

一种构建参数化量子线路的区块环拓扑结构

刘文杰^{1,2,3}, 吴青山¹, 查颖¹, 王海彬^{1,3}

- (1. 南京信息工程大学软件学院, 江苏南京 210044;
2. 南京信息工程大学江苏省大气环境与装备技术协同创新中心, 江苏南京 210044;
3. 数字取证教育部工程研究中心, 江苏南京 210044)

摘要: 在变分子量算法中, 参数化量子线路拓扑结构的选择对算法性能具有重要意义. 目前已有的拓扑结构存在一些问题, 如全连接拓扑结构所需量子门数量较多, 环型拓扑结构的表达能力与纠缠能力略有欠缺. 为了解决以上问题, 本文提出了一种新型的区块环(Block-Ring, BR)拓扑结构, 在保障良好性能的同时减少参数规模(即量子门数量), 降低线路复杂度. 在BR拓扑中, n 个量子比特被等分为多个区块, 每个区块包含 m 个量子比特, 区块内部所有量子比特两两连接, 区块之间采用环型结构进行连接. 为了构造BR拓扑结构的参数化量子线路, 设计了一种多层线路生成算法, 可自动生成由单量子比特门 Rx、Rz 和双量子比特门 CRx 或 CRz 构成的量子线路. IBM Q 模拟实验表明, 相较于环型拓扑结构, 无论单层、双层以及三层BR拓扑结构的表达能力和纠缠能力均有不同程度的提升; 相较于拥有最高表达能力与纠缠能力的全连接拓扑结构, BR拓扑结构呈现接近的性能指标, 且线路复杂度显著降低, 即参数数量与双量子比特门数量均从 $O(n^2)$ 降低为 $O(mn)$, 线路深度从 $O(n^2)$ 降低为 $O(n/m+m^2)$.

关键词: 参数化量子线路; 线路拓扑结构; 区块环拓扑; 表达能力; 纠缠能力; 线路复杂度

基金项目: 国家自然科学基金(No.62071240); 科技创新 2030——“量子通信与量子计算机”重大项目(No.2021ZD0302901); 江苏省基础研究计划(自然科学基金)项目(No.BK20231142)

中图分类号: TP391.41 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112(2024)08-2726-11

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20230135

A Block-Ring Connected Topology of Parameterized Quantum Circuits

LIU Wen-jie^{1,2,3}, WU Qing-shan¹, ZHA Ying¹, WANG Hai-bin^{1,3}

- (1. School of Software, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China;
2. Jiangsu Collaborative Innovation Center of Atmospheric Environment and Equipment Technology, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing, Jiangsu 210044, China;
3. Engineering Research Center of Digital Forensics, Ministry of Education, Nanjing, Jiangsu 210044, China)

Abstract: In the variational quantum algorithm, the selection of parameterized quantum circuit topology is of great significance to the performance of the algorithm. There are some problems in the existing topology, such as the large number of quantum gates required by the fully connected topology, and the slight lack of the expressibility and entanglement capability of the ring topology. This paper proposes a new block-ring (BR) topology to solve the problems above, which can effectively reduce the size of parameters (i.e. the number of parameterized gates) while ensuring performance. n qubits are divided into several blocks equally, each block contains m qubits. Qubits in the block are connected in pairs, and the blocks are connected by ring structure. In order to construct parameterized quantum circuits with BR topology, we designed a algorithm of generating multiple-layer circuit, which can automatically generate quantum circuits composed of single-qubit gate Rx, Rz and two-qubit gate CRx or CRz. The IBM Q simulation experiment shows that compared with the ring topology, the expressibility and entanglement capability of single-layer, double-layer and triple-layer BR topology are improved in different degrees; Compared with the all-to-all connected topology with the highest expression ability and entanglement capability, BR topology presents a close performance, and the circuit complexity is significantly reduced, that is, the number of parameters and the number of double quantum gates are reduced from $O(n^2)$ to $O(mn)$, and the circuit depth is reduced from $O(n^2)$ to $O(n/m+m^2)$.

Key words: parameterized quantum circuits; circuit topology; block-ring topology; expressibility; entangling capability; circuit complexity

Foundation Item(s): National Natural Science Foundation of China (No.62071240); Innovation Program for Quantum Science and Technology (No.2021ZD0302901); Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No.BK20231142)

1 引言

伴随量子器件与量子算法的快速发展,我们进入了中等规模带噪声的量子计算时代(Noisy Intermediate Scale Quantum, NISQ)^[1-3]. 尽管目前 NISQ 设备不能完成大规模的量子计算或者实现较大的商业价值,但在经典计算机辅助下,仍然可以使用混合计算模式(量子计算+经典计算)探索更多量子计算的应用场景. 基于这种思想,各种变分量子算法(Variational Quantum Algorithms, VQAs)被提出. 例如,计算分子系统基态的变分量子本征求解器(Variational Quantum Eigensolver, VQE)^[4-7]、解决最大切割和数字划分问题的量子近似优化算法(Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)^[8-11]、用于压缩数据的量子自动编码器(Quantum AutoEncoder, QAE)^[12-14]、基于图分类问题的量子卷积神经网络(Quantum Convolutional Neural Networks, QCNN)^[15-18],以及生成高仿数据的量子生成对抗网络(Quantum Generative Adversarial Networks, QGAN)^[19-23]. 这些算法都基于通用化参数化量子线路(Parameterized Quantum Circuit, PQC)解决各种线性代数问题.

尽管 PQC 在变分量子算法中扮演着至关重要的角色,但是关于 PQC 的拓扑结构研究尚处于初期阶段,如何为变分量子算法选择一个合适的参数化量子线路依旧困扰着研究者. 常用于构建 PQC 的 3 种拓扑结构分别为线型拓扑、环型拓扑和全连接型拓扑. 线型拓扑首次提出于文献[24],可用于构建最小量子门成本的线型邻接结构(Linear Nearest Neighbor, LNN);环型拓扑则是为了在 NISQ 时代,满足高效线路结构^[25]需求而被提出;Schuld 等人^[26]于 2018 年提出一种以线路为中心的分类器(为环型拓扑引入步长参数,两层不同步长的环型结构线路共同组成一个新的线路模板,本文的异构环型);全连接型拓扑首次被提出并应用于训练量子自动编码器^[12]. Sim 等人^[27]于 2019 年提出两个量化 PQC 性能指标,表达能力和纠缠能力,比较和总结了基于 3 种基础拓扑结构的 19 个特定的线路;Hubregtsen 等人^[28]在 2020 年利用上述两个性能指标,基于分类任务比较了 19 种线路在分类问题上的性能表现. 但是,目前 PQC 拓扑结构存在问题,例如拥有最高表达能力与纠缠能力的全连接拓扑结构所需量子门数量过多,导致参数优化困难;环型拓扑结构的表达能力与纠缠能力略有欠缺,无法保证算法性能. 在 VQAs 中,选择 PQC 拓扑结构具有重要意义.

为了解决以上问题,提出了一种用于构建 PQC 线

路的区块环拓扑(Block-Ring connected topology, BR). 量子比特被等分为 t 个区块, $t=n/m$, m 是每个区块中量子比特的数量. 区块内部采用全连接模式(all-to-all);不同区块之间处于相同对应位置的量子比特采用环型结构(ring)连接. 将利用 BR 拓扑构建的 PQC 线路与文献[27]中表现较好的线路进行实验比较.

2 先验知识

2.1 参数化量子线路

PQC 是一种作用在 n 个量子比特上具有可调节参数的酉操作,即 U_θ . 这个酉操作会将一个初态 ϕ_0 转变成一个参数化量子态:

$$|\phi_\theta\rangle = U_\theta|\phi_0\rangle \quad (1)$$

其中, θ 是 PQC 中的参数向量. 通用的 PQC 如图 1 所示.

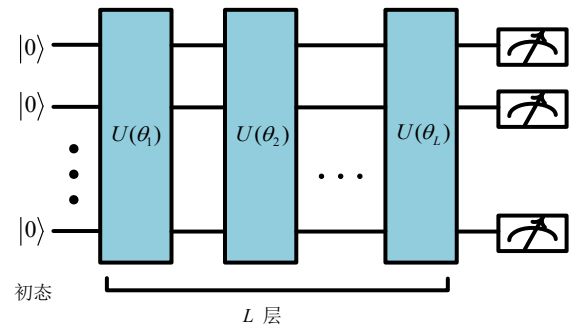


图1 PQC的通用线路

U_θ 可以看作一个包含了单量子旋转门与双量子纠缠门的线路模板. 其中单量子比特旋转门包括 R_z 、 R_y 、 R_x 等,双量子比特门包括 CR_z 、 CR_y 、 CR_x 等. 由于 PQC 在量子机器学习问题上的功能类似于经典的神经网络,在一些特定场合,可以将 PQC 构成的实现特定功能的网络结构等同于量子神经网络. 根据问题规模不同,线路模板可能需要被多次调用,用于拟合任意的非线性函数,从而进一步提高量子线路的表达能力. 图 2 展示了构建一个 PQC 的 3 种常用拓扑结构,分别为线性拓扑、环型拓扑和全连接拓扑. 在具体应用中,图 2 中的 3 种线路可以被重复多次来构建一个深层的量子神经网络.

2.2 表达能力与纠缠能力

(1) 表达能力 (Expressibility, Expr) 用于描述一个 PQC 生成纯态的能力,可以通过比较 Haar 随机量子态分布^[29]与参数随机采样的 PQC 所生成的量子态分布来量化线路表达能力. Haar 随机量子态分布概率在附录 A 中给出. Sim 等人提出,由 PQC 生成的量子态分布与均

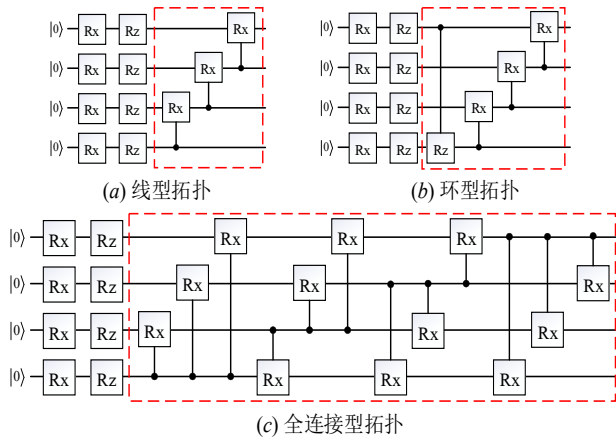


图2 三种不同拓扑的4量子比特线路

均匀分布的量子态之间的差距为

$$A = \int_{\text{Haar}} (|\psi\rangle\langle\psi|)^{\otimes t} d\psi - \int_{\Theta} (|\varphi_{\theta}\rangle\langle\varphi_{\theta}|)^{\otimes t} d\theta \quad (2)$$

表达能力可以通过 Kullback-Leibler (KL)^[30] 发散求得:

$$\text{Expr} = D_{\text{KL}}(\hat{P}_{\text{PQC}}(F; \theta) \| P_{\text{Haar}}(F)) \quad (3)$$

(2) 纠缠能力 (Entanglement ability, Ent) 旨在衡量 PQC 产生高度纠缠态的能力. Sim 等人提出可以用 Meyer-Wallach (MW) 纠缠测量^[31] 来计算生成量子态的纠缠能力. 两个量子态 $|u\rangle = \sum u_i|i\rangle$, $|v\rangle = \sum v_i|i\rangle$ 之间的泛化距离定义为

$$D(|u\rangle, |v\rangle) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} |u_i v_j - u_j v_i|^2 \quad (4)$$

根据式(4), 命名为 Q 的 MW 纠缠测量的定义如下:

$$\mathcal{Q}(|\psi\rangle) = \frac{4}{n} \sum_{j=1}^n D(t_j(0)|\psi\rangle, t_j(1)|\psi\rangle) \quad (5)$$

其中,

$$t_j(b)|b_1 b_2 \cdots b_n\rangle = \delta|b_1 b_2 \cdots \hat{b}_j \cdots b_n\rangle \quad (6)$$

$$\delta_{bb_j} = \begin{cases} 1, & b = b_j \\ 0, & b \neq b_j \end{cases} \quad (7)$$

$b_j \in \{0, 1\}$, \hat{b}_j 代表第 j 量子比特的缺失. 根据式(8), 可以计算一个 PQC 的纠缠能力, 即

$$\text{Ent} = \frac{1}{|S|} \sum_{\theta_i} \mathcal{Q}(|\psi_{\theta_i}\rangle) \quad (8)$$

其中, $S = \{\theta_i\}$, θ_i 是 PQC 的第 i 个参数向量.

3 一种构建参数化量子线路的区块环拓扑结构

在本节中, 提出了一个新的区块环 (Block-Ring, BR) 量子线路拓扑结构. 具体过程如下: 首先设计了 BR 拓扑的结构与连接方式, 并以 9 量子比特为例, 给出

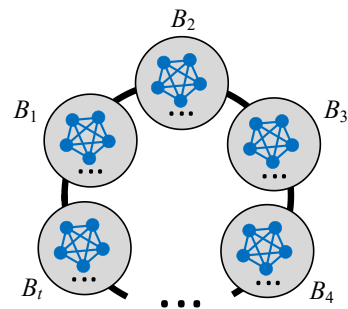
了对应 BR 拓扑线路; 为方便构造线路, 在 3.2 节中给出了构建多层 BR 拓扑线路的算法.

3.1 区块环 BR 拓扑结构

一个高效的 PQC 在变分量子算法中具有重要地位, 在不降低 PQC 的性能的情况下, 减少参数数量成为新的挑战. 为了解决这个问题, 提出了 BR 拓扑用于构造参数化量子线路. 这种新的线路结构以区块为单位进行连接, 而非单个量子比特. 具体而言, 它将 m 个量子比特组成的区块视为一个单位, 区块内部采用全连接型结构, 不同区块之间采用环型进行连接.

在 BR 拓扑中, n 个量子比特被平均划分为 t 个区块, $B = \{B_1, B_2, \dots, B_t\}$, $t = n/m$, B_i 代表第 i 个区块, $i = 1, 2, \dots, t$, m 是每个区块中包含的量子比特数量. 区块以环型方式进行排列, 即任意区块包含两个邻接区块 (B_i 的邻接区块为 $B_{\text{mod}(i-1, t)}$ 和 $B_{\text{mod}(i+1, t)}$). 在每个区块内部, 全连接模式用于连接量子比特 $\{b_{i1}, b_{i2}, \dots, b_{im}\}$, 即单个区块内任意两个量子比特之间存在着纠缠操作: $\langle b_{iq}, b_{ip} \rangle = 1$, ($q \neq p$), b_{ij} 代表第 i 个区块内的第 j 个量子比特. 不同区块直接按照环型结构依次连接. 具体而言, 任意两个相邻的区块内部的量子比特形成一一对应关系, 相同位置的量子比特依次连接形成环型: $\langle b_{hj}, b_{\hat{h}j} \rangle = 1$, $h = 1, 2, \dots, t$, $\hat{h} = \text{mod}(h+1, t)$, $j = 1, 2, \dots, m$.

BR 拓扑的整体结构如图 3 所示, 区块内的所有顶点 (量子比特) 形成了一张全连接图, 不同区块之间以环型结构进行排列与连接. 一个 n 量子比特的 BR 拓扑, 具有 m 个局部环型连接结构与 t 个局部全连接结构.

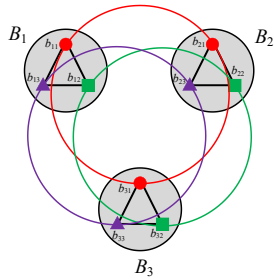


注: 每个圆点代表一个量子比特, m 个量子比特形成一个区块, t 个区块形成一个环.

图3 拥有 t 个区块的 BR 拓扑示意图

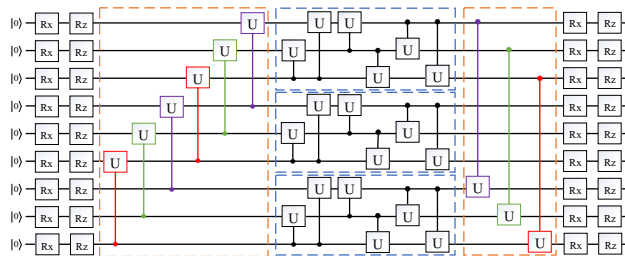
图 4 展示了一个 9 量子比特的 BR 拓扑的排列情况. 图中所有的量子比特被分为 3 个区块, 每个区块内有 3 个量子比特, 即 $m=3$. 用不同形状代表的 3 个量子比特之间两两相互连接. 类似地, 具有相同形状的量子比特在两个相邻区块之间也是互相连接的, 并最终形

成了一个环状的结构. 在图 5 中, 给出了对应于图 4 的完整的 9 量子比特 BR 拓扑量子线路. 该线路的第 1~3 位, 第 4~6 位, 以及第 7~9 位的量子比特 (自下往上) 分别组成 3 个区块. 橙色虚线框内的控制旋转操作 (Controlled Unitary, CU) 作用在两个区块的量子比特上, 从而使得区块通过环型方式进行连接, 3 个蓝色虚线框内的线路表示区块内部的全连接结构.



注:其中相同形状,即三角形、圆形、方形表示的量子比特依次连接成环状.

图 4 具有三个区块的 9-量子比特 BR 拓扑示意图



注:其中 $m=3$. 橙色虚线框内相同颜色的 CU 操作组成区块之间的环型连接, 3 个蓝色虚线框内部的 CU 操作组成了区块内部的全连接结构. U 操作的算子可以从 $\{R_x, R_z\}$ 中选择.

图 5 9-量子比特的 BR 拓扑线路

3.2 多层 BR 拓扑线路生成算法

BR 拓扑在不同区块之间采用多层局部环型连接, 区块内部采用全连接结构进行连接. 在使用 BR 拓扑构建线路时, 除了用于构建局部环型连接的 CU 门可以作用于不同区块中, 其余 CU 门仅能作用于同一区块内的不同量子比特. 以图 5 为例, 红色、绿色以及紫色的 CU 门分别构成了第 1、4、7 量子比特, 第 2、5、8 量子比特, 以及第 3、6、9 量子比特之间独立的局部环型结构. 这 3 个独立的局部环型结构不存在先后关系 (同一个局部环型内的 CU 操作只影响与其相同颜色的 CU 操作的先后顺序, 与其他颜色的 CU 操作无关), 因此局部环型结构在线路上处于并行状态, 图 5 中的多个局部环型线路深度与单个局部环型结构相同. 同时, 蓝色虚线框内不同区块的内部全连接结构互不影响, 共享单个全连接结构的线路深度. BR 拓扑的环型连接部分实际是将线路深度为 n 的单环结构拆分为 m 个线路深度为 n/m 的

独立的局部环型结构, 这 m 个局部环型线路在整体线路上是并行的. 因此相较于原始的环型拓扑结构, BR 拓扑的环型连接部分的线路深度由 $O(n)$ 变成了 $O(n/m)$. 同时, 不同区块内部的全连接线路互相独立, 所以所有区块的全连接结构的线路深度与单个区块的全连接结构的线路深度相同, 为 $O(m^2)$. 为方便构造线路, 给出了构建多层 BR 拓扑线路的算法. 算法 1 给出了构建线路的具体细节, 其中 $CR \begin{pmatrix} \text{qubit1} \\ \text{qubit2} \end{pmatrix}$ 表示一个双量子比特操作, qubit1 是控制量子比特, qubit2 是受控量子比特, 且受控操作可以从 $\{R_x, R_z\}$ 中选择.

算法 1 L 层 BR 拓扑线路生成算法

输入: 量子比特总数 n , 每个区块的量子比特数 m , 线路层数 L

输出: L 层 BR 拓扑线路

1. $i=0, l=0$
2. **while** ($l < L$)
3. 在 n 个量子比特上添加单量子旋转门 (R_x, R_z)
4. **while** ($i < n/m - 1$)
5. $j=0$
6. **while** ($j < m$)
7. $CR \begin{pmatrix} \text{qubit}[m*i+j] \\ \text{qubit}[m*(i+1)+j] \end{pmatrix}$
8. $j=j+1$
9. $i=i+1$
10. $i=0$
11. **while** ($i < n/m$)
12. 全连接模式被应用在区块 B_i
13. $i=i+1$
13. $j=0$
14. **while** ($j < m$)
15. $CR \begin{pmatrix} \text{qubit}[n-m+j] \\ \text{qubit}[j] \end{pmatrix}$
16. $j=j+1$
17. 在 n 个量子比特上添加单量子旋转门 (R_x, R_z)
18. **return** L 层 BR 拓扑电路

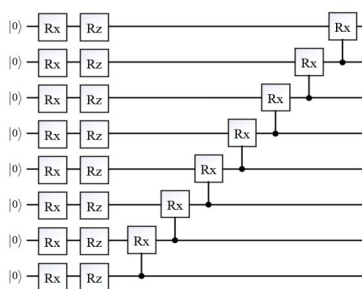
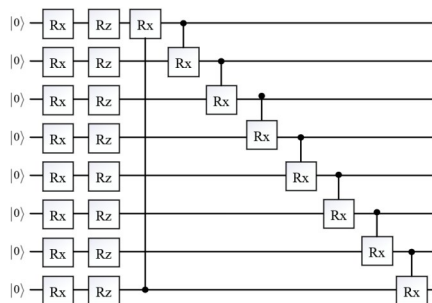
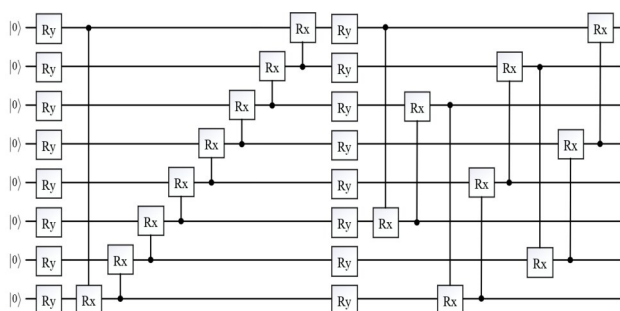
值得注意的是, 算法 1 限制了每个区块内部的量子比特数目 m 的取值范围, $1 < m < n$. 可以看出, 当 $m=1$ 时, 算法 1 将产出一个环形线路; 当 $m=n$ 时, 最终得到的线路是一个全连接型线路. 因此, BR 拓扑本质上可以看成环型拓扑与全连接拓扑的中间形态.

4 实验

4.1 实验设置

为了验证 BR 拓扑的优越性, 从文献 [27] 中选择了表现最好的 4 种线路 (图 6~9), 从表达能力与纠缠能力这两个方面与 BR 拓扑线路进行比较, 参与比较的线路中的量子比特数量均为 8. 考虑到不同参数化门对线路

性能的影响,将每种线路的双量子比特门由图中的CR_x替换为CR_z,并分别进行比较.图6为线型拓扑,目标是构建最小量子门成本的线型邻接结构,可以用于图数据划分^[24];图7为环型拓扑,其遵循NISQ设备的高效线路结构设计^[25];图8为异构环型拓扑(在环型拓扑的基础上引入步长参数,两层不同步长的环型结构线路共同组成一个新的线路模板),首次提出数据分类问题^[26];图9为全连接型拓扑,通常充当可编程线路并应用于训练量子自动编码器^[12].图10为BR拓扑,其中8个量子比特被等分为2组,即 $n=8, m=4, t=2$.为了简单起见,只在图11中给出了线型拓扑的双层配置线路,其他拓扑的双层线路构造方式与此类似.实验环境如下:CPU为Intel Xeon(R) Gold 5220R,内存为256 GB,采用IBM Q作为量子模拟器.

图6 单层线型线路-CR_x图7 单层环型线路-CR_x图8 单层异构环型线路-CR_x

4.2 实验结果分析

实验设置如下:对于每个线路,每次选取一组随机的参数,进行20 480次测量,得到本次的结果的概

率分布.所有的线路进行1 000次重复试验后,可以得到所有可能结果的概率分布图.将所得到的概率分布与标准的8量子比特Haar分布进行比较并计算KL离散值.KL离散值越低,意味着线路的表达能力和纠缠能力之间的关系,分别采用相同构型的2层与3层线路重复了上述实验.为了方便表示,后续线路中线型-CR_x与线型-CR_z编号为线路1-2;环型-CR_x与环型-CR_z编号为线路3-4;异构环型-CR_x与异构环型-CR_z编号为线路5-6,全连接型-CR_x与全连接型-CR_z编号为线路7-8;BR型-CR_x与BR型-CR_z编号为线路9-10.

附录A给出了10种线路量子线路单层、双层与三层配置(共30个线路)的测量结果概率分布与Haar曲线对比.可以看出,BR拓扑和全连接型拓扑的测量结果分布与Haar曲线拟合度最高,其次是异构环型拓扑结构,最后是环型拓扑与线型拓扑.

图12和图13呈现了30个线路的KL离散值(离散值越低,表达能力越高)与纠缠能力,蓝色柱形、橙色柱形与灰色柱形分别代表了单层、双层和三层线路的性能表现.在图12中,发现在单层情况下,线路7(全连接型拓扑-CR_x)与线路9(BR拓扑-CR_x)的离散值最低,线路9的离散值略高于线路7.在层数增加到双层与三层的情况下,线路7的表达能力并没有较大提升,线路9的表达能力则追上了线路7.尽管线路5(异构环型-CR_x)在表达能力上拥有着最高的提升率,但是仍然低于线路7和线路9.

5 线路复杂度分析

参数化量子线路的复杂度主要取决于参数数量、双量子比特门数量以及线路深度,考虑选取上述3个指标对BR拓扑结构与其他两种性能最优的线路结构(线路5、线路7)进行比较.

从参数数量以及双量子比特门数来看, n 个量子比特的单层BR拓扑线路中每一个区块内部的全连接操作消耗了 $m(m-1)$ 个双量子比特门,用于区块连接的局部环型结构消耗了 n/m 个双量子比特门,对于整个BR拓扑结构线路,双量子比特门总数则是 $[m n/m + m(m-1) n/m]L = mnL$, L 为线路层数.考虑到单量子比特门中的参数,所以总参数数量为 $(m+4)nL$.在文献[27]中,线路5的双量子比特门数与参数数量分别为 $(n + n/\gcd(n,3))L$ 和 $(3n + n/\gcd(n,3))L$,线路7的双量子比特门与参数数量为 $(n^2 + 3n)L$ 与 $(n^2 - n)L$.

考虑到线路深度对算法性能具有显著影响,进一步分析了BR拓扑的线路深度.因为BR拓扑中每一个

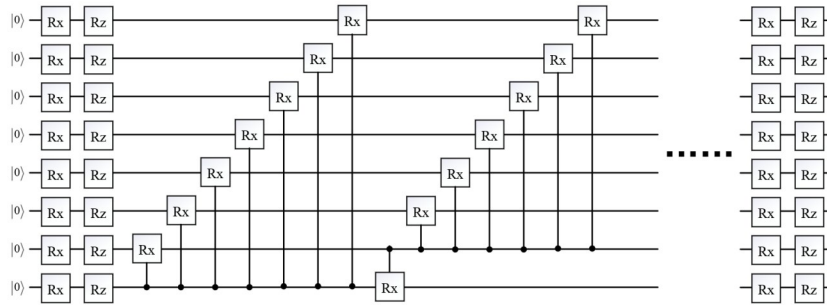


图9 单层全连接型线路-CRx

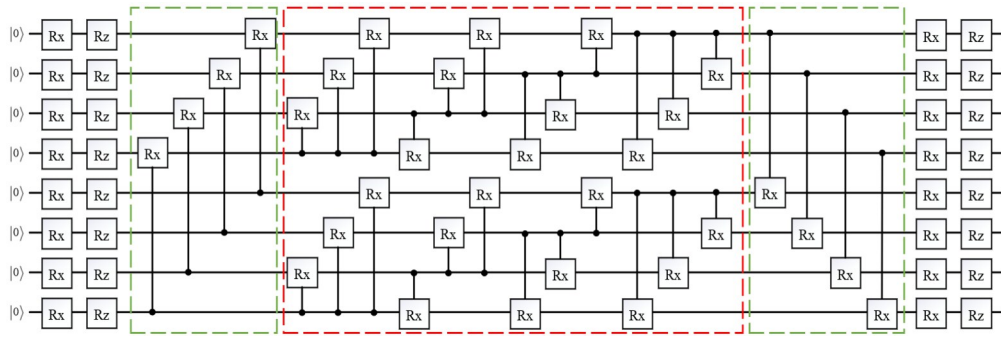


图10 单层BR拓扑线路-CRx, n=8, m=4

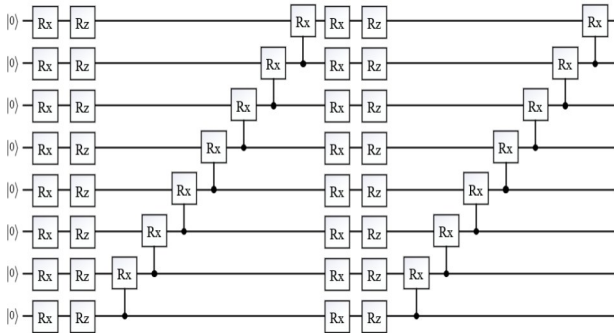


图11 双层线型拓扑线路-CRx

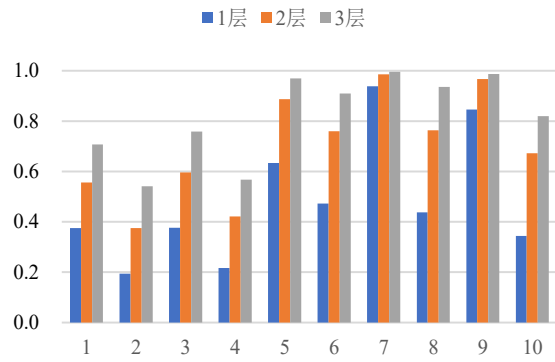


图13 30个线路的纠缠能力

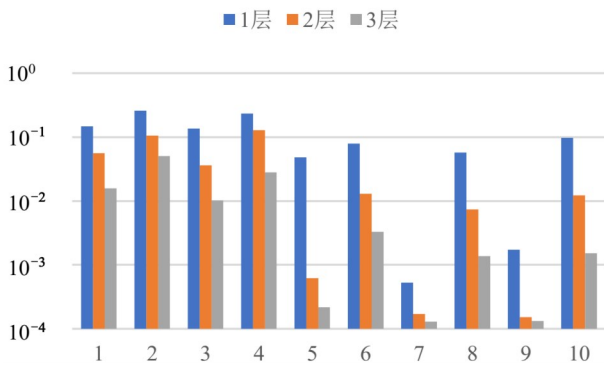


图12 30个线路的KL离散值(与表达能力负相关)

区块内部的全连接线路互相独立,不存在操作的先后顺序,所以所有区块占用的线路深度与单一区块占用的线路深度相同,为 m^2-m . 此外,BR 拓扑共有 m 个线路深度为 n/m 的环型连接,从空间上看,这 m 个环型结

构相互独立,多个环型连接的线路深度与单个环型连接的线路深度相同,为 n/m . 此外还有深度为4的单量子旋转层,因此BR 拓扑的总线路深度为 $(n/m + m^2 - m + 4)L$. 线路5与线路7的线路深度分别为 $[n + 2 + n/\gcd(n, 3)]$ 和 $(n^2 - n + 4)L$. 最终结果如表1所示.

当 n 可以被 m 整除时,上述分析成立. 当 m 不能整除 n 时,即 $\text{mod}(n, m) \neq 0$,需要添加最多 $(m-1)$ 个辅助量子比特. 在最不理想的情况下,构建一个BR 拓扑线路所需要的双量子比特门数量为 $[n + m - 1 + (n + m - 1)m(m - 1)/m]L = m(n + m - 1)L$,总参数数量增加到 $(m + 4)(n + m - 1)L$,线路深度为 $[(n + m - 1)/m + m^2 - m + 4]L$. 可以看出,即使在最不理

表1 3种线路复杂度分析

线路序号	参数数量	双量子比特门数量	线路深度
5	$\left(3n + \frac{n}{\gcd(n,3)}\right)L$	$\left(n + \frac{n}{\gcd(n,3)}\right)L$	$\left(n + 2 + \frac{n}{\gcd(n,3)}\right)L$
7	$(n^2 + 3n)L$	$(n^2 - n)L$	$(n^2 - n + 4)L$
9	$(m + 4)nL$	mnL	$\left(\frac{n}{m} + m^2 - m + 4\right)L$

注: n 是量子比特数量, L 是线路层数, m 是每个区块中量子比特数量, $1 < m < n$.

想的情况下, 额外开销依旧在可接受范围内.

相较于拥有最高表达能力与纠缠能力的全连接拓扑结构, BR 拓扑具有相近的性能, 且线路复杂度显著降低, 即参数数量与双量子比特门数量均从 $O(n^2)$ 降低为 $O(mn)$, 线路深度从 $O(n^2)$ 降低为 $O(n/m + m^2)$. 相较于异构环型拓扑结构, BR 拓扑的表达能力与纠缠能力均有不同程度的提升.

此外, 当 n 的值较大时, 线路性能很大程度上受 m 取值的影响. m 增大时, 线路的性能上升, 同时结构与复杂度愈发趋于全连接型结构及其复杂度; m 减小时, 线路的性能与复杂度下降, 同时线路结构更加接近于环型结构. 为了提供足够性能的同时平衡复杂度, 希望 m 的取值避免过低或过高. 参数数量、双量子比特门数量与 m 的取值呈正相关, 所以利用线路深度给出一个推荐的取值范围. 单层 BR 拓扑的线路深度为 $(n/m + m^2 - m + 4)$, 假设 n 固定, 线路深度时关于 m 的一个恒大于 0 的凹函数. 对 m 进行求导可以得出线路深度最小时满足: $n = 2m^2 - m$, $m = \left(1 + \sqrt{1 + 8n}\right)/4$. 此时线路深度为 $(m^2 + m + 3)$, 因此, 更加推荐 m 的取值在 $\left(1 + \sqrt{1 + 8n}\right)/4$ 附近.

6 总结

本文提出了一种构建参数化量子线路 (Parameterized Quantum Circuit, PQC) 的新型拓扑结构—区块环拓扑结构 (Block-Ring, BR), 并给出了对应的单层线路生成算法. 该拓扑结构在不损失良好性能的前提下, 可有效降低线路复杂度. 值得注意的是, 超参数 m 的选择对整个线路的性能与复杂度存在一定的影响. 当 m 降低时, 整个线路的复杂度有所降低, 性能也随之损失, 整个线路趋于环型结构; 当 m 增大时, 线路性能上升, 复杂度提高, 线路结构更加接近全连接型. 研究者可以针对不同的算法, 选取合适的 m 构建复杂度与性能较为均衡的量子线路.

参考文献

- [1] PRESKILL J. Quantum computing in the NISQ era and beyond[J]. Quantum, 2018, 2: 79.
- [2] LAVRIJSEN W, TUDOR A, MÜLLER J, et al. Classical optimizers for noisy intermediate-scale quantum devices [C]//2020 IEEE international conference on quantum computing and engineering (QCE). Piscataway: IEEE, 2020: 267-277.
- [3] BHARTI K, CERVERA-LIERTA A, KYAW T H, et al. Noisy intermediate-scale quantum algorithms[J]. Reviews of Modern Physics, 2022, 94(1): 015004.
- [4] HASTINGS M B, WECKER D, BAUER B, et al. Improving quantum algorithms for quantum chemistry[EB/OL]. (2014)[2023]. <https://arxiv.org/abs/1403.1539>.
- [5] MCCLEAN J R, ROMERO J, BABBUSH R, et al. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms[J]. New Journal of Physics, 2016, 18(2): 023023.
- [6] KANDALA A, MEZZACAPO A, TEMME K, et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets[J]. Nature, 2017, 549(7671): 242-246.
- [7] WANG D, HIGGOTT O, BRIERLEY S. Accelerated variational quantum eigensolver[J]. Physical review letters, 2019, 122(14): 140504.
- [8] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S. A quantum approximate optimization algorithm[EB/OL]. (2014) [2023]. <https://arxiv.org/abs/1411.4028>.
- [9] GUERRESCHI G G, MATSUURA A Y. QAOA for Max-Cut requires hundreds of qubits for quantum speed-up[J]. Scientific Reports, 2019, 9(1): 1-7.
- [10] ZHOU L, WANG S T, CHOI S, et al. Quantum approximate optimization algorithm: Performance, mechanism, and implementation on near-term devices[J]. Physical Review X, 2020, 10(2): 021067.
- [11] FARHI E, HAAROW A W. Quantum supremacy through the quantum approximate optimization algorithm[EB/OL]. (2016)[2023]. <https://arxiv.org/abs/1602.07674>.
- [12] ROMERO J, OLSON J P, ASPURU-GUZIK A. Quantum autoencoders for efficient compression of quantum data [J]. Quantum Science and Technology, 2017, 2(4): 045001.
- [13] BONDARENKO D, FELDMANN P. Quantum autoen-

- coders to denoise quantum data[J]. *Physical review letters*, 2020, 124(13): 130502.
- [14] CAO C, WANG X. Noise-assisted quantum autoencoder[J]. *Physical Review Applied*, 2021, 15(5): 054012.
- [15] CONG I, CHOI S, LUKIN M D. Quantum convolutional neural networks[J]. *Nature Physics*, 2019, 15(12): 1273-1278.
- [16] HUR T, KIM L, PARK D K. Quantum convolutional neural network for classical data classification[J]. *Quantum Machine Intelligence*, 2022, 4(1): 3.
- [17] VERDON G, MCCOURT T, LUZHNICA E, et al. Quantum graph neural networks[EB/OL]. (2019)[2023]. <https://arxiv.org/abs/1909.12264>.
- [18] WEI S J, CHEN Y H, ZHOU Z R, et al. A quantum convolutional neural network on NISQ devices[J]. *AAPPS Bulletin*, 2022, 32: 1-11.
- [19] HAVLÍČEK V, CÓRCOLES A D, TEMME K, et al. Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces [J]. *Nature*, 2019, 567(7747): 209-212.
- [20] DALLAIRE-DEMERS P L, KILLORAN N. Quantum generative adversarial networks[J]. *Physical Review A*, 2018, 98(1): 012324.
- [21] 刘文杰, 赵胶胶, 张颖, 等. 一种量子条件生成对抗网络算法[J]. *电子学报*, 2022, 50(7): 1586-1593.
- LIU W J, ZHAO J J, ZHANG Y, et al. A quantum conditional generative adversarial network algorithm[J]. *Acta Electronica Sinica*, 2022, 50(7): 1586-1593. (in Chinese)
- [22] LIU W J, ZHAO J J, WU Q. A hybrid quantum-classical generative adversarial networks algorithm based on inherited layerwise learning with circle-connectivity circuit[J]. *Quantum Information Processing*, 2022, 21(11): 372.
- [23] LIU W, ZHANG Y, DENG Z, et al. A hybrid quantum-classical conditional generative adversarial network algorithm for human-centered paradigm in cloud[J]. *EURASIP Journal on Wireless Communications and Networking*, 2021, 2021(1): 1-17.
- [24] CHAKRABARTI A, SUR-KOLAY S, CHAUDHURY A. Linear nearest neighbor synthesis of reversible circuits by graph partitioning[EB/OL]. (2011)[2023]. <https://arxiv.org/abs/1112.0564>.
- [25] KANDALA A, MEZZACAPO A, TEMME K, et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets[J]. *Nature*, 2017, 549(7671): 242-246.
- [26] SCHULD M, BOCHAROV A, SVORE K M, et al. Circuit-centric quantum classifiers[J]. *Physical Review A*, 2020, 101(3): 032308.
- [27] SIM S, JOHNSON P D, ASPURU-GUZIK A. Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms[J]. *Advanced Quantum Technologies*, 2019, 2(12): 1900070.
- [28] HUBREGTSEN T, PICHLMEIER J, STECHER P, et al. Evaluation of parameterized quantum circuits: On the relation between classification accuracy, expressibility, and entangling capability[J]. *Quantum Machine Intelligence*, 2021, 3: 1-19.
- [29] ŻYCZKOWSKI K, SOMMERS H J. Average fidelity between random quantum states[J]. *Physical Review A*, 2005, 71(3): 032313.
- [30] KULLBACK S, LEIBLER R A. On information and sufficiency[J]. *The Annals of Mathematical Statistics*, 1951, 22(1): 79-86.
- [31] MEYER D A, WALLACH N R. Global entanglement in multiparticle systems[J]. *Journal of Mathematical Physics*, 2002, 43(9): 4273-4278.

附录 A 10种量子线路测量结果的概率分布情况

为了衡量不同拓扑结构的表达能力,对正文中10种量子线路单层、双层以及三层配置(共30个线路)进行了结果测量,其概率分布如图A1~A10所示.图A1与图A2为线型拓扑,图A3与图A4为环型拓扑,图A5与图A6为异构环型拓扑,图A7与图A8为全连接型拓扑,图A9与图A10为BR拓扑.在图中,选用Haar随机分布(橙色曲线)作为标准比较对象,蓝色为各线路测量结果概率分布.蓝色柱状图与橙色曲线拟合度越高代表该线路探索希尔伯特空间越均匀(即表达能力越强),同时KL离散值越低.

显然,基于 CR_x 门的全连接型拓扑结构线路(图A7)和BR拓扑结构线路(图A9)的概率分布与Haar曲线拟合度最高,即表达能力最强,其次是同样基于 CR_z 门的异构环型线路(图A5).同时,我们发现使用 CR_x 门构建的量子线路在表达能力方面始终高于由 CR_z 门构建的量子线路,所以目前在构造PQC线路时推荐使用 CR_x 门来构造量子线路.

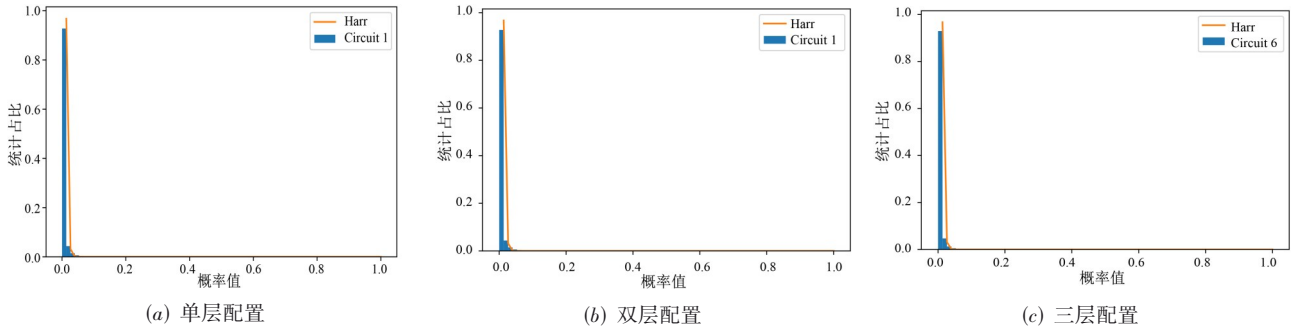


图 A1 线型拓扑-CRx

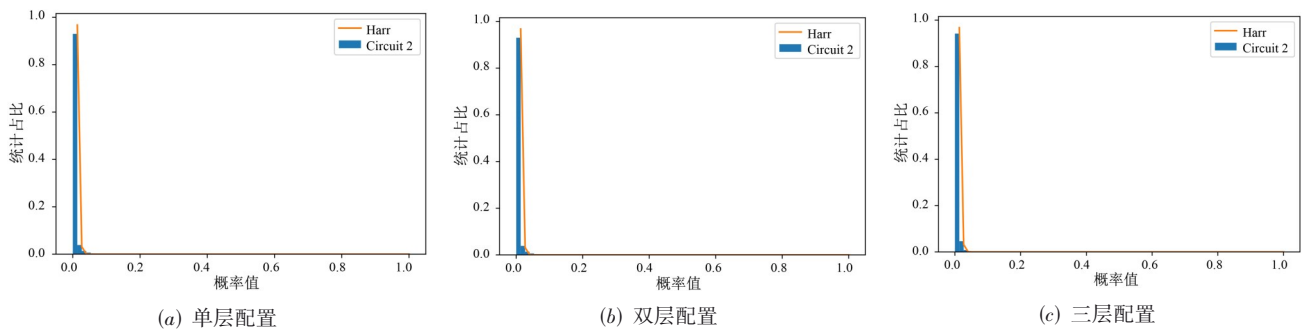


图 A2 线型拓扑-CRz

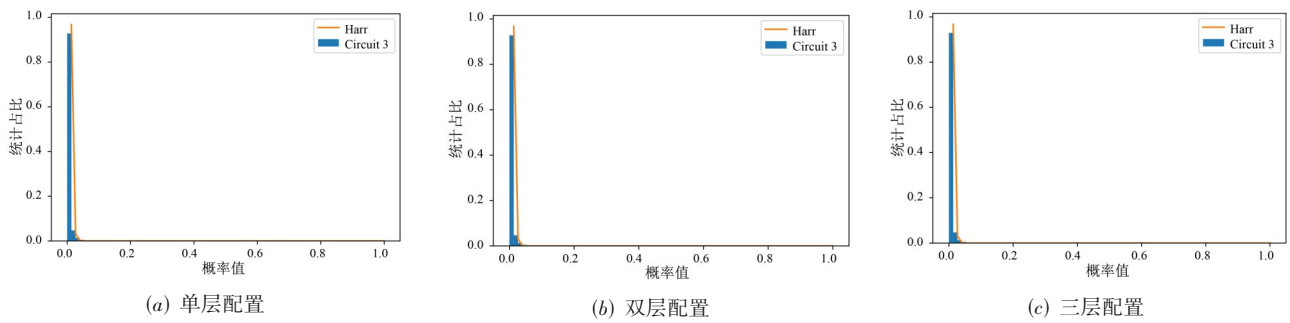


图 A3 环型拓扑-CRx

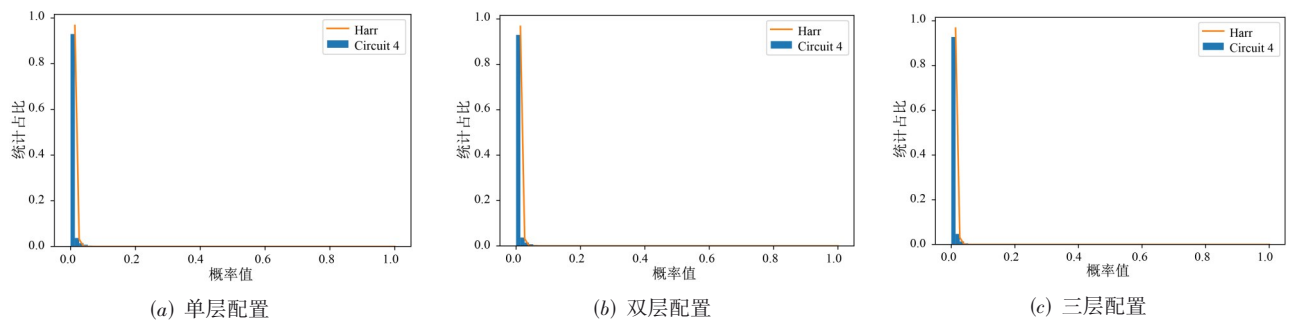


图 A4 环型拓扑-CRz

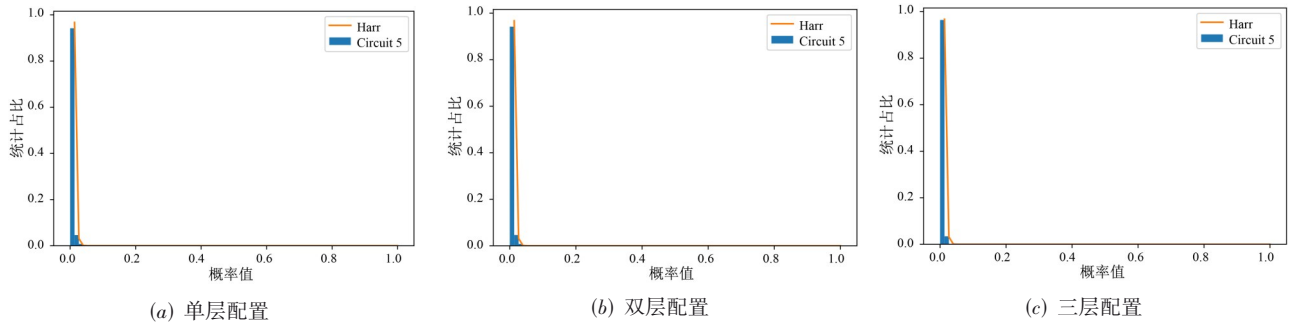


图 A5 异构环型拓扑-CRx

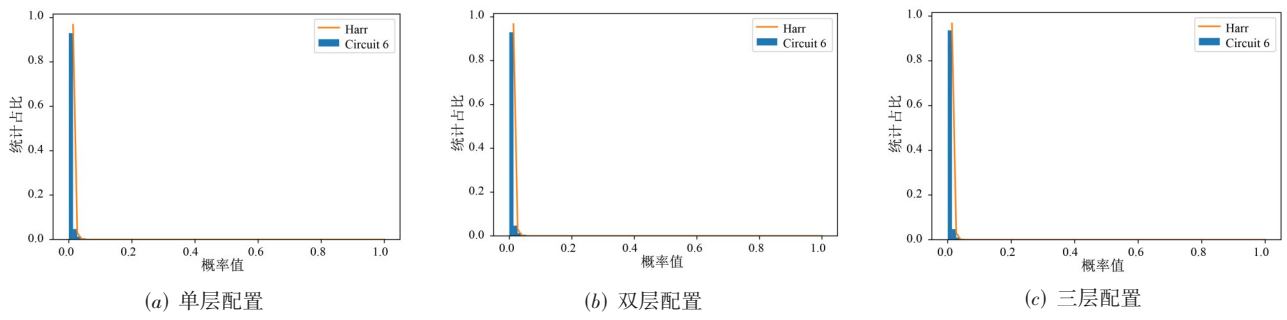


图 A6 异构环型拓扑-CRz

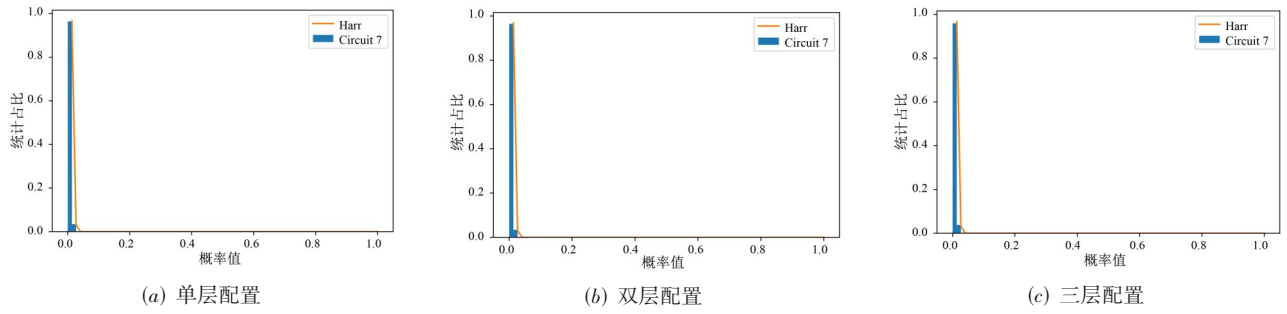


图 A7 全连接型拓扑-CRx

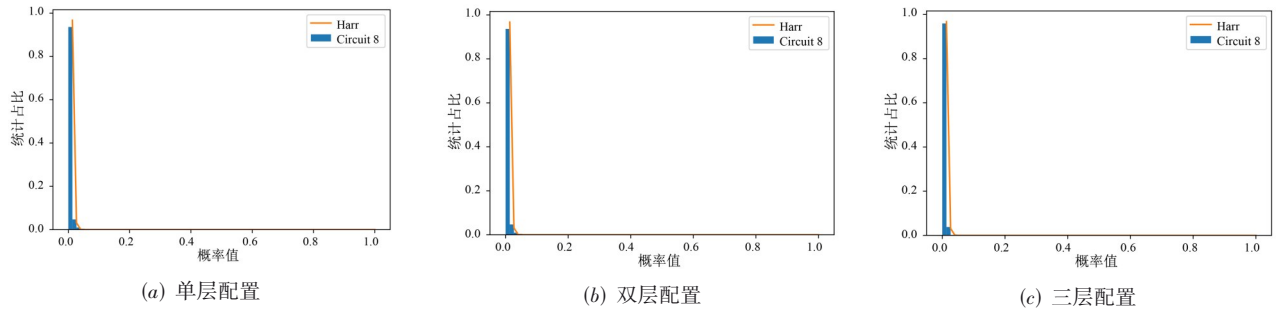


图 A8 全连接型拓扑-CRz

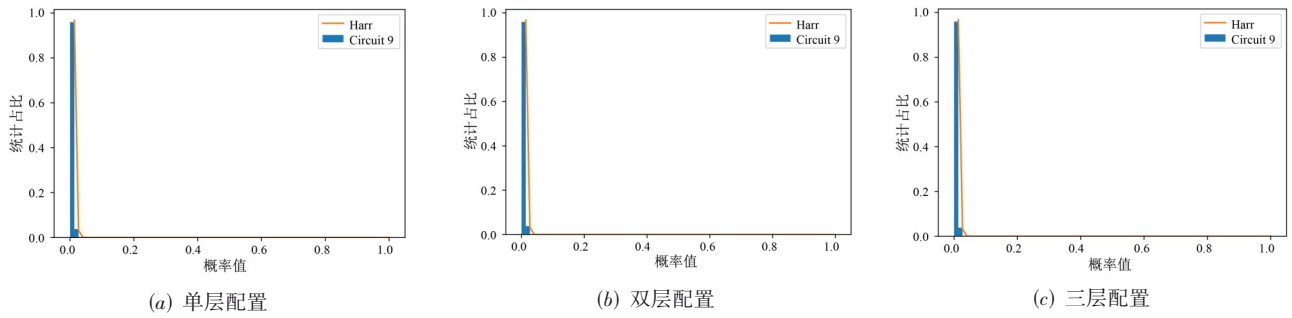


图 A9 BR 拓扑-CRx

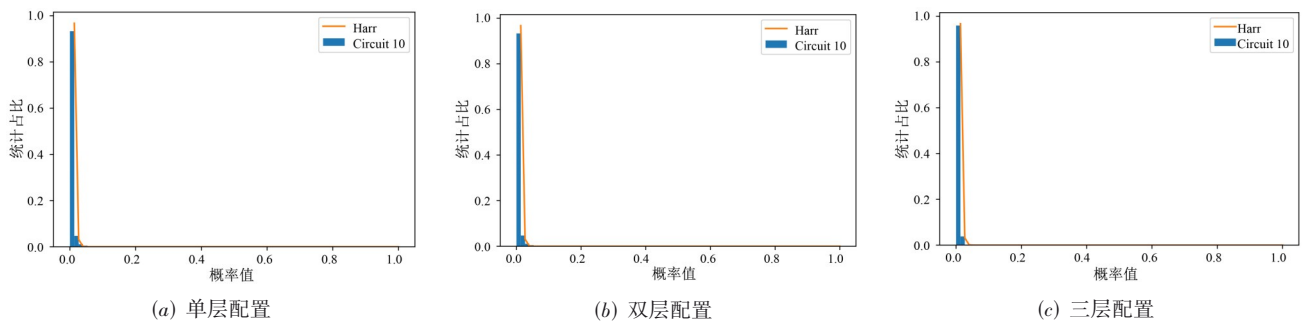


图 A10 BR 拓扑-CRz

作者简介



刘文杰 男, 1979 年 11 月出生, 湖北大冶人. 博士. 南京信息工程大学软件学院副教授、博士生导师. 研究方向为量子算法、量子机器学习、量子安全多方计算、深度学习与图神经网络等.
E-mail: wenjiel@163.com



王海彬 男, 1980 年 8 月出生, 江苏靖江人. 博士. 南京信息工程大学软件学院副教授、硕士生导师. 研究方向为量子机器学习、人工智能等.
E-mail: 001276@nuist.edu.cn



吴青山 男, 1999 年 5 月出生, 江苏扬州人. 南京信息工程大学软件学院硕士研究生. 主要研究方向为量子机器学习与量子算法.
E-mail: qingshanw2021@163.com



查颖 女, 1999 年 5 月出生, 江苏扬州人. 南京信息工程大学软件学院硕士研究生. 主要研究方向为量子机器学习与量子算法.
E-mail: 3578618336@qq.com