arXiv:2611.32459v1 [quant-ph] 24 Nov 2026

# 基于机器学习的量子误差缓解用于束缚态模拟

Sumit Choudhary，[1] Tarunpreet Kaur，[2] Harjeet Kaur，[1] 和 Harpreet Singh[1]，*

[1] *Department of Physics, Guru Nanak Dev University, Amritsar 143005, India*

[2] *Khalsa College of Engineering and Technology, Amritsar 143001, India*

量子器件中的噪声仍是实现可靠量子模拟的主要挑战，因此量子误差缓解成为提高其准确性的重要工具。基于机器学习的量子误差缓解（ML-QEM）提供了一种有效方法，但其性能取决于训练数据集，并且可能产生不具备物理有效性的重构量子态。在本研究中，我们引入了一种机器学习量子误差缓解框架，该框架采用结合凸投影的残差学习，以确保重构密度矩阵满足物理有效性要求。我们使用 Haar 随机态和变分量子本征求解器（VQE）拟设态，研究了不同训练数据集和回归模型的影响。我们将所提方法与传统机器学习量子误差缓解、读出误差缓解和零噪声外推进行了比较。该方法在 IBM 量子硬件上进行了测试，用于分别模拟三量子比特和四量子比特的束缚 $\Lambda$氘核及 $\Lambda$-$\alpha$ 超核系统。对于三量子比特系统，在 VQE-拟设态上训练的岭回归得到的基态能量为 $-0.134$ 兆电子伏，接近 $-0.135$兆电子伏的理想值，态保真度为 0。999。对于四量子比特系统，核岭回归得到的基态能量为 $-3.014$ 和 $-3.045$ 兆电子伏，相应的态保真度分别为 0。995 和 0。998。这些结果表明，在本文所研究的量子模拟中，物理约束重构以及训练数据集和回归模型的选择能够提升机器学习量子误差缓解的性能。

Key词语：量子误差缓解、机器学习、密度矩阵重构、变分量子 n-tum 本征求解器

## I. 引言

量子计算有望解决经典计算机难以处理的计算复杂问题[1, 2]。然而，当前的量子计算机会受到退相干、不完善的量子门以及测量误差所产生的噪声影响，这些因素限制了在含噪中等规模量子（NISQ）设备上执行的计算的准确性 [3]。

量子纠错是用于重新可容错地进行计算，但这需要配备足够数量物理量子比特的容错量子硬件来编码单个逻辑量子比特，因此难以在当前量子器件上使用 [4, 5]。量子误差缓解（QEM）提供了另一种提高计算精度的方法，无需逻辑量子比特或容错操作 [6, 7]。它利用含噪量子线路的测量结果，估计出更接近理想无噪值的结果。

目前已有多种量子误差缓解方法，可减少量子计算中的噪声影响[7–11]。这些方法利用对含噪电路的重复执行结果进行测量，估算可观测量的无噪期望值。两种常用方法是零噪声外推（ZNE） [8] 和概率误差消除（PEC） [12]。然而，这些方法可能需要大量测量，而且在某些情况下还需要了解量子电路中的噪声信息。这会增加计算成本，使其难以应用于规模更大的问题 [13–17]。

基于机器学习的量子误差缓解（ML-QEM）已成为减少NISQ设备中误差的另一种方法 [18–24]。这些方法从训练数据中学习噪声的影响，无需预先了解噪声模型即可减少误差。然而，其性能主要取决于训练数据集和回归模型。此外，根据预测的泡利系数重构的密度矩阵可能无法表示有效的量子态。因此，这种传统机器学习量子误差缓解需要解决两个重要问题：针对给定量子模拟选择合适的训练态，以及重构密度矩阵的物理有效性。

训练态的选择会显著影响机器学习量子误差缓解的性能。Haar 随机态为在希尔伯特空间中生成训练样本数据集提供了一种通用方法。然而，它们可能无法代表与特定量子模拟相关的状态。另一种方法是使用目标计算中采用的同一变分电路拟设来生成训练态。在这项工作中，我们比较了两种训练策略：基于 Haar-

* 通讯作者：harpreet.phy@gndu.ac.in

随机态，以及使用目标模拟中采用的电路族生成的VQE-拟设态。

重构的密度矩阵必须满足厄米性、单位迹和半正定性，才能表示物理上有效的量子态。量子态层析术中已经发展出多种方法，用于重构满足这些条件的密度矩阵 [25–30]。最大似然估计 [31–35] 和基于半定规划的凸优化 [36–38] 通常用于此目的。在本文中，我们采用到有效密度矩阵集合的精确弗罗贝尼乌斯范数投影 [39]。该投影通过使用基于排序的过程，将特征值投影到概率单纯形上来实现 [40, 41]。我们将这一投影与机器学习量子误差缓解中的残差学习相结合，以确保重构的密度矩阵满足物理约束。

我们应用所提出的机器学习量子误差缓解框架，估计分别描述束缚Λ-氘核（$^3\mathrm{H}_\Lambda$）和 Λ-$\alpha$ （$^5\mathrm{He}_\Lambda$）超核系统的三量子比特和四量子比特映射后的哈密顿量的基态能量。首先，我们在 IBM Quantum处理器上使用量子-经典混合变分量子本征求解器算法进行计算。随后，我们引入所提出的机器学习量子误差缓解框架，并考察不同训练数据集、回归模型和物理约束对误差缓解性能的影响。我们采用两种基于 Haar随机态和变分量子本征求解器试探波函数态的训练策略，每种策略生成 2000 个训练态。含噪测量值由量子处理器获得，而理想期望值则使用状态矢量模拟器计算。重构的密度矩阵被投影到物理态集合上，以确保其满足所需的物理约束。我们将结果与使用传统机器学习量子误差缓解、零噪声外推和读出误差缓解（REM）获得的结果进行比较。基态能量和量子态保真度用于评估这些不同误差缓解方法的性能。

本文其余部分安排如下。第二节介绍三量子比特 Λ- 氘核和四量子比特 Λ-$\alpha$ 映射后的哈密顿量、它们在 IBM Quantum 平台上的实现，以及使用零噪声外推和 REM 获得的基线结果。第三节介绍所提出的机器学习-量子误差缓解框架，包括训练数据策略、回归模型和凸投影流程。第四节展示并讨论这两种超核系统的结果，包括基态能量、量子态保真度以及机器学习模型的性能。最后，第五节总结主要发现，并探讨未来可能的研究方向。更多数据和度量指标见附录。

## II. 超核体系基态能量的量子模拟

我们首先写出束缚超核体系的哈密顿量，即 Λ-氘核（$^3\mathrm{H}_\Lambda$）和 Λ-$\alpha$ （$^5\mathrm{He}_\Lambda$），并将其表示在谐振子（HO）基中:

$$H_N = \sum_{i,j=0}^{N-1} h_{ij} a_i^\dagger a_j, \tag{1}$$

其中， $h_{ij}$ 为哈密顿量矩阵元，定义为

$$\begin{aligned} h_{ij} &= \langle i|\hat{T}+\hat{U}|j\rangle \\ &= \int \phi_i^*(r)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\phi_j(r)\,dr. \end{aligned} \tag{2}$$

这里， $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 表示谐振子基态，其坐标空间波函数分别为 $\phi_i$（$r$）和 $\phi_j$（$r$）。矩阵元 $h_{ij}$ 使用球对称谐振子基计算，其径向波函数为:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\frac{2\,n!}{b^3\,\Gamma\big(n+l+\frac{3}{2}\big)}}\,x^l \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right] L_n^{l+1/2}\big(x^2\big) \tag{3}$$

其中， $x = \frac{r}{b}$， Γ()为伽马函数， $L_n()$为广义拉盖尔多项式 [42]。谐振子基由长度参数 $b = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ 表征，~~其中 $m$~~ 表示体系的约化质量， $\omega$ 为振子的频率。

式（2）的动能和势能矩阵元确定如下:

$$\begin{aligned} \langle n'l'|T|nl\rangle = \Big[&\big(2n+l+\tfrac{3}{2}\big)\,\delta_n^{n'} + \sqrt{n\big(n+l+\tfrac{1}{2}\big)}\,\delta_n^{n'+1} \\ &+ \sqrt{(n+1)\big(n+l+\tfrac{3}{2}\big)}\,\delta_n^{n'-1}\Big]\delta_l^{l'}\,\frac{\hbar\omega}{2}, \end{aligned}$$

$$\langle n'l'|U_{\Lambda d}|nl\rangle = \delta_l^{l'} \int R_{n'l'}(r)\,U_{\Lambda d}(r)\,r^2\,R_{nl}(r)\,dr. \tag{4}$$

为了在量子计算机上模拟所考虑超核的基态能量，我们需要将方程（1）中的哈密顿量的费米子算符映射为量子比特算符。文献中已提出多种费米子到量子比特映射 [43–48]。本文采用 Jordan-Wigner（JW）变换 [48, 49], ，该变换

将方程（1）中的费米子产生算符和湮灭算符映射到量子比特上，如下所示:

$$a_n^\dagger \to \frac{1}{2}\left(\prod_{j=0}^{n-1}\sigma_z^j\right)(\sigma_x^n - i\,\sigma_y^n),$$
$$a_n \to \frac{1}{2}\left(\prod_{j=0}^{n-1}\sigma_z^j\right)(\sigma_x^n + i\,\sigma_y^n). \tag{5}$$

这里， $\sigma_x^n$、 $\sigma_y^n$和 $\sigma_z^n$分别表示作用于第$n$个量子比特上的泡利-$X$、泡利-$Y$和泡利-$Z$ 算符。

### A. Λ-氚核系统的三量子比特映射哈密顿量

为模拟束缚态 Λ-氚核（$^3\mathrm{H}_\Lambda$）系统，我们将氚核视为惰性核心，并采用 Bertulani [50],提出的伍兹-萨克森势描述其与 Λ超子的相互作用

$$U_{\Lambda d}(r) = \frac{-U_0}{1+\exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}, \tag{6}$$

其中， $U_0$、 $R$和 $a$ 分别表示势深、半径和弥散度。在全文中，我们取 $U_0 = 17.16$兆电子伏、 $R = 2.5$ 飞米和 $a = 0.65$ 飞米。 Λ-氚核系统的实验结合能为 $B_{\Lambda d} = -0.13 \pm 0.05$ 兆电子伏，见文献 [51]。对于长度参数$b$，我们参照文献 [50]采用 $R_{\Lambda d} \approx 10$ 飞米来确定谐振子频率。

对式 (1) 应用 Jordan-Wigner 变换，并结合上述势，可得 Λ-氚核系统的以下三量子比特哈密顿量:

$$\begin{aligned} H_3 = {} & 1.222I - 0.043\sigma_z^0 - 0.046\left(\sigma_x^0\sigma_x^1 + \sigma_y^0\sigma_y^1\right) \\ & - 0.391\sigma_z^1 - 0.308\left(\sigma_x^0\sigma_z^1\sigma_x^2 + \sigma_y^0\sigma_z^1\sigma_y^2\right) \\ & - 0.787\sigma_z^2 + 0.118\left(\sigma_x^1\sigma_x^2 + \sigma_y^1\sigma_y^2\right). \end{aligned} \tag{7}$$

对式 (7) 进行精确对角化，得到基态能量为 $-0.135$ 兆电子伏，可作为后续研究的参考值。

### B. $\Lambda-\alpha$ 系统的四量子比特映射哈密顿量

束缚态 Λ-$\alpha$ （$^5\mathrm{He}_\Lambda$）系统之间的相互作用通过两种唯象高斯势来描述，即 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 模型 [52, 53],

$$U_{\Lambda\alpha}(r) = \sum_i U_i \exp\left[-\left(\frac{r}{a_i}\right)^2\right], \tag{8}$$

| 参数 | Gibson I | Bassichis-Gal $c$ |
|---|---|---|
| $U_1$ | $-44.82$ | $-52.78$ |
| $U_2$ | — | 9.99 |
| $a_1$ | 1.576 | 1.564 |
| $a_2$ | — | 1.316 |
| $R_{\Lambda\alpha}$ | 2.78 | 2.79 |

表 I: $\Lambda-\alpha$系统的 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 相互作用模型的势参数。势强度以兆电子伏为单位，程参数以飞米为单位。

其中， $U_i$ 和 $a_i$ 分别表示势强度和程参数。 Gibson I 相互作用由单一吸引型高斯势表示，而 Bassichis-Gal $c$ 相互作用则由双程高斯势构成，其中包含一个长程吸引分量和一个短程排斥核。 Λ-$\alpha$ 系统的实验结合能为 $B_{\Lambda\alpha} = -3.10 \pm 0.02$ 兆电子伏，相关数据见参考文献 [51]。所采用的参数汇总于表 I。

对公式 (1) 应用 Jordan-Wigner 变换，可分别得到对应于 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$相互作用的四量子比特哈密顿量

$$\begin{aligned} H_4^G = {} & 27.915I + 0.879\sigma_z^0 - 4.549\sigma_z^1 - 9.679\sigma_z^2 \\ & - 0.733(\sigma_x^0\sigma_x^1 + \sigma_y^0\sigma_y^1) + 2.193(\sigma_x^1\sigma_x^2 + \sigma_y^1\sigma_y^2) \\ & - 2.612(\sigma_x^0\sigma_z^1\sigma_x^2 + \sigma_y^0\sigma_z^1\sigma_y^2) - 14.566\sigma_z^3 \\ & - 1.890(\sigma_x^0\sigma_z^1\sigma_z^2\sigma_x^3 + \sigma_y^0\sigma_z^1\sigma_z^2\sigma_y^3) \\ & - 2.304(\sigma_x^1\sigma_z^2\sigma_x^3 + \sigma_y^1\sigma_z^2\sigma_y^3) \\ & + 4.891(\sigma_x^2\sigma_x^3 + \sigma_y^2\sigma_y^3), \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} H_4^B = {} & 27.992I + 0.908\sigma_z^0 - 4.576\sigma_z^1 - 9.719\sigma_z^2 \\ & - 0.720(\sigma_x^0\sigma_x^1 + \sigma_y^0\sigma_y^1) + 2.233(\sigma_x^1\sigma_x^2 + \sigma_y^1\sigma_y^2) \\ & - 2.569(\sigma_x^0\sigma_z^1\sigma_x^2 + \sigma_y^0\sigma_z^1\sigma_y^2) - 14.605\sigma_z^3 \\ & - 1.831(\sigma_x^0\sigma_z^1\sigma_z^2\sigma_x^3 + \sigma_y^0\sigma_z^1\sigma_z^2\sigma_y^3) \\ & - 2.255(\sigma_x^1\sigma_z^2\sigma_x^3 + \sigma_y^1\sigma_z^2\sigma_y^3) \\ & + 4.933(\sigma_x^2\sigma_x^3 + \sigma_y^2\sigma_y^3). \end{aligned} \tag{10}$$

对式 (9) 和式 (10) 进行精确对角化后，Gibson I 和 Bassichis-Gal$c$ 相互作用的基态能量分别为 $-3.118$ 兆电子伏和 $-3.115$兆电子伏。

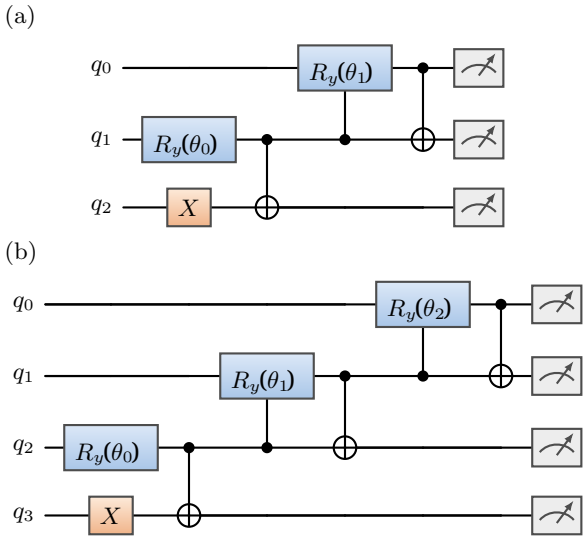


图1：(a) 三量子比特 Λ-氘核和 (b) 四量子比特 Λ-$\alpha$系统的变分量子电路。这些量子线路使用 $X$ 门制备试探态，随后进行参数化的 $R_y$ 旋转和CNOT纠缠操作。

### C. 实验执行与基线误差缓解

将超核哈密顿量映射为量子比特算符后，使用变分量子本征求解器（VQE） [54–56]，估算基态能量。VQE 是一种广泛使用的量子—经典混合算法。在变分框架中，通过最小化哈密顿量算符 $H$ 的期望值，对参数化试探态 $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 进行优化。

$$E(\theta) = \langle\psi(\theta)|\hat{H}|\psi(\theta)\rangle. \tag{11}$$

三量子比特和四量子比特哈密顿量的变分ans¨atz遵循参考文献 [57]提出的量子线路结构，如图1所示。

由于硬件优化需要多次评估量子线路，通过VQE直接进行基于云端的执行非常具有挑战性。因此，首先使用经典变分量子本征求解器模拟确定最优变分参数 $\theta_i^{\rm opt}$ ，随后在IBM Quantum处理器，即$ibm\ kingston$上实施。三量子比特和四量子比特哈密顿量的优化参数分别列于表II和表III中。

束缚系统的基态能量使用 IBM 的 Qiskit 软件栈计算。[58]，Qiskit 是一个用于量子计算的开源、基于 Python 的框架。Qiskit 提供多种计算后端，从理想的

| 势 | 参数（$\theta_i$） | $\theta_i^{\rm opt}$ [度] |
|---|---|---|
| 伍兹-萨克森 | $\theta_0$ | 140.49 |
| | $\theta_1$ | 179.06 |

表II：三量子比特Λ-氘核系统的经典优化变分参数 $\theta_i^{\rm opt}$ （单位：度）。

| 势 | 参数（$\theta_i$） | $\theta_i^{\rm opt}$ （度） |
|---|---|---|
| Gibson I | $\theta_0$ | 171.85 |
| | $\theta_1$ | 159.10 |
| | $\theta_2$ | 170.73 |
| Bassichis-Gal $c$ | $\theta_0$ | 172.38 |
| | $\theta_1$ | 159.30 |
| | $\theta_2$ | 171.35 |

表III：Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 势的四量子比特 Λ-$\alpha$ 系统的经典优化变分参数（单位：度）。

模拟器（如状态矢量模拟器）到真实的超导量子处理器，包括 $ibmkingston$。首先使用状态矢量模拟器进行计算，所得能量分别列于表 IV 和表 V，涵盖三量子比特和四量子比特哈密顿量。状态矢量模拟器得到的能量与对映射后的哈密顿量进行精确对角化所得的能量本征值完全一致，证实了哈密顿量构造和变分电路实现的有效性。

随后，在 156 量子比特的$ibm\ kingston$ 处理器上执行变分电路，该处理器以小端格式返回测量结果（位串最右侧的位对应量子比特 0）。为确保正确计算期望值，每个泡利字符串的量子比特排序均按照这一约定进行。使用 Qiskit Runtime EstimatorV2 原语，在 10,000 次测量下计算期望值；该原语会对易泡利项分组，并在内部应用所需的测量基旋转。尽管上述哈密顿量和变分电路为模拟这些超核系统提供了框架，但当前量子硬件中的噪声可能会降低测得能量的准确性。

作为基线误差缓解技术，采用了读出误差缓解（REM）和零噪声外推（ZNE）。通过 EstimatorV2 原语的误差缓解级别 1 启用 REM。ZNE 通过在噪声参数

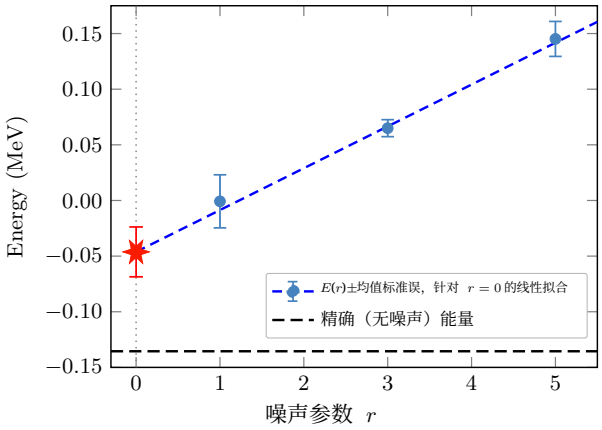


图 2：Λ氘核系统结合能（兆电子伏）的线性拟合，结合能随噪声参数 $r$变化。拟合直线上的红色星号表示基态能量的无噪声外推估计值，误差棒表示拟合不确定性，详见表 IV。黑色虚线表示精确（无噪声）能量−0.135 兆电子伏。

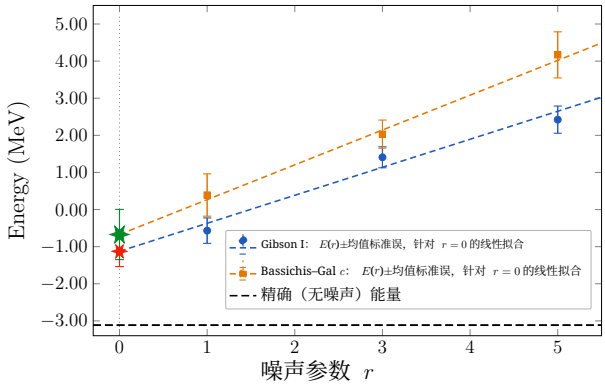


图3：Λ-$\alpha$ 系统的结合能（兆电子伏）随噪声参数 $r$ 变化的线性拟合。拟合直线上的红色和绿色星号分别表示 Gibson I 和 Bassichis-Gal$c$ 势的基态能量无噪声外推估计值，汇总见表 V。黑色虚线表示两种势对应的精确无噪声能量 $\approx -3.11$ 兆电子伏。

| 势 | 理想 | Raw | REM | 零噪声外推 +REM |
|---|---|---|---|---|
| 伍兹-萨克森 | −0.135 | 0.618 | −0.001 ±0.024 | −0.046 ±0.022 |

表 IV：通过态矢量模拟、IBM 原始结果、REM 校正以及结合 REM 技术的零噪声外推获得的三量子比特哈密顿量基态能量（单位：兆电子伏）。

| 势 | 理想 | Raw | REM | 零噪声外推 +REM |
|---|---|---|---|---|
| Gibson I | −3.118 | 6.851 | −0.568 ±0.343 | −1.125 ±0.412 |
| Bassichis-Gal $c$ | −3.115 | 6.569 | 0.391 ±0.570 | −0.672 ±0.676 |

表 V：使用 Gibson I 和 Bassichis-Gal$c$ 核势，通过四量子比特系统的态矢量模拟、含噪 IBM 量子硬件、REM 校正以及结合 REM 的零噪声外推得到的基态能量（单位：兆电子伏）。

$r = 1$，3、5，... [9, 11] 下重复执行整个幺正算子，然后将相应哈密顿量的期望值外推至无噪声极限来实现。对于每个 $r$，在启用 REM 的情况下收集了五次独立的硬件运行结果。

三量子比特和四量子比特量子线路的物理量子比特布局只选择一次，并在整个噪声缩放过程中保持固定，从而使硬件噪声的变化不会影响外推过程。因此，所有量子线路都在此固定布局下以优化级别 0 进行转译，这可以防止编译器抵消为噪声缩放而插入的 $U^\dagger U$ 对。针对每个 $r$，计算平均能量及其均值标准误（SEM），并使用逆方差权重（$1/\mathrm{SEM}^2$）进行加权最小二乘线性拟合，将能量外推至 $r = 0$。外推能量的不确定度根据拟合的协方差矩阵估算。如图 2 和图3所示，IBM 输出随噪声参数 $r$ 的变化可用直线很好地近似；三量子比特和四量子比特系统中这些直线在 $r = 0$ 处的截距分别列于表 IV 和表 V 中。

尽管 REM 和零噪声外推能够减轻硬件噪声的影响，但结果与理论基态能量之间仍存在明显差异。这些残余误差促使我们采用下一节介绍的基于机器学习的误差缓解方法。

## III. 基于机器学习的量子误差缓解框架

传统和所提出的基于机器学习的量子误差缓解（ML-QEM）框架的整体工作流程如图4所示。该流程包括三个主要步骤。首先，我们使用 Haar 随机

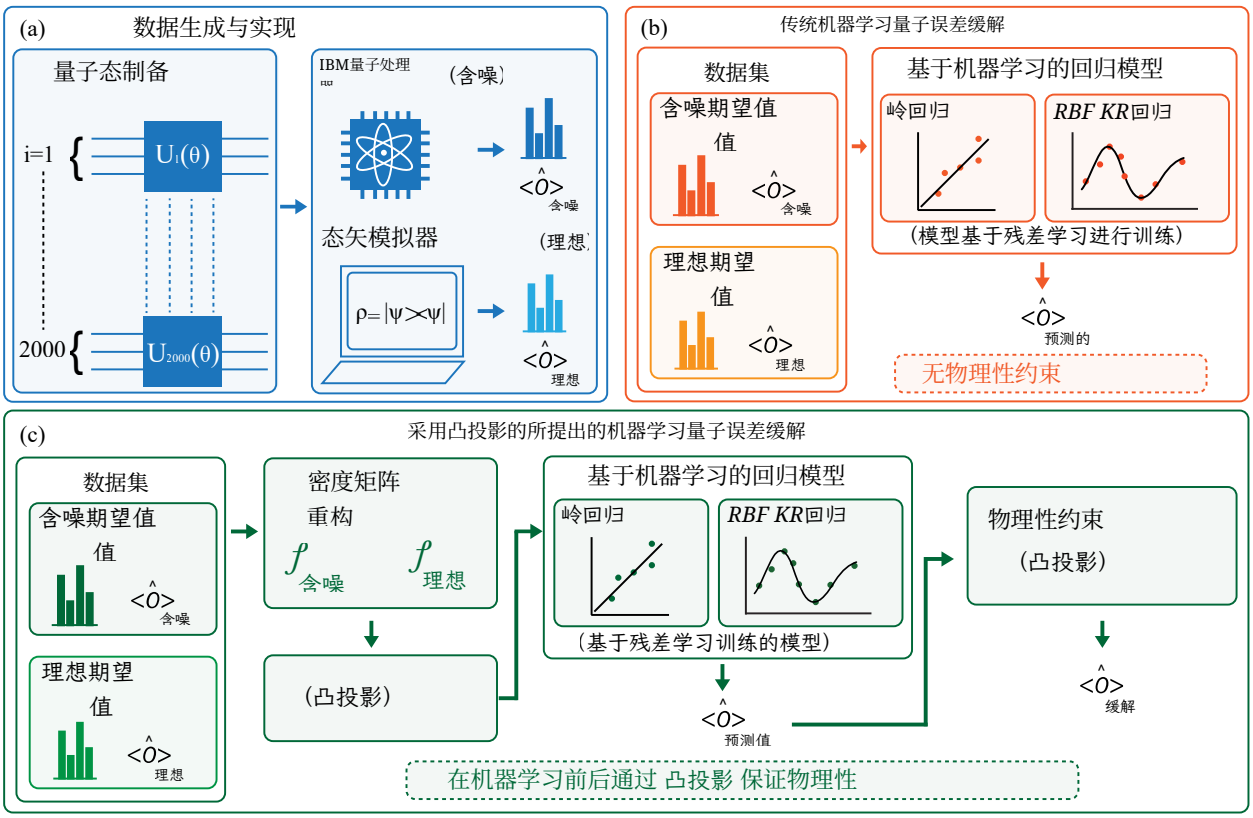


图4：传统机器学习量子误差缓解框架与所提出的机器学习量子误差缓解框架的工作流程。（**a**）将包含2000个三量子比特量子态（Haar 随机态和VQE-拟设态）的数据集分别在IBM Quantum处理器和理想态矢模拟器上运行，以获得含噪泡利期望值和理想泡利期望值。（**b**）在传统机器学习量子误差缓解中，使用含噪数据训练回归模型以预测校正值，然后将其加到含噪值上，从而得到缓解值。（**c**）在所提出的机器学习量子误差缓解框架中，首先将含噪数据和理想数据转换为密度矩阵，并检查其物理有效性。对于任何无效量子态，都使用凸投影将其替换为最近的有效量子态，然后使用校正后的数据训练模型。再次以相同方式检查并校正模型预测结果，从而得到最终的缓解值。四量子比特情形也遵循相同的步骤。

态和变分量子本征求解器（VQE）试探波函数态生成训练数据集。含噪泡利期望值由 IBM Quantum处理器获得，而相应的理想值则使用态矢模拟器计算，如图4(a)所示。接下来，在传统机器学习量子误差缓解方法中，使用含噪期望值和理想期望值训练回归模型，以预测测量误差，如图4(b)所示。最后，在所提方法中，对机器学习前后重构的密度矩阵应用凸投影，以确保量子态满足物理约束，如图4(c)所示。以下各小节将介绍训练数据的生成、回归模型、凸投影方法和评估指标。

### A. 训练数据与实现

在生成数据集时，我们考虑了两类训练态。第一组数据集包含 Haar 随机量子态，第二组则包含使用本工作所采用的变分电路生成的 VQE-拟设态。每组数据集分别包含 2000 个量子态。

Haar 随机量子态是通过 Qiskit [59] 的随机状态向量函数从 Haar测度中采样得到的纯态。这些量子态均匀分布于整个希尔伯特空间，因此构成了一个不受任何特定电路类别限制的通用训练数据集。在量子处理器上，每个量子态均使用 Qiskit 的 initialize 例程进行制备，该例程会生成相对较深的态制备量子线路 [60]。

VQE-拟设态的生成方式是 g the

我们为每个哈密顿量使用的变分电路。这些态属于一个小型态族，其中包括变分基态。该试探波函数覆盖了具有实数振幅的三维单激发子空间。对于每个态，我们从$[0, 2\pi)$中独立且均匀地抽取每个角度。均匀采样这些角度并不等同于Haar采样，因此态族中的某些区域比其他区域采样得更频繁。参数和态向量只生成并保存了一次，因此后续所有步骤都使用相同的态。

对于每个状态，我们都计算了所有 $4^n$ 个泡利字符串的期望值，其中 $n$ 是量子比特数，因此 $n = 3$ 有 64 个字符串， $n = 4$ 有 256 个字符串。理想泡利期望值由态矢量模拟器精确计算，而含噪期望值则在 IBM Quantum处理器$ibm\ kingston$上使用 Qiskit Runtime EstimatorV2 原语测量，每条量子线路执行 1024 次测量。我们采用 IBM 默认的读出误差缓解（TREX，弹性等级1），未应用任何其他误差缓解技术。量子线路由 Qiskit预设通道管理器以优化级别 1 进行转译，可观测量则映射到转译器选定的物理量子比特上。

最后，我们在描述 $\Lambda$-氘核和 $\Lambda$-$\alpha$ 系统的三量子比特和四量子比特映射哈密顿量上测试所提出的机器学习量子误差缓解框架。这些目标态不属于任何训练数据集，并在$ibm\ kingston$ 上使用上述相同设置执行了一次。

### B. 残差预测与学习模型

每个量子态都由其非恒等泡利算符期望值组成的向量表示。令$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 表示在 IBM处理器上测得的含噪泡利期望值，令$\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ 表示相应的理想值，其中 $d = 4^n - 1$。我们不直接预测$\mathbf{y}$ ，而是训练一个回归器 $f$ 来预测残差。我们将残差$\mathbf{r}$ 定义为理想期望值与含噪期望值之差。

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{x}. \tag{12}$$

对于给定的含噪输入$\mathbf{x}$，回归器将残差预测为$\mathbf{r}_{\text{predicted}} = f(\mathbf{x}) \approx \mathbf{r}$。随后，缓解后的期望值可表示为

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{x} + \mathbf{r}_{\text{predicted}}. \tag{13}$$

本研究采用两种回归模型：岭回归和基于径向基函数的核岭回归（RBF-KRR）[61–63]。岭回归是一种线性回归模型，用于映射线性关系，其正则化强度参数设为 $L_2$ $\alpha = 1$。相比之下，采用高斯核的 RBF-KRR 能够捕捉含噪期望值与理想期望值之间的非线性关系。RBF-KRR 使用相同的正则化强度 $L_2$ ，设为 $\alpha_{\mathrm{K}} = 0.1$；而核宽度 $\gamma$ 设为输入向量两两之间平方距离中位数的倒数。

每个数据集包含 2000 个态，分为 200 个验证态、200 个测试态和包含 1600 个态的训练池。在我们的数据集中，全部 2000 个理想态均不相同。为研究训练数据规模的影响，我们使用训练池中的 $N \in \{50, 100, 200, 400, 800, 1600\}$ 个态训练模型，并针对 10 个不同的随机种子重复该过程。同一个训练好的模型将应用于留出测试态和最终目标态；后者从未用于训练。所有超参数均预先固定，并在不同训练规模和随机种子下保持一致。

使用三项指标评估模型在测试态上的预测性能，这些指标根据预测的泡利期望值与理想泡利期望值之间的差异计算得出：平均绝对误差（MAE）、均方根误差（RMSE）和决定系数（$R^2$） [64, 65]。其定义如下：

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} |y_i - \hat{y}_i|, \tag{14}$$

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2}, \tag{15}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{M} (y_i - \bar{y})^2}. \tag{16}$$

其中， $M$ 是所有测试态的泡利期望值总数， $y_i$ 和 $\hat{y}_i$ 分别是第 $i$个泡利期望值的理想值和预测值，而 $\bar{y}$ 是理想值的均值。作为参考，还报告了根据含噪值计算的相同指标。

### C. 向物理态进行凸投影

如前一小节 IIIB 所述，每个量子态都由一个非恒等泡利期望值向量表示。这些期望值可用于重构相应的密度矩阵。任意 $n$量子比特量子态都可以用其泡利期望值表示为

$$\rho = \frac{1}{2^n} \sum_{i=1}^{4^n} c_i P_i, \tag{17}$$

其中， $c_i$ =Tr($\rho P_i$) 是泡利算符 $P_i$ 的期望值。有效的量子态必须是厄米的、具有单位迹且为半正定。式（17）中的算符是厄米的，并且具有单位迹，因为系数 $c_i$ 均为实数，且恒等泡利算符的期望值为 1。然而，由于实验噪声、有限的测量统计数据以及重构误差 [33]，它通常不满足半正定性。

在我们的实验中，含噪的泡利期望值向量是通过量子态层析（QST） [58]重构的。对于 $n = 3$ 和 $n = 4$，全部 2000 个重构的含噪向量都至少有一个负特征值。这表明，重构得到的算符并不代表物理上有效的量子态。

为获得物理上有效的量子态，我们通过最小化平方弗罗贝尼乌斯距离，将每个重构算符投影到物理密度矩阵集合上。我们将有效的 $n$量子比特密度矩阵集合记为 $\mathcal{D}_n$，其定义如下：

$$\mathcal{D}_n = \left\{ \sigma \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n} \;\middle|\; \begin{array}{c} \sigma = \sigma^\dagger, \\ \mathrm{Tr}(\sigma) = 1, \\ \sigma \succeq 0 \end{array} \right\}. \tag{18}$$

与重构算符 $\rho$ 距离最近的物理态可通过求解以下问题得到：

$$\rho_{\mathrm{phys}} = \arg\min_{\sigma \in \mathcal{D}_n} \|\sigma - \rho\|_F^2 , \tag{19}$$

其中， $\sigma$ 是优化变量， $\|\cdot\|_F$ 表示弗罗贝尼乌斯范数。由于 $\mathcal{D}_n$ 是闭凸集，该优化问题的解是唯一的 [39, 40]。

进行投影时，我们首先对重构算符 $\rho$进行对角化。投影过程中，特征向量保持不变，而特征值则替换为与其最接近、非负且总和为一的值。因此，投影后的密度矩阵满足所有物理性条件。该投影还会保持原本有效的物理态不变，并且不会增大重构算符与任何物理上有效的密度矩阵之间的弗罗贝尼乌斯距离。

我们在两个阶段应用凸投影，以研究其对机器学习量子误差缓解性能的影响。首先，在训练机器学习模型之前，将实验重构得到的含噪输入向量投影到有效量子态集合上。其次，利用机器学习模型预测的校正后泡利期望值重构密度矩阵，再将其投影到同一物理态空间。这样，凸投影便作为预处理和后处理步骤应用，而机器学习回归器本身的训练不受任何显式物理性约束。

### D. 评估指标

为评估所提出框架的有效性，我们采用两个量来考察 Λ-氘核和Λ-$\alpha$ 目标系统：基态能量和态保真度。哈密顿量用泡利字符串表示为 $H = \sum_i h_i P_i$，其中 $P_i$ 为泡利算符， $h_i$ 为实系数。对于一组泡利期望值 $c_i$，相应的能量计算如下：

$$E = \sum_i h_i c_i. \tag{20}$$

我们使用 Uhlmann-Jozsa保真度，将重构态与相应的理想目标态 [66, 67]进行比较。对于重构的密度矩阵 $\rho$和理想目标密度矩阵 $\sigma^*$，保真度定义为

$$F(\rho, \sigma^*) = \left( \mathrm{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho}\, \sigma^* \sqrt{\rho}} \right)^2 . \tag{21}$$

由于保真度衡量两个量子态的接近程度，并要求两个密度矩阵在物理上均有效，因此在计算保真度之前，我们会将未投影流程的输出投影到有效密度矩阵集合中。然而，能量是直接根据原始泡利期望值计算的，不进行物理态投影。这样得到的能量估计直接来自机器学习预测结果，不会因投影而产生任何额外校正。

## IV. 结果与讨论

我们评估所提出的基于机器学习的量子误差缓解（ML-QEM）框架在估计三量子比特 Λ-氘核和四量子比特 Λ-$\alpha$ 系统的基态能量与态保真度方面的性能。我们将结果与采用传统机器学习量子误差缓解所获得的结果进行比较，后者作为基线方法。我们使用两种经典机器学习模型来学习校正：岭回归和非线性径向基函数（RBF）核岭回归，并评估它们的预测能力。

### 1. 机器学习模型对三量子比特系统的预测性能

我们首先评估每个模型对留出测试态的理想泡利期望值的预测效果，这些测试态与训练

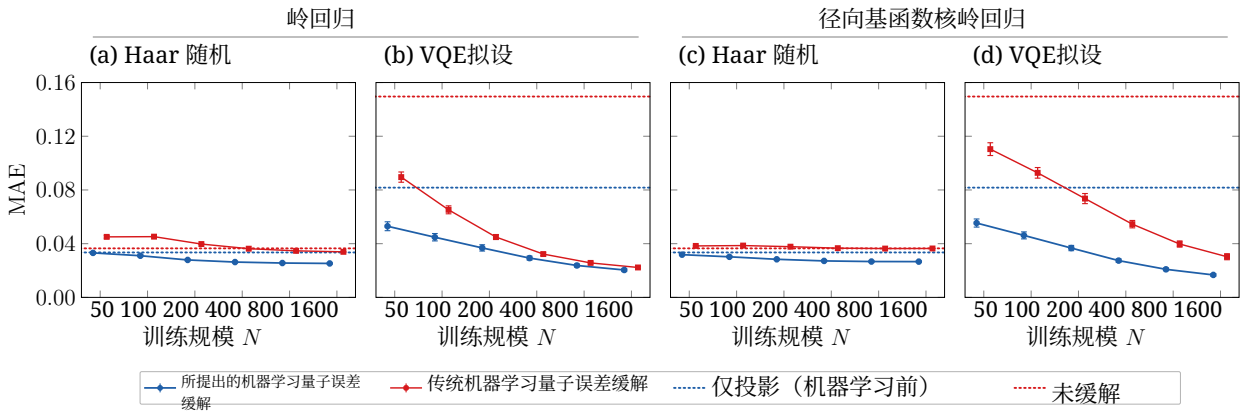


图 5：在不同训练集大小 $N$下，使用三量子比特Haar随机 [(a)、(c)] 和 VQE拟设 [(b)、(d)] 数据集训练的岭回归 [(a)、(b)] 以及径向基函数核岭回归[(c)、(d)] 模型的测试集平均绝对误差（平均绝对误差）。实线表示所提出的（蓝色）和传统的（红色）机器学习量子误差缓解方法（10 个独立随机种子上的均值 ± 标准差）；虚线表示机器学习前误差缓解基线方法。

数据来自同一分布。图 5 展示了根据公式 (14) 计算的平均绝对误差（MAE），该误差衡量了分别使用 Haar 随机数据集和 VQE-ansatz 数据集训练的岭回归模型与 RBF 核岭回归模型所预测的泡利期望值和理想泡利期望值之间的差异。图中还给出了根据含噪值计算的平均绝对误差（机器学习校正前），以供参考。根据公式 (15) 和 (16) 分别计算的均方根误差（RMSE）和决定系数（$R^2$）呈现出类似趋势，并得出相同结论。这些结果列于附录中。

*a. Haar* 随机。对于 Haar随机态，含噪测试态的平均绝对误差为 0.036，仅使用凸投影后降至 0.033。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，在 $N = 1600$时，岭回归的平均绝对误差进一步降至 0.025，径向基函数核岭回归的平均绝对误差降至 0.027。相较于含噪输入，这些数值分别降低了 30.7% 和 27.1%；相较于仅投影，则分别降低了 24.5% 和 20.6%。相比之下，传统的机器学习量子误差缓解几乎没有带来任何改善，或完全没有改善。

*b. VQE*拟设。原始留出测试态的平均绝对误差为 0.149，仅采用凸投影可将其降至 0.082。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，随着训练集大小增加，两种模型的平均绝对误差均有所下降 $N$ 。当 $N$ =1600 时，岭回归的平均绝对误差为 0.020，RBF 核岭回归为 0.017；相较于含噪输入，误差分别降低了 86.6% 和 88.6%，相较于仅投影，分别降低了 75.6% 和 79.3%。在较小的 $N$ 值下，岭回归略优于 RBF 核岭回归。与含噪输入相比，传统机器学习量子误差缓解也改善了两种模型的预测结果。然而，对于所有训练集大小，其误差仍高于所提出方法的误差。

总体而言，所提出的机器学习量子误差缓解框架在两种回归模型、两种训练数据策略以及所有考察的训练集大小下，表现均优于传统机器学习量子误差缓解变体。此外，使用 VQE 试探态训练的模型比使用 Haar 随机态训练的模型显著降低了误差。

## 2. 三量子比特基态能量与保真度分析

图6展示了采用传统和所提出的机器学习量子误差缓解方法得到的三量子比特映射 Λ氚核系统的基态能量和态保真度。未经缓解的硬件能量（纳入 REM）为 0.018 兆电子伏；理想值为 $-0.135$ 兆电子伏，态保真度为 0.902。仅投影便将能量估计改善至 $E_{\mathrm{proj}} = -0.030$ 兆电子伏。表 VI 报告了两种数据集在训练集大小为 $N$=1600 时目标态（Λ氚核系统）的基态能量估计和态保真度。所提出的机器学习量子误差缓解和传统机器学习量子误差缓解计算均在相同条件下独立重复运行 10 次。报告的结果为这些运行的均值 ± 标准差。

*a. Haar* 随机。在 Haar随机态上进行训练，对目标系统的改进较小。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，岭回归的预测能量从 $-0.018$ 兆电子伏（$N = 50$ 时）变为 $-0.045$ 兆电子伏（ $N = 1600$ 时），而径向基函数核岭回归的预测能量从

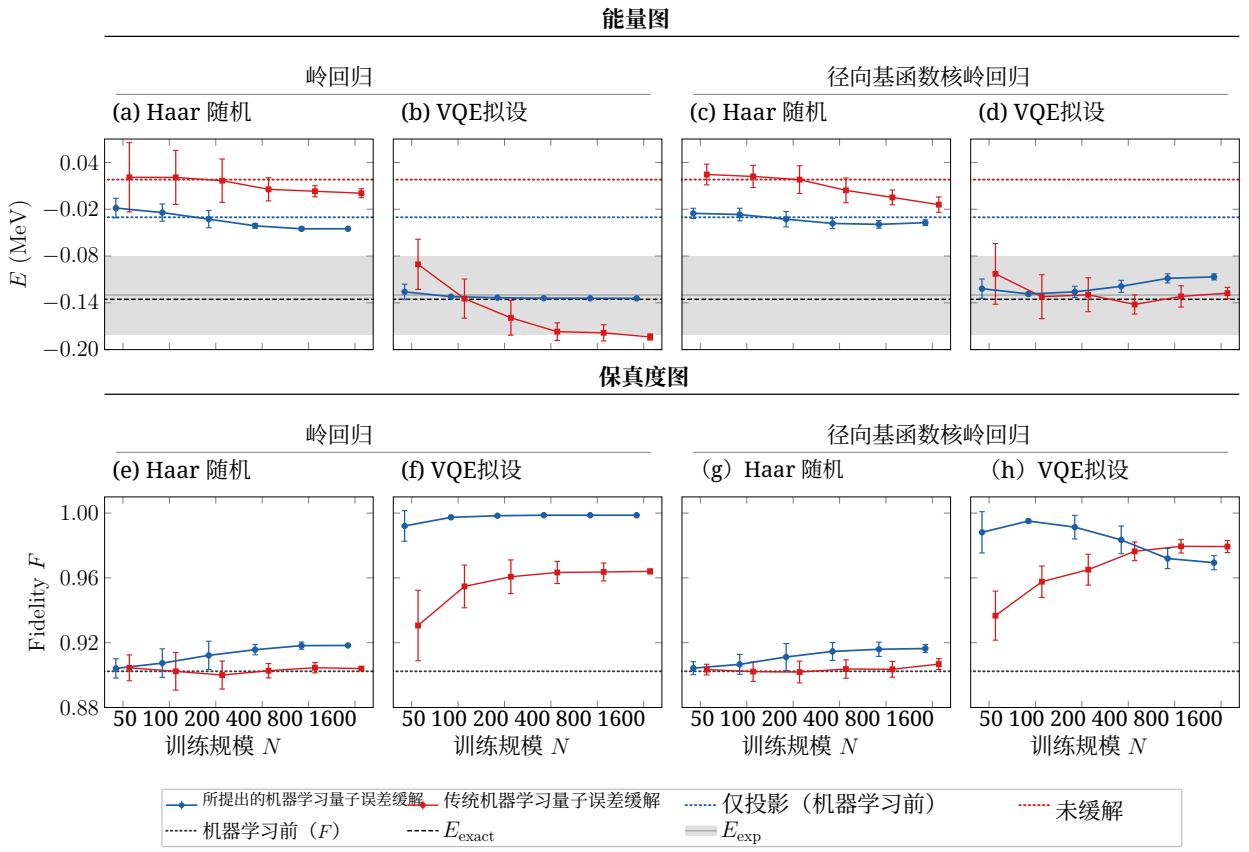


图6：三量子比特映射的 Λ-氘核系统在不同训练集大小 $N$ 下，采用传统（红色）和所提出的（蓝色）机器学习量子误差缓解方法得到的基态能量 [面板 (a)–(d)] 和态保真度 [面板 (e)–(h)] 。面板 (a)、(b)、(e)、(f) 展示岭回归的结果，面板 (c)、(d)、(g)、(h) 展示 RBF 核岭回归的结果；前者和后者分别使用 Haar 随机 [(a)、(c)、(e)、(g)] 和 VQE 拟设 [(b)、(d)、(f)、(h)] 数据集进行训练。误差棒表示 10 个独立随机种子下的标准差。点线表示机器学习误差缓解前的数值；虚线表示 $E_{\text{exact}}$；灰色带表示 $E_{\text{exp}}$。

| 势 | 模型 | 传统机器学习量子误差缓解 | | 所提出的机器学习量子误差缓解 | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Haar 随机 | VQE拟设 | Haar 随机 | VQE拟设 |
| | | *Ground-State Energy* | | | |
| 伍兹-萨克森 | 岭回归 | $0.000 \pm 0.006$ | $-0.184 \pm 0.004$ | $-0.045 \pm 0.001$ | $-0.134 \pm 0.000$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $-0.014 \pm 0.010$ | $-0.128 \pm 0.007$ | $-0.037 \pm 0.004$ | $-0.107 \pm 0.004$ |
| | | *State Fidelity* | | | |
| 伍兹-萨克森 | 岭回归 | $0.904 \pm 0.001$ | $0.964 \pm 0.001$ | $0.918 \pm 0.001$ | $0.999 \pm 0.000$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $0.907 \pm 0.003$ | $0.979 \pm 0.004$ | $0.916 \pm 0.002$ | $0.969 \pm 0.004$ |

表 VI：使用岭回归和径向基函数核岭回归（RBF-KRR）对 $N = 1600$ 处伍兹-萨克森势下的 Λ-氘核系统进行基态能量估计（单位：兆电子伏）和态保真度分析。结果以 10 次运行的均值 ± 标准差表示。

分别为 $-0.025$ 兆电子伏（ $N = 50$时）变为 $-0.037$ 兆电子伏（ $N = 1600$ 时）。在 $N = 1600$时，两种回归模型的态保真度分别仅为0。918和0。916，而校正前为0。902。

使用传统机器学习量子误差缓解时，两个模型给出的能量估计都不如硬件原始值。在 $N = 1600$ 处，岭回归和 RBF 核岭回归预测的能量分别为 0.001 兆电子伏和 $-0.014$ 兆电子伏。相应的保真度为

0.904 和 0.907。

*b. VQE*拟设。 对于所提出的机器学习量子误差缓解框架，岭回归的表现最佳。预测能量从 $-0.126$ 兆电子伏（ $N = 50$处）变为$-0.134$ 兆电子伏（ $N = 1600$处），接近 $E_{\text{ideal}}$。相应的态保真度从 0.992 上升至 0.999。对于所考虑的所有训练集大小，预测能量均未低于精确基态能量。相比之下，径向基函数核岭回归在 $N = 100$处给出了最接近的能量估计，为 $-0.129$兆电子伏，态保真度为 0.995。然而，随着训练集大小增加，其性能会下降。

对于传统机器学习量子误差缓解，随着训练集大小 $N$ 增加，岭回归预测的能量低于 $E_{\text{ideal}}$ 。能量从 $N = 50$ 处的 $-0.091$兆电子伏变为 $N = 1600$处的 $-0.184$ 兆电子伏，而态保真度则稳定在约 0.96。相比之下，径向基函数核岭回归给出的能量估计介于 $-0.103$和 $-0.142$ 兆电子伏之间，同时保真度从 0.937 提升至 0.979。

### A. 四量子比特系统中机器学习模型的预测性能

我们采用与三量子比特系统相同的流程和指标，考察机器学习模型在四量子比特系统中的预测性能。图 7 展示了在 Haar 随机数据集和 VQE 拟设数据集上训练的岭回归和 RBF 核岭回归模型的测试集平均绝对误差（平均绝对误差），该误差根据预测值与理想泡利期望值之间的差异计算。为便于参考，图中还报告了针对含噪值（机器学习前）评估的相同指标。均方根误差和决定系数（$R^2$）呈现出相似的趋势，详见附录。

*a. Haar* 随机。对于含噪测试态，平均绝对误差为 0.082；仅经过凸投影后，该值降至 0.079。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架时，平均绝对误差随训练集大小 $N$ 仅略有变化；当 $N = 1600$ 时，岭回归和 RBF 核岭回归的平均绝对误差均为 0.078。采用传统机器学习量子误差缓解时，所有训练集大小下的平均绝对误差都高于含噪输入的误差。当 $N = 1600$ 时，岭回归的平均绝对误差为 0.090，RBF 核岭回归则为 0.089。

*b. VQE*拟设。 含噪测试数据的平均绝对误差为 0。114，而仅投影可将其降至 0。050。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，随着训练集大小 $N$ 的增加，两个模型的表现均有所提升。在 $N = 1600$ 时，岭回归的平均绝对误差为 0。011，而径向基函数核岭回归的平均绝对误差为 0。014。相对于含噪输入，这些数值分别对应 90。3% 和 87。8% 的降幅；相对于仅投影，则分别对应 78% 和 72。0% 的降幅。采用传统机器学习量子误差缓解时，两个模型相较于含噪输入也均有所改善，但在每个 $N$ 下，其准确性仍不如所提出的方法。在 $N = 1600$ 时，岭回归的平均绝对误差为 0。013，径向基函数核岭回归的平均绝对误差为 0。036。

总体而言，对于两种回归模型、两个训练数据集以及所考虑的所有训练集大小，所提出的机器学习量子误差缓解框架均比传统机器学习量子误差缓解具有更低的预测误差。此外，在 VQE拟设态上训练的模型，其误差降低幅度显著大于在 Haar随机态上训练的模型。

### B. 四量子比特基态能量和保真度分析

图8展示了使用所提出的机器学习量子误差缓解框架，针对采用 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 势的四量子比特映射 $\Lambda$-$\alpha$ 系统所获得的基态能量和态保真度。与三量子比特系统相比，四量子比特系统具有更大的希尔伯特空间以及更多的泡利可观测量。对于 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$势，理想基态能量分别为 $E_{\text{ideal}} = -3.118$ 兆电子伏和$-3.115$ 兆电子伏。在机器学习缓解之前，含噪硬件能量（已纳入 REM）分别为$-1.183$ 兆电子伏和 $-0.565$ 兆电子伏。仅凸投影得到的能量估计为 $-1.274$兆电子伏和 0.060 兆电子伏，而含噪重构态对应的态保真度分别为 0.873 和 0.861。

*a. Haar* 随机。使用 Haar 随机态进行训练无法准确估计基态能量。对于两种势和两种回归模型，预测的能量仍远高于$E_{\text{ideal}}$。在 $N = 1600$ 时，所提出的机器学习量子误差缓解框架针对 Gibson I 势给出的结果分别为：岭回归为 $-0.495$ 兆电子伏，径向基函数核岭回归为$-0.584$ 兆电子伏。对于 Bassichis-Gal $c$ 势，相应的能量分别为 0.283 兆电子伏和 0.156 兆电子伏。所有这些数值都高于相应的未缓解能量。

对于传统机器学习量子误差缓解，相应的能量为 $N = 1600$ $-0.636$ 兆电子伏和 $-1.151$兆电子伏（Gibson I势），以及 $-0.346$ 兆电子伏和 $-1.032$ 兆电子伏（Bassichis-Gal$c$ 势），分别对应岭回归和径向基函数核岭回归。对于所提出的机器学习量子误差缓解和传统机器学习量子误差缓解，态保真度均表现出类似的有限改善，即使在训练集大小最大时，仍接近其初始值。

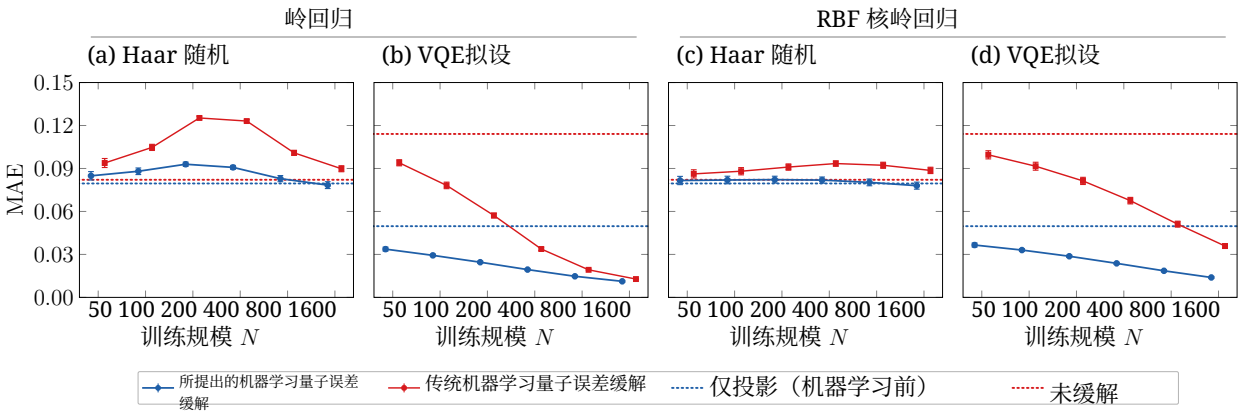


图 7：在不同训练集大小 $N$下，使用四量子比特 Haar 随机 [(a)、(c)] 和 VQE 拟设 [(b)、(d)] 数据集训练的岭回归 [(a)、(b)] 和径向基函数核岭回归[(c)、(d)] 模型的测试集平均绝对误差（MAE）。实线表示所提出的（蓝色）和传统的（红色）机器学习量子误差缓解方法（10 个独立随机种子的均值 ± 标准差）；虚线表示机器学习缓解前的基线方法。

| | | 传统机器学习量子误差缓解 | | 所提出的机器学习量子误差缓解 | |
|---|---|---|---|---|---|
| 势 | 模型 | Haar 随机 | VQE拟设 | Haar 随机 | VQE拟设 |
| | | *Ground-State Energy* | | | |
| Gibson I | 岭回归 | $-0.636 \pm 0.366$ | $-3.544 \pm 0.068$ | $-0.495 \pm 0.098$ | $-2.663 \pm 0.026$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $-1.151 \pm 0.398$ | $-3.822 \pm 0.102$ | $-0.584 \pm 0.105$ | $-3.014 \pm 0.058$ |
| Bassichis-Gal $c$ | 岭回归 | $-0.346 \pm 0.329$ | $-3.095 \pm 0.070$ | $0.283 \pm 0.113$ | $-2.502 \pm 0.111$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $-1.032 \pm 0.357$ | $-3.739 \pm 0.097$ | $0.156 \pm 0.079$ | $-3.045 \pm 0.004$ |
| | | *State Fidelity* | | | |
| Gibson I | 岭回归 | $0.865 \pm 0.005$ | $0.948 \pm 0.004$ | $0.874 \pm 0.004$ | $0.965 \pm 0.002$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $0.870 \pm 0.003$ | $0.978 \pm 0.004$ | $0.874 \pm 0.003$ | $0.995 \pm 0.004$ |
| Bassichis-Gal $c$ | 岭回归 | $0.842 \pm 0.004$ | $0.951 \pm 0.004$ | $0.867 \pm 0.004$ | $0.970 \pm 0.003$ |
| | 径向基函数核岭回归 | $0.858 \pm 0.003$ | $0.977 \pm 0.003$ | $0.870 \pm 0.002$ | $0.998 \pm 0.000$ |

表 VII： $\Lambda - \alpha$ 系统在 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 势下的基态能量估计值（单位：兆电子伏）及态保真度，采用岭回归和径向基函数核岭回归（RBF-KRR）进行计算。结果以 10 次运行的均值 ± 标准差表示。

*b. VQE*拟设。 采用所提出的机器学习量子误差缓解框架时，两个回归模型给出的能量估计都接近精确基态能量。在$N = 1600$时，径向基函数核岭回归对Gibson I势给出的结果为 $-3.014$兆电子伏，对Bassichis-Gal $c$ 势给出的结果为 $-3.045$兆电子伏。相比之下，岭回归分别得到 $-2.663$ 兆电子伏和 $-2.502$ 兆电子伏。随着 $N$ 的增加，态保真度不断提高；对于Gibson I势和 Bassichis-Gal $c$ 势，径向基函数核岭回归的态保真度分别达到0.995和0.998，而岭回归分别达到0.965和0.970。

相比之下，采用 RBF 核岭回归的传统机器学习量子误差缓解所得到的能量低于精确的基态值，对于 Gibson I 势和 Bassichis-Gal $c$势，分别达到 $-3.822$ 兆电子伏和$-3.739$ 兆电子伏。岭回归还给出了低于 Gibson I 势精确值的能量（$-3.544$ 兆电子伏）。然而，对于 Bassichis-Gal $c$ 势，其得到的结果为 $-3.095$ 兆电子伏，与采用所提岭回归方法得到的结果相比，更接近精确值。传统机器学习量子误差缓解得到的态保真度比所提方法的增长更慢。在 $N = 1600$ 时，对于 Gibson I 势和 Bassichis-Gal $c$ 势，传统方法的态保真度分别为：岭回归为 0.948 和 0.951，RBF 核岭回归为 0.978 和 0.977。这些数值仍低于所提出的机器学习量子误差缓解所得到的结果。

总体而言，这些结果表明，Haar 随机训练数据无法对目标基态进行有效校正，尤其是在.....

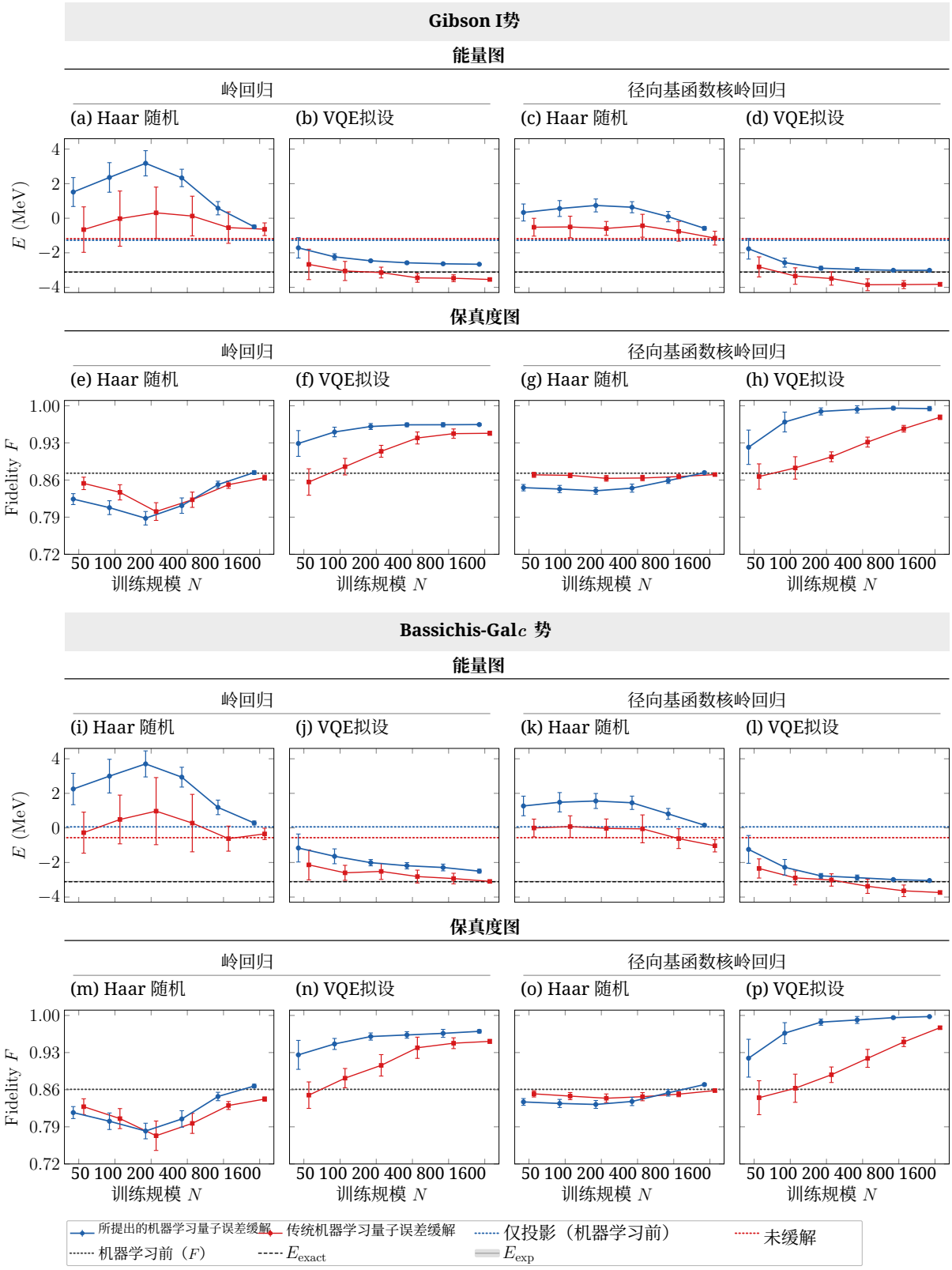


图8：四量子比特 Λ-$\alpha$ 系统的基态能量 [(a)–(d)、(i)–(l)] 及态保真度 [(e)–(h)、(m)–(p)]，比较传统方法（红色）与所提出的机器学习量子误差缓解（蓝色），适用于 Gibson I 和 Bassichis-Gal$c$势。每行中，左侧两个面板显示岭回归结果，右侧两个面板显示 RBF 核岭回归结果，两者均使用 Haar 随机数据集和 VQE 拟设数据集进行训练。误差棒表示 10 次独立运行的标准差。点线：机器学习误差缓解前的数值；虚线： $E_{\text{exact}}$；灰色带： $E_{\text{exp}}$。

| 势 | 理想 | Raw | REM | 零噪声外推+REM | 传统机器学习量子误差缓解 | | 所提出的机器学习量子误差缓解 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | 岭回归 | 径向基函数核岭回归 | 岭回归 | 径向基函数核岭回归 |
| 伍兹-萨克森 | −0.135 | 0.618 | −0.001 ±0.024 | −0.046 ±0.022 | −0.184 ±0.004 | −0.128 ±0.007 | −0.134 ±0.000 | −0.107 ±0.004 |

表 VIII：采用伍兹-萨克森势的三量子比特 Λ-氘核系统的基态能量估计（单位：兆电子伏）。将理想基态能量与以下硬件结果进行比较：未进行误差缓解（原始）、采用读出误差缓解（REM），以及结合 REM 的零噪声外推（ZNE+REM）。机器学习量子误差缓解结果通过岭回归和径向基函数核岭回归（RBF-KRR）获得，模型使用含有 $N = 1600$ 的变分量子本征求解器拟设数据进行训练，涵盖常规方法和所提方法。机器学习量子误差缓解结果报告为 10 个随机种子的均值 ± 标准差。

| 势 | 理想 | Raw | REM | 零噪声外推+REM | 传统机器学习量子误差缓解 | | 所提出的机器学习量子误差缓解 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | 岭回归 | 径向基函数核岭回归 | 岭回归 | 径向基函数核岭回归 |
| Gibson I | −3.118 | 6.851 | −0.568 ±0.343 | −1.125 ±0.412 | −3.544 ±0.068 | −3.822 ±0.102 | −2.663 ±0.026 | −3.014 ±0.058 |
| Bassichis-Gal $c$ | −3.115 | 6.569 | 0.391 ±0.570 | −0.672 ±0.676 | −3.095 ±0.070 | −3.739 ±0.097 | −2.502 ±0.111 | −3.045 ±0.004 |

表 IX：使用 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$ 势时，四量子比特 Λ-$\alpha$ 系统的基态能量估计（单位：兆电子伏）。将理想基态能量与未进行误差缓解（原始）、采用读出误差缓解（REM），以及结合 REM 的零噪声外推（ZNE+REM）所得硬件结果进行比较。机器学习量子误差缓解结果采用岭回归和径向基函数核岭回归（RBF-KRR）获得，使用带有 $N = 1600$ 的 VQE 拟设数据进行训练，分别应用于常规方法和所提方法。机器学习量子误差缓解结果报告为 10 个随机种子的均值 ± 标准差。

与 VQE-拟设训练数据进行比较。

### C. 总体比较与讨论

结果表明，机器学习-量子误差缓解的性能取决于训练数据集的选择以及用于学习校正的回归模型。对于两种系统规模，使用 VQE-拟设态训练的模型，其泡利预测误差低于使用 Haar随机态训练的模型。在基态计算中也观察到相同的趋势。VQE-拟设训练数据能够提供更准确的能量估计和更高的态保真度，而 Haar 随机训练通常无法恢复目标基态。

表 VIII 和 IX 比较了使用不同误差缓解方法获得的基态能量估计。结果表明，仅使用传统误差缓解技术不足以恢复精确基态能量。尽管读出误差缓解（REM）以及与 REM 结合的零噪声外推（ZNE）降低了硬件估计值中的误差，但与理想值相比仍存在显著偏差。相比之下，所考虑的所有机器学习量子误差缓解方法给出的能量估计都比传统误差缓解基线。

使用所提出的机器学习量子误差缓解框架和VQE拟设训练数据，我们分别获得了三量子比特和四量子比特 Λ-氘核以及 Λ-$\alpha$ 系统最准确的基态能量。对于三量子比特 Λ-氘核系统，岭回归在 $N = 1600$处取得了最佳结果。预测能量为 $-0.134$ 兆电子伏，与 $-0.135$ 兆电子伏的精确值非常接近，相应的态保真度为 0.999。对于四量子比特Λ-$\alpha$ 系统，径向基函数核岭回归模型在两种核势下均取得了最佳结果。对于 Gibson I 和 Bassichis-Gal $c$势，它分别预测出 $-3.014$ 兆电子伏和$-3.045$ 兆电子伏的基态能量，相应的态保真度为 0.995 和 0.998。这些结果表明，回归模型的选择取决于所研究的系统：对于 Λ-氘核，岭回归表现最佳；对于 Λ-$\alpha$ 系统，径向基函数核岭回归表现最佳。

与传统机器学习量子误差缓解的比较进一步表明，增大训练集大小并不一定能带来更好的预测结果。具体而言，三量子比特系统中的传统岭回归，以及四量子比特系统中的传统 RBF 核岭回归，得出的能量估计值低于精确的基态值。进一步

而言，尽管仅采用凸投影能够提高重构态的物理有效性，却无法始终恢复基态能量。总体而言，结果表明，采用受物理约束的量子态重构、使用能够代表目标态的训练数据，以及选择合适的回归模型都至关重要。

## V. 结论与展望

在本研究中，我们使用 IBM Quantum 处理器，研究了机器学习量子误差缓解（ML-QEM）在三量子比特 Λ-氘核和四量子比特 Λ-$\alpha$ 核系统中的基态能量估计与量子态重构问题。所提出的方法学习理想与含噪 Pauli 期望值之间的残差校正，并将校正后的结果投影到物理量子态集合上。我们将其性能与传统机器学习量子误差缓解以及基线误差缓解技术——读出误差缓解（REM）和零噪声外推（ZNE）——进行了比较。我们还考察了训练态分布、训练集大小和回归模型对误差缓解性能的影响。

我们的结果表明，所提出的机器学习量子误差缓解框架能够同时改善基态能量估计和态保真度，其中使用 VQE-拟设训练数据时获得的改善最大。然而，性能取决于量子系统以及回归模型的选择。对于三量子比特 Λ-氘核系统，在 VQE-拟设态上训练时，岭回归能够给出稳定的能量估计，并且接近理想基态能量。相比之下，对于四量子比特 Λ-$\alpha$系统，在两种核势下，就基态能量和态保真度而言，非线性 RBF 核岭回归均比岭回归表现更好。结果还表明，训练数据的选择对机器学习量子误差缓解性能具有重要影响。特别是，使用 Haar 随机训练数据所获得的改善小于使用 VQE-拟设数据所获得的改善。这些发现凸显了选择适当的训练态分布和回归模型的重要性，同时还应对重构的量子态施加物理约束。

在未来的工作中，我们将重点改进该框架的可扩展性，并将其扩展至更大规模、更贴近现实的多体核哈密顿量。我们还将探索其他机器学习模型，例如深度神经网络和图神经网络，用于预测基态性质及其他可观测量。这些研究应有助于阐明机器学习如何支持在当前含噪量子硬件上对复杂核系统进行实用的量子模拟-

当前含噪量子硬件上复杂核系统的模拟。


## 致谢

S. C. 感谢新德里的 IUAC（AUCID: 77316）提供经费支持。H. S. 感谢 NQM（DST/QTC/NQM/QA/2026/01(G)）为本研究提供经费支持。


## 数据可用性

支持本研究结果的数据已存入 Zenodo 存储库 [68]，可通过 https://zenodo.org/records/23969830 获取。

## 附录：其他预测性能指标

### 1. 三量子比特系统

图 9 展示了在留出测试态上，针对使用 VQE 和 Haar 随机数据集训练的回归模型，预测的泡利期望值与理想泡利期望值之间的均方根误差（RMSE）和决定系数（$R^2$），补充了正文中讨论的平均绝对误差结果。作为参考，文中还报告了在含噪值（机器学习前）上评估的相同指标。这些额外指标进一步评估了岭回归和 RBF 核岭回归模型在 Haar 随机和 VQE-ansatz 数据集上的预测精度随训练集大小 $N$ 的变化。

*a. Haar* 随机。含噪输入的均方根误差为 0.046（$R^2 = 0.981$），仅进行凸投影便可将其降至 0.042（$R^2 = 0.984$）。所提出的机器学习量子误差缓解进一步降低了误差。在$N = 1600$处，岭回归的均方根误差为 0.033（$R^2 = 0.990$），RBF 核岭回归的均方根误差为 0.035（$R^2 = 0.989$）。相比之下，传统机器学习量子误差缓解仅略微改善了未缓解输入。

*b. VQE* 试探态。含噪输入的均方根误差为 0.232（$R^2 = 0.515$），仅通过凸投影即可降至 0.124（$R^2 = 0.861$）。采用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，随着 $N$ 的增加，均方根误差持续下降；当 $N = 1600$ 时，岭回归和 RBF 核岭回归的误差分别达到 0.051 和 0.038，相应的 $R^2$ 值为 0.977

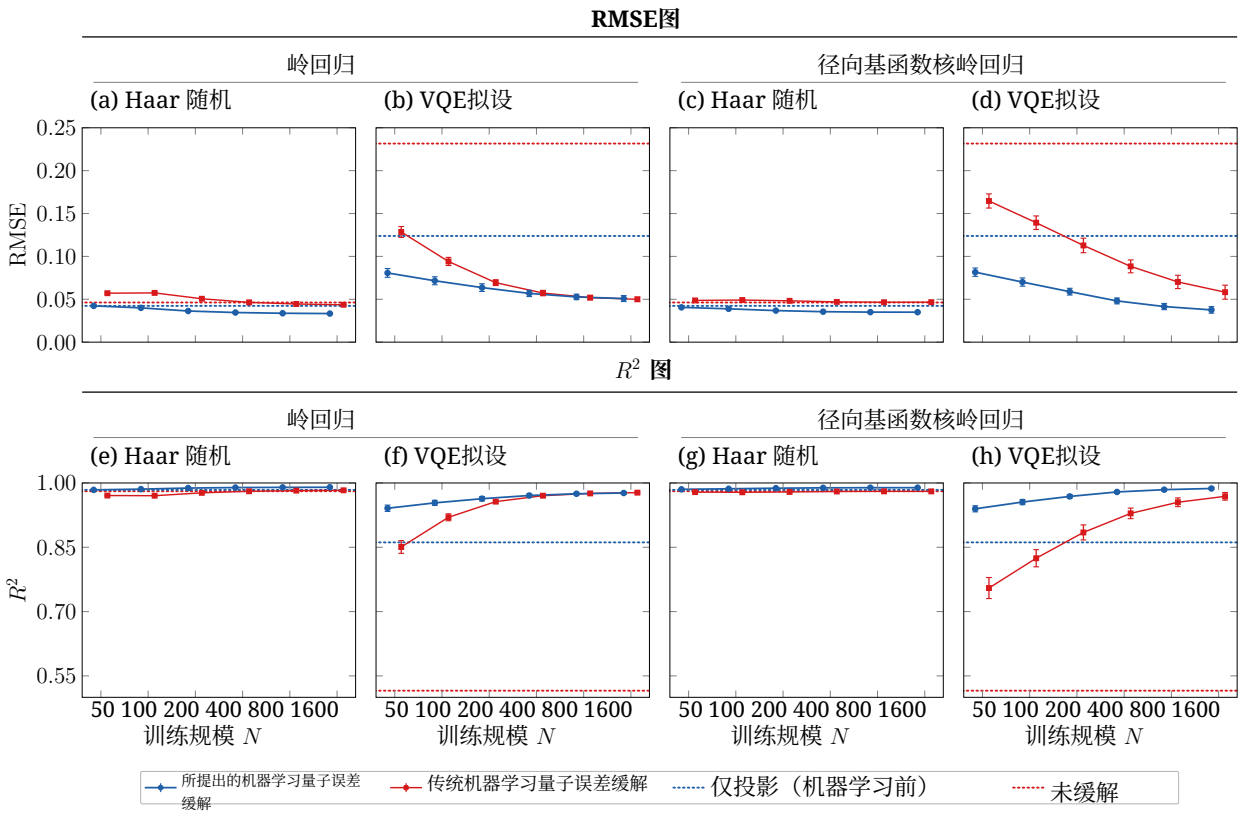


图1 9：测试集均方根误差（RMSE）[面板 (a)–(d)] 和决定系数（$R^2$）[面板 (e)–(h)] 。岭回归 [(a)、(b)、(e)、(f)] 和 RBF 核岭回归 [(c)、(d)、(g)、(h)]模型分别在三量子比特Haar随机 [(a)、(c)、(e)、(g)] 和 VQE拟设 [(b)、(d)、(f)、(h)] 数据集上训练，训练集大小各不相同 $N$。实线表示所提出的（蓝色）和传统的（红色）机器学习量子误差缓解方法（10 个独立随机种子的均值 ± 标准差）；虚线表示机器学习误差缓解前的数值。

和 0.987。采用所提出的机器学习量子误差缓解的 RBF 核岭回归模型，在所有训练集大小下均持续优于其传统对应模型。

### 2. 四量子比特系统

图 10 展示了四量子比特系统对应的 RMSE 和 $R^2$ 结果，从而可以将两种机器学习量子误差缓解方法的预测性能与三量子比特系统中的表现进行比较。

*a. Haar* 随机。对于Haar 随机态，含噪输入的均方根误差为 0。122 ($R^2 = 0.746$)，而仅投影仅带来边际改善，均方根误差为 0。120 ($R^2 = 0.756$)。所提出的机器学习量子误差缓解相较于这些基线方法也仅带来有限改善。传统的机器学习量子误差缓解表现甚至更差：在所有训练集大小下，其均方根误差更高，$R^2$ 值低于含噪输入。

*b. VQE* 试探态。含噪输入的均方根误差为 0.172（$R^2 = 0.496$），仅通过凸投影即可将其降至 0.077（$R^2 = 0.899$）。使用所提出的机器学习量子误差缓解框架后，随着训练集大小 $N$ 的增加，两个模型均持续改进。在 $N = 1600$ 时，岭回归和 RBF 核岭回归的均方根误差均达到 0.023，且两个模型对应的 $R^2$ 值均为 0.991。对于所有训练集大小 $N$，所提出的机器学习量子误差缓解始终优于传统方法。

[1] G. Jaeger，量子信息：概述，203（2007）。

[2] J. Preskill，Quantum2，79（2018）。

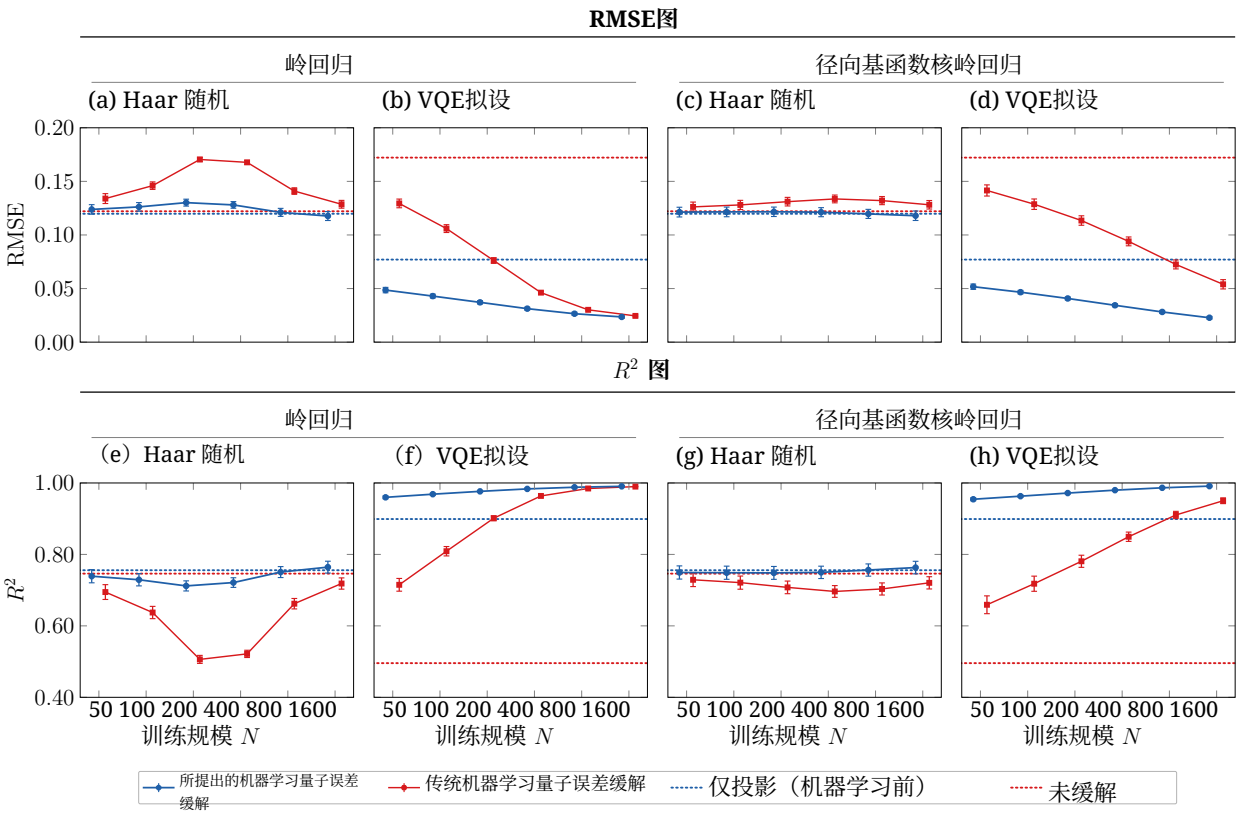


图10：测试集均方根误差（RMSE）[面板（a）–（d）] 以及决定系数（$R^2$）[面板（e）–（h）]，分别针对岭回归 [（a）、（b）、（e）、（f）] 和 RBF 核岭回归 [（c）、（d）、（g）、（h）]模型；这些模型在不同训练集大小 $N$下，分别使用四量子比特 Haar 随机 [（a）、（c）、（e）、（g）] 和 VQE拟设 [（b）、（d）、（f）、（h）] 数据集进行训练。实线表示所提出的（蓝色）和传统的（红色）机器学习量子误差缓解方法（10 个独立随机种子上的均值 ± 标准差）；虚线表示机器学习缓解前的数值。

[3] S. Resch 和 U. R. Karpuzcu，ACM Computing Surveys (CSUR) **54**，1（2021年）。[4] S. J. Devitt、W. J. Munro 和 K. Nemoto，Reports on Progress in Physics **76**，076001（2013年）。[5] E. Knill 和 R. Laflamme，Physical Review A **55**，900 1997年（）。[6] D. Qin、X. Xu 和 Y. Li，Chinese Physics B **31**，090306 2022年（）。[7] Z. Cai、R. Babbush、S. C. Benjamin、S. Endo、W. J. Huggins、Y. Li、J. R. McClean 和 T. E. O'Brien，Reviews of Modern Physics **95**，045005（2023年）。[8] Y. Li 和 S. C. Benjamin，Physical Review X **7**，021050 2017年（）。[9] K. Temme、S. Bravyi 和 J. M. Gambetta，Physical Review Letters **119**，180509（2017年）。[10] S. Endo、S. C. Benjamin 和 Y. Li，Physical Review X **8**，031027（2018年）。[11] T. Giurgica-Tiron、Y. Hindy、R. LaRose、A. Mari 和 W. J. Zeng，载于 *2020 IEEE international conference on quantum computing and engineering (QCE)*（IEEE，2020年），第 306–316 页。[12] E. Van Den Berg、Z. K. Minev、A. Kandala 和 K. Temme，Nature Physics **19**，1116（2023年）。[13] K. Tsubouchi、T. Sagawa 和 N. Yoshioka，Physical Review Letters **131**，210601（2023年）。[14] R. Takagi、S. Endo、S. Minagawa 和 M. Gu，npj Quantum Information **8**，114（2022年）。[15] R. Takagi、H. Taji ma 和 M. Gu，Physical Review Letters **131**，210602（2023年）。[16] Y. Quek、D. Stilck Fran¸ca、S. Khatri、J. J. Meyer 和 J. Eisert，Nature Physics **20**，1648（2024年）。[17] K. Schultz、R. LaRose、A. Mari、G. Quiroz、N. Shammah、B. D. Clader 和 W. J. Zeng，Physical Review A **106**，052406（2022年）。[18] A. Strikis、D. Qin、Y. Chen、S. C. Benjamin 和 Y. Li，PRX Quantum **2**，040330（2021年）。[19] H. Liao、D. S. Wang、I. Sitdikov、C. Salcedo、A. Seif 和 Z. K. Minev，Nature Machine Intelligence **6**，1478（2024年）。[20] P. Czarnik、A. Arrasmith、P. J. Coles 和 L. Cincio，Quantum **5**，592（2021年）。[21] P. Czarnik、M. McKerns、A. T. Sornborger 和 L. Cincio，Quantum **9**，1727（2025年）。[22] E. R. Bennewitz、F. Hopfmueller、B. Kulchytskyy、J. Carrasquilla 和 P. Ronagh，Nature Machine Intelligence **4**，618（2022年）。

[23] C. Kim、K. D. Park 和 J.-K. Rhee，IEEE Access 8，188853（2020年）。[24] A. Muqeet、S. Ali、T. Yue 和 P. Arcaini，载于 *Companion Proceedings of the 32nd ACM International Conference on the Foundations of Software Engineering* 2024 80 91 （ ）第 – 页。[25] K. Banaszek、G. D'ariano、M. Paris 和 M. Sacchi，Physical Review A 61，010304（1999年）。[26] R. Blume-Kohout，Physical Review Letters 105，200504（2010年）。[27] F. Husz´ar 和 N. M. Houlsby，Physical Review A——原子、分子与光物理 85，052120（2012年）。[28] T. Opatrn`y、D.-G. Welsch 和 W. Vogel，Physical Review A 56，1788（1997年）。[29] M. S. Kaznady 和 D. F. James，Physical Review A——原子、分子与光物理 79，022109（2009年）。[30] B. Qi、Z. Hou、L. Li、D. Dong、G. Xiang 和 G. Guo，Scientific Reports 3，3496（2013年）。[31] Z. Hradil，Physical Review A 55，R1561（1997年）。[32] T. Baumgratz、A. N¨ußeler、M. Cramer 和 M. B. Plenio，New Journal of Physics 15，125004（2013年）。[33] H. Singh、K. Dorai、 *et al.*，Physics Letters A 380，3051（2016年）。[34] C. Schwemmer、L. Knips、D. Richart、H. Weinfurter、T. Moroder、M. Kleinmann 和 O. G¨uhne，Physical Review Letters 114，080403（2015年）。[35] J. Shang、Z. Zhang 和 H. K. Ng，Physical Review A 95，062336（2017年）。[36] A. Gaikwad、Arvind 和 K. Dorai，Quantum Information Processing 20，19（2021年）。[37] M. Branderhorst、I. Walmsley、R. Kosut 和 H. Ra[38] bitz，Journal of Physics B：原子、分子与光物理 41，074004（2008年）。[38] X.-L. Huang、J. Gao、Z.-Q. Jiao、Z.-Q. Yan、Z.-Y. Zhang、D.-Y. Chen、X. Zhang、L. Ji 和 X.-M. Jin，Science Bulletin 65，286（2020年）。[39] J. A. Smolin、J. M. Gambetta 和 G. Smith，Physical Review Letters 108，070502（2012年）。[40] W. Wang 和 M. A. Carreira-Perpin´an，arXiv 预印本 arXiv:1309.1541（2013年）。[41] J. Duchi、S. Shalev-Shwartz、Y. Singer 和 T. Chandra，载于 *Proceedings of the 25th international conference on Machine learning* 2008 272 279 （ ）第 – 页。[42] G. B. Arfken、H. J. Weber 和 F. E. Harris，*Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide* 2011 （ Academic Press，）。[43] S. McArdle、S. Endo、A. Aspuru-Guzik、S. C. Benjamin 和 X. Yuan，Reviews of Modern Physics 92，015003（2020年）。[44] O. Di Matteo、A. McCoy、P. Gysbers、T. Miyagi、R. Woloshyn 和 P. Navr´atil，Physical Review A 103，042405（2021年）。[45] J. T. Seeley、M. J. Richard 和 P. J. Love，The Journal of Chemical Physics 137（2012年）。[46] R. Somma、G. Ortiz、J. E. Gubernatis、E. Knill 和 R. Laflamme，Physical Review A 65，042323（2002）。[47] S. B. Bravyi 和 A. Y. Kitaev，《物理学年鉴》298，210（2002）。[48] P. Jordan 和 E. Wigner，Zeitschrift f ¨ **47**, ur 631 1928 Physik（）。[49] P. Siwach 和 P. Arumugam，《物理评论C》104，034301（2021年）。[50] C. Bertulani，《物理快报B》837，137639（2023年）。[51] M. Juri˘c、G. Bohm、J. Klabuhn、U. Krecker、F. Wysotzki、G. Coremans-Bertrand、J. Sacton、G. Wilquet、T. Cantwell、F. Esmael、 *et al.*，《核物理B》52，1（1973）。[52] C. Daskaloyannis、M. Grypeos 和 H. Nassena，Physical Review C 26，702（1982）。[53] O. Portilho 和 S. Coon，《物理学杂志G：核与粒子物理》17，1375（1991）。[54] A. Peruzzo、J. McClean、P. Shadbolt、M.-H. Yung、X.-Q. Zhou、P. J. Love、A. Aspuru-Guzik 和 J. L. O'brien，《自然通讯》5，4213（2014）。[55] J. R. McClean、J. Romero、R. Babbush 和 A. Aspuru-Guzik，New Journal of Physics 18，023023（2016）。[56] D. Wecker、M. B. Hastings 和 M. Troyer，Physical Review A 92，042303（2015）。[57] O. Shehab、K. Landsman、Y. Nam、D. Zhu、N. M. Linke、M. Keesan、R. C. Pooser 和 C. Monroe，Physical Review A 100，062319（2019）。[58] G. Aleksandrowicz、T. Alexander、P. Barkoutsos、L. Bello、Y. Ben-Haim、D. Bucher、F. J. Cabrera-Hern´andez、J. Carballo-Franquis、A. Chen、C.-F. Chen、 *et al.*，Zenodo（2019）。[59] K. Zyczkowski 和 H.-J. Sommers，《物理学杂志A：数学与通论》34，7111（2001）。[60] R. Iten、R. Colbeck、I. Kukuljan、J. Home 和 M. Christandl，Physical Review A 93，032318（2016）。[61] K. P. Murphy，*Machine learning: a probabilistic perspective* 2012 （麻省理工学院出版社，）。[62] G. C. McDonald，《威利跨学科评论：计算统计学》1，93（2009）。[63] C. Saunders、A. Gammerman 和 V. Vovk，（1998）。[64] C. J. Willmott 和 K. Matsuura，《气候研究》30，79（2005）。[65] D. Chicco、M. J. Warrens 和 G. Jurman，《PeerJ计算机科学》7，e623（2021）。[66] A. Uhlmann，*et al.* *The transition probability'in the state space of a* algebra* ，技术报告（联合核研究所，杜布纳（苏联），1975）。[67] R. Jozsa，《现代光学杂志》41，2315（1994）。[68] S. Choudhary、T. Kaur、H. Kaur 和 H. Singh，《用于基于机器学习的量子误差缓解与束缚态模拟的数据集》（2026）。