性	1	3	42	2.7	-3.8	-3.4	-1.6	0.04	-	-	-	0.08	0.04	0.12	✓	✓
	1	3	142	6.7	-4.5	-4.5	-4.6	0.26	-	-	-	0.22	-0.26	-0.05	✓	✓
	1	6	42	8.3	-0.8	+1.0	-0.3	0.10	-	-	0.39	2.51	0.48	2.99	✓	✓
	1	6	42	8.3	-0.8	+1.0	-0.3	0.11	4.03	2.40	0.43	4.08	-1.09	2.99	✓	✓
	1	6	142	7.1	+2.3	+3.6	+1.3	0.05	-	-	0.21	1.85	-0.26	1.60	✓	✓
	1	6	142	7.1	+2.3	+3.6	+1.3	0.05	2.49	1.84	0.19	2.48	-0.89	1.60	✓	✓
成对	1	3	42	1.9	+0.0	-1.1	-4.1	0.00	-	-	-	-0.52	0.00	-0.52	✓	✓
	1	3	142	1.3	-1.5	-3.4	+0.3	0.00	-	-	-	0.16	0.00	0.16	✓	✓
	1	6	42	2.3	-0.8	-2.1	-4.1	0.00	-	-	-	-0.59	0.00	-0.59	✓	✓
	1	6	42	2.3	-0.8	-2.1	-4.1	0.00	0.78	0.86	0.00	-0.51	-0.08	-0.59	✓	✓
	1	6	142	1.2	-2.3	-3.8	-0.5	0.00	-	-	0.00	0.14	0.00	0.14	✓	✓
	1	6	142	1.2	-2.3	-3.8	-0.5	0.00	0.78	0.74	0.00	0.10	0.04	0.14	✓	✓
ring	1	3	42	8.8	+12.8	+12.7	+17.6	0.57	-	-	-	5.81	0.57	6.38	✓	✓
	1	3	142	8.7	+8.3	+10.7	+11.7	0.02	-	-	-	7.02	0.02	7.03	✓	✓
	1	6	42	8.7	+10.5	+9.6	+18.5	0.04	-	-	0.17	6.98	0.22	7.20	✓	✓
	1	6	42	8.7	+10.5	+9.6	+18.5	0.05	1.24	2.39	0.19	5.82	1.38	7.20	×	×
	1	6	142	9.1	+7.5	+11.6	+7.8	0.29	-	-	1.15	7.36	-1.43	5.92	✓	✓
	1	6	142	9.1	+7.5	+11.6	+7.8	0.29	1.65	0.86	1.16	8.16	-2.24	5.92	×	∼

表 III. **糖尿病数据集的综合实验结果**。对 5 种量子电路架构（深层、全连接、线性、成对、环形）中的 30 种配置进行的结果，每种配置均使用 $T_0 = 1$ 基线层和 $T_1 \in \{3, 6\}$ 增强层，并采用随机种子 $\{42, 142\}$进行评估。Thr. 表示用于统计显著性检验的数据驱动阈值（ϵ_{intra}）。性能指标显示的改进幅度（$T_1 - T_0$）以百分点表示：正值表示提升，负值表示下降。平均绝对中介贡献（MAMC）用于量化各量子中介变量的因果影响，其中 γ_A 在各种配置中表现出最强的中介效应。平均直接效应：3.82%；平均间接效应：-0.40%。70% 的配置显示出显著的总效应（$|\Delta Y| > 1\%$）。87% 的情况下满足假设 A1（序贯可忽略性）。假设 A2（无处理-中介交互作用）：完全满足（26 种）、部分满足（2 种）、不满足（2 种）。

Arch	层		种子阈值		性能 (%)			MAMC (%)				效应 (%)			假设	
	T0	T1			ACC	F1	曲线下面积	S_A	γ_A	L_A	I（A: B）	直接效应	间接效应	总效应	A1	A2
deep	1	3	42	10.6	+22.6	+18.9	+33.7	0.33	-	-	-	19.61	0.33	19.93	✓	✓
	1	3	142	9.4	+9.4	+9.1	+18.5	1.08	-	-	-	15.05	-1.08	13.98	✓	✓
	1	6	42	10.0	+21.7	+18.2	+34.6	0.57	-	-	2.28	17.48	2.85	20.34	×	×
	1	6	42	10.0	+21.7	+18.2	+34.6	0.56	0.21	0.98	2.25	16.34	4.00	20.34	×	×
	1	6	142	9.1	+7.5	+7.2	+20.4	0.17	-	-	0.67	15.18	-0.84	14.34	×	✓
	1	6	142	9.1	+7.5	+7.2	+20.4	0.18	0.72	1.07	0.70	15.56	-1.22	14.34	×	✓
full	1	3	42	9.1	+6.6	+6.0	+9.6	3.83	-	-	-	10.97	-3.83	7.14	×	✓
	1	3	142	8.3	+8.5	+7.4	+11.3	3.16	-	-	-	10.35	-3.16	7.19	×	∼
	1	6	42	10.4	+15.1	+12.3	+16.3	0.74	-	-	2.94	16.54	-3.68	12.86	×	×
	1	6	42	10.4	+15.1	+12.3	+16.3	0.64	0.02	5.58	2.58	10.52	2.34	12.86	×	×
	1	6	142	11.5	+12.3	+11.1	+12.6	0.27	-	-	1.09	12.02	-1.36	10.66	×	×
	1	6	142	11.5	+12.3	+11.1	+12.6	0.36	0.72	3.47	1.44	9.71	0.95	10.66	×	×
线性	1	3	42	9.3	+7.5	+6.8	+8.6	0.67	-	-	-	7.65	-0.67	6.98	✓	✓
	1	3	142	7.8	+2.8	+3.4	+2.4	1.10	-	-	-	5.08	-1.10	3.98	×	✓
	1	6	42	9.4	+13.2	+10.8	+16.1	0.43	-	-	1.74	13.39	-2.17	11.21	×	✓
	1	6	42	9.4	+13.2	+10.8	+16.1	0.44	2.29	0.82	1.75	14.87	-3.66	11.21	×	∼
	1	6	142	11.2	+8.5	+8.0	+10.5	0.82	-	-	3.28	13.18	-4.10	9.09	×	✓
	1	6	142	11.2	+8.5	+8.0	+10.5	0.90	1.61	1.08	3.59	14.11	-5.02	9.09	×	∼
成对	1	3	42	1.6	+2.8	+2.6	+1.7	0.00	-	-	-	0.54	0.00	0.54	✓	✓
	1	3	142	1.5	+1.9	+1.2	+0.3	0.00	-	-	-	-0.52	-0.00	-0.52	✓	✓
	1	6	42	1.5	+2.8	+2.6	+1.7	0.00	-	-	0.00	0.61	0.00	0.61	×	×
	1	6	42	1.5	+2.8	+2.6	+1.7	0.00	3.33	5.30	0.00	2.57	-1.96	0.61	×	✓
	1	6	142	1.8	+0.9	+0.6	+0.4	0.00	-	-	0.00	-0.72	-0.00	-0.72	✓	∼
	1	6	142	1.8	+0.9	+0.6	+0.4	0.00	1.41	3.09	0.00	0.96	-1.68	-0.72	×	✓
ring	1	3	42	8.3	+10.4	+8.9	+9.0	0.07	-	-	-	14.32	-0.07	14.25	×	∼
	1	3	142	8.0	+18.9	+14.7	+22.1	1.36	-	-	-	12.83	-1.36	11.48	×	✓
	1	6	42	9.4	+5.7	+5.4	+6.3	0.32	-	-	1.26	15.13	-1.58	13.55	×	×
	1	6	42	9.4	+5.7	+5.4	+6.3	0.38	0.11	0.22	1.54	15.36	-1.81	13.55	×	×
	1	6	142	7.7	+14.2	+10.8	+21.1	0.34	-	-	1.36	14.39	-1.69	12.70	×	×
	1	6	142	7.7	+14.2	+10.8	+21.1	0.36	0.02	0.03	1.43	14.48	-1.78	12.70	×	×

表I V.**电离层数据集的综合实验结果**。 针对 5 种量子电路架构（深层、全连接、线性、成对、环形）的 30 种配置进行结果评估，每种配置均使用 $T_0 = 1$ 基线层和 $T_1 \in \{3, 6\}$ 增强层，并采用随机种子 $\{42,\ 142\}$。阈值表示用于统计显著性检验的数据驱动阈值（ϵ_{intra}）。性能指标以百分点显示改进幅度（$T_1 - T_0$）：正值表示提升，负值表示下降。平均绝对中介贡献（MAMC）量化了各量子中介变量的因果影响，其中 I（A: B）在各配置中表现出最强中介效应。平均直接效应：10.92%，平均间接效应：-1.11%。80% 的配置显示出显著的总效应（$|\Delta Y| > 1$%）。20% 的案例满足假设 A1（序贯可忽略性）。假设 A2（无处理-中介交互作用）：完全满足（14），部分满足（5），不满足（11）。