Tạp chí Khoa học Đại học Cần Thơ
Số chuyên đề: Công nghệ chiến lược - Động lực phát triển Đồng bằng sông Cửu Long (SDMD)
ISSN 1859-2333 | e-ISSN 2815-5599

DOI:10.22144/ctujos.2026.249

TỐI ƯU HÓA NHÂN LƯỢNG TỬ HUẤN LUYỆN ĐƯỢC VÀ SO SÁNH VỚI HỌC MÁY TRONG BÀI TOÁN PHÂN LOẠI HAI GIỐNG GẠO CÓ NGOẠI HÌNH GẦN TƯƠNG ĐỒNG VỚI LƯỢNG DỮ LIỆU HẠN CHẾ

Trương Tuấn Vũ, Lê Thị Yến Nhi, Lê Thái Hòa, Sơn Thị Mỹ Trâm và Nguyễn Thành Tiên*
Trường Khoa học Tự nhiên, Đại học Cần Thơ, Việt Nam
**Tác giả liên hệ (Corresponding author): nttien@ctu.edu.vn*

Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 04/08/2026
Sửa bài (Revised): 04/09/2026
Duyệt đăng (Accepted): 05/11/2026

Title: *Comparison of classical machine learning and optimized quantum kernels for limited-data classification of cammeo and osmancik rice grains*

Author(s): *Truong Tuan Vu, Le Thi Yen Nhi, Le Thai Hoa, Son Thi My Tram and Nguyen Thanh Tien**

Affiliation(s): *College of Natural Sciences, Can Tho University, Viet Nam*

TÓM TẮT

Nghiên cứu đánh giá nhân lượng tử trong phân loại gạo Cammeo và Osmancik có hình thái tương đồng với dữ liệu huấn luyện hạn chế. Sáu phép chia ngoài để mô tả; phân tích xác nhận dùng 10 phép chia ngoài, hai khởi tạo huấn luyện và N = 20, 40, 60, 80, 120, 200. Trong đối chứng ghép cặp, nhân Q1 huấn luyện được cao hơn Q1 cố định 5,35 điểm phần trăm tại N = 20 (p Holm = 0,0117). Q2 thích nghi cao hơn RBF-SVM ghép cặp 0,19 – 2,18 điểm phần trăm, có ý nghĩa sau Holm tại N = 80 và 200, nhưng chênh lệch vẫn trong biên tương đương ±2 điểm phần trăm. So với SVM tuyến tính ghép cặp, không cỡ mẫu nào có khác biệt có ý nghĩa; TOST hỗ trợ tương đương thực tế tại N = 40 – 200. Bỏ số hạng chống tập trung không đổi BA; số hạng này không được kích hoạt trong nhật ký đã kiểm tra. Kết quả cho thấy nhân lượng tử có tham số cạnh tranh trong cấu hình khảo sát, nhưng chưa chứng minh ưu thế lượng tử tổng quát.

Từ khóa: *Dữ liệu hạn chế, học máy lượng tử, nhân lượng tử, phân loại gạo, tối ưu hóa mạch*

ABSTRACT

This study evaluates quantum kernels for classifying morphologically overlapping Cammeo and Osmancik rice grains under limited training data. Six outer splits were retained for the broad descriptive benchmark; confirmatory analyses used 10 outer splits, two training seeds, and N = 20, 40, 60, 80, 120, and 200. In the matched ablation, the trainable quantum kernel Q1 exceeded its fixed counterpart by 5.35 percentage points at N = 20 (Holm-adjusted p = 0.0117). The adaptive quantum kernel Q2 exceeded the matched RBF-SVM by 0.19 – 2.18 percentage points and was significant after Holm correction at N = 80 and 200, although the differences at these sizes remained small within the practical equivalence margin of ±2 percentage points. No training size showed a significant difference from the matched linear SVM; TOST supported practical equivalence for N = 40 – 200. Removing the anti-concentration term did not change balanced accuracy; the term was inactive in the inspected training logs. The parameterized quantum kernels were competitive under the evaluated protocol, but the results do not establish a general quantum advantage.

Keywords: *Circuit optimization, limited data, quantum kernel, quantum machine learning, rice classification*

1. GIỚI THIỆU

Học máy (machine learning) đã trở thành một công cụ quan trọng trong khoa học tính toán và các khoa học khác như khoa học vật liệu, từ việc xây dựng mô hình thay thế đến dự đoán cấu trúc và khám phá vật liệu mới (Butler et al., 2018; Schmidt et al., 2019; Merchant et al., 2023). Tại Việt Nam, các thế tương tác học máy cũng đã được ứng dụng cho mô phỏng động lực học vật liệu hai chiều (Le et al., 2026). Song song với hướng phát triển đó, học máy lượng tử (quantum machine learning, QML) nghiên cứu việc sử dụng trạng thái, mạch và phép đo lượng tử để xây dựng mô hình học từ dữ liệu (Schuld et al., 2015; Biamonte et al., 2017; Cerezo et al., 2021).

Trong phương pháp nhân lượng tử (quantum kernel method), vectơ dữ liệu $\mathbf{x}$ được mã hóa thành trạng thái $|\phi(\mathbf{x})\rangle$ và độ tương đồng được xác định trong không gian Hilbert (Havlíček et al., 2019; Schuld & Killoran, 2019; Park et al., 2020). Nhiều mô hình QML có giám sát có thể được diễn giải dưới dạng phương pháp nhân, trong đó chiến lược mã hóa quyết định thiên kiến quy nạp và năng lực biểu diễn của mô hình (Schuld, 2021; Schuld et al., 2021). Một số bài toán có cấu trúc đã cho thấy khả năng tăng tốc lượng tử chặt chẽ về lý thuyết (Liu et al., 2021); tuy nhiên, kết quả trên dữ liệu cổ điển thực nghiệm phụ thuộc mạnh vào dữ liệu, kiến trúc mạch, phép đo và quy trình đánh giá.

Không gian Hilbert có số chiều lớn không tự động tạo ra một nhân hữu ích. Mạch sâu có thể gặp vùng bằng phẳng cằn cỗi (barren plateau), mạch quá biểu diễn hoặc phép đo không phù hợp có thể dẫn đến hiện tượng tập trung nhân (kernel concentration) (McClean et al., 2018; Sim et al., 2019; Huang et al., 2021; Thanasilp et al., 2024). Kết quả các nghiên cứu đối sánh gần đây cũng cho thấy kết luận về hiệu quả QML thay đổi đáng kể theo tập dữ liệu, chuẩn cổ điển, ngân sách lựa chọn siêu tham số và cách ghép cặp thí nghiệm (Abbas et al., 2021; Slattery et al., 2023; Bowles et al., 2024; Schnabel & Roth, 2025; Kakavand et al., 2026). Vì vậy, một đánh giá đáng tin cậy cần được kiểm soát rò rỉ dữ liệu, sử dụng chuẩn cổ điển đủ mạnh và phân biệt hiệu năng thực nghiệm với ưu thế tính toán lượng tử.

Để cải thiện bản đồ đặc trưng lượng tử (quantum feature map), các phương pháp như căn chỉnh nhân – mục tiêu, nhân nhúng lượng tử có thể huấn luyện, tái nạp dữ liệu (data re-uploading), nhân lượng tử chiếu (projected quantum kernel) và tối ưu căn chỉnh bằng gradient ngẫu nhiên đã được đề xuất trong các nghiên cứu trước đó (Cristianini et al., 2002; Pérez-Salinas et al., 2020; Huang et al., 2021; Hubregtsen et al., 2022; Gentinetta et al., 2023). Các hướng này chuyển trọng tâm từ việc sử dụng một mạch mặc định sang đồng thiết kế dữ liệu, phép mã hóa, tương tác qubit và phép đo độ tương đồng.

Việc phân loại hạt gạo từ đặc trưng hình thái có ý nghĩa đối với kiểm định chất lượng và tự động hóa sau thu hoạch. Bộ dữ liệu Cammeo–Osmancik đã được khảo sát bằng nhiều thuật toán học máy cổ điển (Cinar & Koklu, 2019; Çelik, 2024), mạng tích chập trên dữ liệu không gian – phổ hoặc mô hình lai đã được sử dụng trong các nghiên cứu khác để nhận dạng giống và độ thuần hạt gạo (Chatnuntawech et al., 2018; Phan et al., 2024). Tuy nhiên, bằng chứng về nhân lượng tử trên dữ liệu nông nghiệp dạng bảng, đặc biệt trong chế độ chỉ có vài chục mẫu huấn luyện, còn hạn chế.

Nghiên cứu này được thực hiện nhằm: (i) so sánh các biểu diễn cổ điển và lượng tử trong chế độ dữ liệu hạn chế, (ii) định lượng riêng tác động của huấn luyện căn chỉnh nhân – mục tiêu bằng đối chứng Q1 cố định ghép cặp, (iii) so sánh Q2 với RBF-SVM và SVM tuyến tính trên đúng bốn đặc trưng do Q2 lựa chọn, (iv) tách ảnh hưởng của số hạng chống tập trung trong hàm mục tiêu Q2 và (v) xác định giới hạn của các kiến trúc hiện tại. Đóng góp chính là một quy trình đánh giá chống rò rỉ dữ liệu, trong đó tập kiểm tra được khóa trước mọi bước chuẩn hóa, lựa chọn đặc trưng, lựa chọn mạch và tối ưu siêu tham số.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Dữ liệu và đặc trưng hình thái

Bộ dữ liệu Rice (Cammeo and Osmancik) của UCI Machine Learning Repository gồm 3.810 mẫu hạt gạo: 1.630 mẫu Cammeo và 2.180 mẫu Osmancik. Dữ liệu không có giá trị thiếu, hàng trùng lặp hoặc nhóm đặc trưng giống nhau nhưng mang nhãn xung đột. Bảy biến đầu vào gồm diện tích (Area), chu vi (Perimeter), độ dài trục lớn (Major Axis Length), độ dài trục nhỏ (Minor Axis Length), độ lệch tâm (Eccentricity), diện tích bao lồi (Convex Area) và mức chiếm khung (Extent) (UCI Machine Learning Repository, 2019). Trong nghiên cứu, các biến đã được trích xuất từ ảnh được sử dụng; do đó,

kết quả phản ánh phân loại dữ liệu hình thái dạng bảng, không phải nhận dạng trực tiếp ảnh hạt gạo.

Hình 1 minh họa sự tương đồng về dạng thuôn dài và hình dạng tổng thể giữa hai lớp. Bốn đặc trưng dẫn xuất được tính từ các biến gốc.

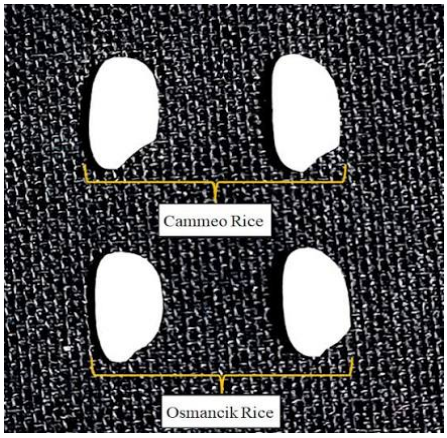
Hình 2 cho thấy Area, Perimeter, Major Axis Length và Convex Area tương quan mạnh, trong khi hai lớp vẫn chồng lấn đáng kể sau phép phân tích thành phần chính (principal component analysis, PCA) (Pearson, 1901). Vì vậy, thông tin phân biệt nhiều khả năng nằm trong tổ hợp nhiều biến thay vì một ngưỡng đơn biến rõ ràng.

Ghi chú: Hình được cắt và điều chỉnh từ Hình 1 của Çelik (2024), theo giấy phép CC BY 4.0.

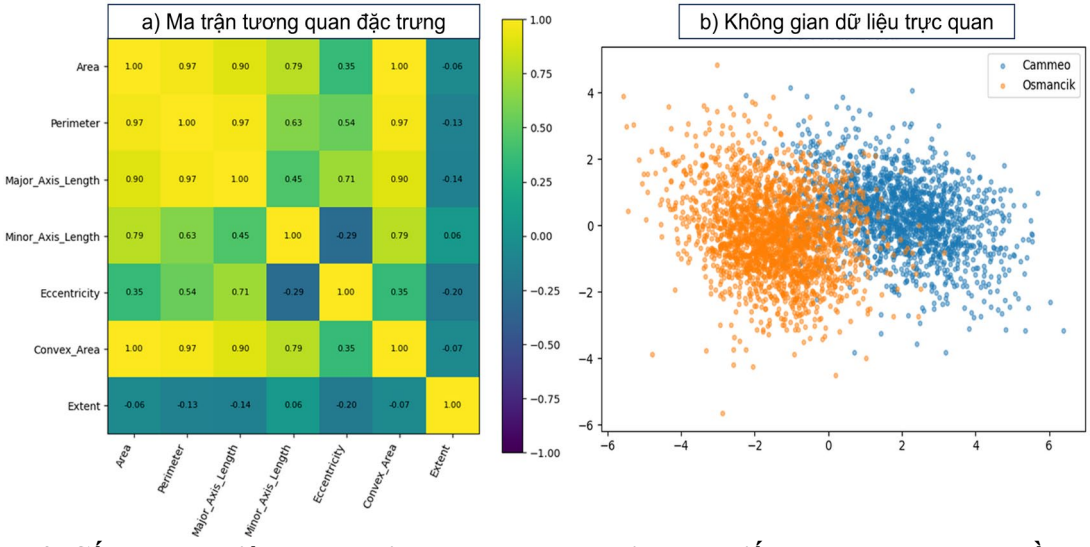
$$AR = \frac{L_{major}}{L_{minor}} \quad (1a), \qquad Cir = \frac{4\pi A}{P^2} \quad (1b)$$

$$Con = \frac{A}{A_{Convex}} \quad (1c), \qquad Elo = 1 - \frac{L_{minor}}{L_{major}} \quad (1d)$$

Trong các phương trình (1a) – (1d), AR, Cir, Con và Elo lần lượt là tỷ số trục (aspect ratio), độ tròn (circularity), tỷ số lồi (convexity ratio) và độ kéo dài (elongation). Năm tập ứng viên, mỗi tập gồm bốn đặc trưng, được xác định trước: (1) Area–Major Axis Length–Eccentricity–Extent; (2) Area–Perimeter–Major Axis Length–Minor Axis Length; (3) Eccentricity–Extent–AR–Cir; (4) Area–Convex Area–Con–Cir; và (5) Major Axis Length–Minor Axis Length–AR–Elo. Vì Elo = 1 − 1/AR nên Elo và AR không mang thông tin độc lập. Cả hai được giữ trong tập ứng viên (5) như hai cách tham số hóa phi tuyến của cùng tỷ số hình học khi mã hóa góc, kết quả nghiên cứu không khẳng định việc giữ đồng thời hai biến này tạo lợi ích độc lập.



Hình 1. Hình thái đại diện của hạt gạo Cammeo và Osmancik



Hình 2. Cấu trúc dữ liệu hình thái: tương quan cao giữa các biến kích thước và sự chồng lấn của hai lớp trên hai thành phần chính đầu tiên

2.2. Thiết kế thí nghiệm dữ liệu hạn chế

Bài toán chuẩn mô tả rộng ban đầu dùng sáu giá trị khởi tạo ngẫu nhiên để tạo sáu phép chia ngoài. Các so sánh xác nhận của Q1, Q2 và các đối chứng ghép cặp được mở rộng lên 10 phép chia ngoài độc lập. Trong mỗi phép chia, 200 mẫu của mỗi lớp được giữ làm tập kiểm tra cân bằng gồm 400 mẫu và được khóa hoàn toàn. Từ phần dữ liệu còn lại, các tập huấn luyện cân bằng có N = 20, 40, 60, 80, 120 và 200 được lấy với các giá trị khởi tạo huấn luyện độc lập.

Trong bài toán chuẩn rộng ở Bảng 2, các mô hình cổ điển và nhân lượng tử cố định Q0-K có 30 lượt tại mỗi N (6 phép chia ngoài × 5 khởi tạo huấn

luyện); Q1, Q2 và Q0-V dùng hai khởi tạo trên mỗi phép chia. Phân tích xác nhận ở Bảng 3 dùng 20 lượt ghép cặp tại mỗi N (10 phép chia ngoài × 2 khởi tạo) cho Q1, Q1 cố định ghép cặp, Q2, Q2 không có số hạng chống tập trung, RBF-SVM ghép cặp và SVM tuyến tính ghép cặp. Q0-V chỉ được đánh giá tại N = 40, 80 và 200 trong Bài toán chuẩn rộng.

Đối với các chuẩn cổ điển ở Bảng 2, Q0-K và Q1, chuẩn hóa, lựa chọn đặc trưng và lựa chọn siêu tham số được thực hiện bằng xác thực chéo phân tầng ba phần bên trong (Varma & Simon, 2006; Cawley & Talbot, 2010). Đối với Q2, tập đặc trưng và số lần tái nạp dữ liệu được sàng lọc bằng một phép chia phát triển–thẩm định phân tầng, hoàn toàn bên trong tập huấn luyện ngoài. Sau sàng lọc, phép chuẩn hóa và nhân Q2 được học từ tập huấn luyện ngoài, C được chọn bằng xác thực chéo ba phần trên ma trận nhân đã học. Với hai SVM ghép cặp, phép chuẩn hóa được học từ tập huấn luyện ngoài trước khi dò siêu tham số bằng xác thực chéo. Do đó, vòng chọn siêu tham số của nhóm này chưa tái huấn luyện toàn bộ phép biến đổi trong từng phần xác thực chéo. Tập kiểm tra ngoài được giữ tách biệt và chỉ dùng đánh giá sau khi cấu hình đã được khóa.

2.3. Phân cấp mô hình và quy trình đánh giá

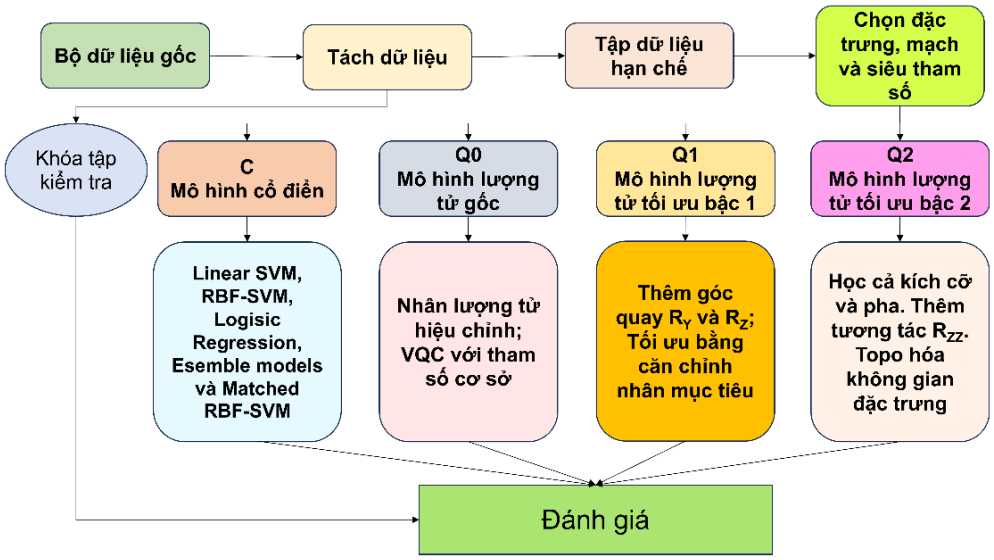
Các mô hình được chia thành bốn mức theo vai trò, không phải theo thứ tự hiệu năng đơn điệu. Nhóm C gồm các chuẩn cổ điển. Q0 gồm nhân lượng tử cố định (Q0-K) và bộ phân loại lượng tử biến phân (Q0-V). Q1 là nhân lượng tử huấn luyện được bằng căn chỉnh nhân–mục tiêu. Q2 là nhân lượng tử thích nghi và các biến thể dẫn xuất. Q2 được huấn luyện độc lập với Q1 và không sử dụng tham số đã học của Q1.

2.4. Các chuẩn học máy cổ điển

Các chuẩn gồm hồi quy logistic (logistic regression) (Cox, 1958), máy vectơ hỗ trợ (support vector machine, SVM) tuyến tính và SVM dùng hàm cơ sở xuyên tâm (radial basis function, RBF) (Boser et al., 1992; Cortes & Vapnik, 1995), rừng ngẫu nhiên (random forest) (Breiman, 2001), mạng perceptron nhiều lớp (multilayer perceptron, MLP) huấn luyện bằng lan truyền ngược (Rumelhart et al., 1986), cây cực ngẫu nhiên (extremely randomized trees, Extra Trees) (Geurts et al., 2006) và tăng cường gradient dạng biểu đồ (histogram gradient boosting) (Friedman, 2001). Các mô hình được triển khai bằng scikit-learn (Pedregosa et al., 2011). RBF-SVM được chọn làm đối chứng nhân phi tuyến trực tiếp, SVM tuyến tính ghép cặp cũng được huấn luyện trên đúng bốn đặc trưng do Q2 lựa chọn trong từng phép chia. Hai đối chứng ghép cặp được dò siêu tham số bằng GridSearchCV với xác thực chéo phân tầng ba phần có xáo trộn, chọn theo BA trung bình và huấn luyện lại trên toàn bộ tập huấn luyện ngoài. RBF-SVM dùng $C \in \{0{,}1; 1; 10; 100\}$ và $\gamma \in \{0{,}05; 0{,}1; 0{,}5; 1; 2\}$; SVM tuyến tính dùng $C \in \{0{,}01; 0{,}1; 1; 10; 100\}$.

Bảng 1. Phân cấp các mô hình và vai trò trong nghiên cứu

Nhóm	Mô hình	Thành phần được lựa chọn hoặc tối ưu	Vai trò
C	Các mô hình học máy cổ điển, gồm RBF-SVM và SVM tuyến tính ghép cặp	Đặc trưng, chuẩn hóa và siêu tham số cổ điển trong xác thực chéo bên trong	Chuẩn tham chiếu và đối chứng ghép cặp
Q0-K	Nhân lượng tử cố định (Q0-K)	Số lần mã hóa, cấu trúc liên kết tuyến tính/vòng, giới hạn góc và C của SVM; không học tham số mạch theo nhãn	Phương pháp nhân lượng tử cơ sở
Q0-V	Bộ phân loại lượng tử biến phân (Q0-V)	Trọng số mạch, hệ số đầu ra và thiên lệch	Đối chứng mô hình lai
Q1	Nhân lượng tử huấn luyện được (Q1)	Góc quay RY(θ) được tối ưu bằng căn chỉnh nhân–mục tiêu; đối chứng Q1 cố định giữ nguyên toàn bộ cấu hình nhưng không tối ưu θ	Đánh giá lợi ích của việc học bản đồ đặc trưng
Q2	Nhân lượng tử thích nghi (Q2)	Tập bốn đặc trưng, một/hai lần tái nạp dữ liệu, hệ số co giãn, dịch pha, RZZ và lớp quay tổng quát; cấu trúc tuyến tính cố định; phân tích tách phần loại riêng số hạng chống tập trung	Đánh giá biểu diễn thích nghi và các biến thể lai



Hình 3. Phân cấp mô hình và quy trình đánh giá chống rò rỉ dữ liệu

Ghi chú: C, Q0, Q1 và Q2 biểu thị vai trò và mức độ phức tạp của thiết kế, không biểu thị một chuỗi tăng hiệu năng bắt buộc.

2.5. Mô hình lượng tử cơ sở Q0

Với mạch mã hóa $U_{\mathbf{\theta}}(\mathbf{x})$, nhân độ trung thực (fidelity kernel) được xác định bởi

$$K_{\mathbf{\theta}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \left|\langle 0 \left| U_{\mathbf{\theta}}^{\dagger}(\mathbf{x}') U_{\mathbf{\theta}}(\mathbf{x}) \right| 0 \rangle\right|^2. \quad (2)$$

Q0-K sử dụng phép nhúng góc (AngleEmbedding) theo trục Y, các cổng CZ giữa qubit lân cận theo cấu trúc tuyến tính hoặc vòng, rồi phép nhúng theo trục Z. Khối này được lặp một hoặc hai lần; giới hạn góc là $\pi/2$ hoặc π. Bốn hoặc bảy đặc trưng được chọn bằng thông tin tương hỗ (mutual information) bên trong từng phần huấn luyện. Ma trận nhân được đưa vào SVM với $C \in \{0{,}1; 1; 10; 100\}$ (Havlíček et al., 2019; Schuld & Killoran, 2019; Park et al., 2020).

Q0-V là bộ phân loại lượng tử biến phân (variational quantum classifier, VQC) bốn qubit. Dữ liệu được nhúng một lần bằng AngleEmbedding theo trục Y, sau đó đi qua hai lớp vướng víu mạnh (StronglyEntanglingLayers). Kỳ vọng Pauli Z trên qubit thứ nhất được biến đổi tuyến tính thành giá trị logit (logit). Mô hình dùng thuật toán Adam, tốc độ học 0,02, suy giảm trọng số 10^{-4}, lô nhỏ (mini-batch) 16 mẫu, tối đa 80 chu kỳ (epoch) và dừng sớm (early stopping) (Kingma & Ba, 2015; Mitarai et al., 2018; Sweke et al., 2020; Cerezo et al., 2021).

2.6. Nhân lượng tử huấn luyện được Q1

Q1 sử dụng bốn qubit, hai lớp và cấu trúc tuyến tính. Trong mỗi lớp, dữ liệu được nhúng theo trục Y, mỗi qubit nhận thêm phép quay $R_Y(\theta_{\ell j})$ có thể huấn luyện, các cổng CZ cố định tạo tương tác giữa qubit lân cận; sau đó, dữ liệu được nhúng theo trục Z. Các tham số $\mathbf{\theta}$ được tối ưu để tăng căn chỉnh nhân – mục tiêu.

$$A(K, \mathbf{y}) = \frac{\langle K, \mathbf{y}\mathbf{y}^{\mathrm{T}} \rangle_F}{\| K \|_F \, \| \mathbf{y}\mathbf{y}^{\mathrm{T}} \|_F}, \quad (3)$$

Trong phương trình (3), nhãn được ánh xạ sang $\{-1, +1\}$. Thuật toán Adam có tốc độ học 0,03, tối đa 30 bước và dừng sớm, tối đa 60 mẫu cân bằng được dùng trong phép căn chỉnh (Cristianini et al., 2002; Kingma & Ba, 2015; Hubregtsen et al., 2022).

Đối chứng Q1 cố định ghép cặp sử dụng cùng bốn đặc trưng được chọn trong từng phần xác thực chéo, cùng chuẩn hóa và ánh xạ góc, hai lớp, cấu trúc CZ tuyến tính, khởi tạo tham số và quy trình lựa chọn C như Q1, nhưng khóa θ tại giá trị khởi tạo và không tối ưu căn chỉnh. Vì vậy, chênh lệch Q1 – Q1 cố định là phép tách phần trực tiếp cho bước huấn luyện căn chỉnh nhân–mục tiêu.

2.7. Nhân lượng tử thích nghi Q2

Q2 học đồng thời hệ số co giãn, dịch pha và tương tác giữa đặc trưng. Với đặc trưng đã chuẩn hóa x_j, mỗi lớp áp dụng

$$R_Y(a_{\ell j} x_j + b_{\ell j})\, R_Z(c_{\ell j} x_j + d_{\ell j}), \quad (4)$$

tiếp theo là tương tác giữa qubit lân cận

$$R_{ZZ}(\gamma_{\ell jk} x_j x_k), \quad (5)$$

và một phép quay tổng quát $\mathrm{Rot}(\alpha_{\ell j}, \beta_{\ell j}, \delta_{\ell j})$ trên từng qubit. Hai ứng viên có một hoặc hai lần tái nạp dữ liệu, đều sử dụng cấu trúc liên kết tuyến tính cố định. Tập bốn đặc trưng và số lớp được sàng lọc trên phép chia phát triển – thẩm định bên trong; cấu hình được tối ưu cuối trong tối đa 45 bước với hai lần khởi tạo độc lập.

Hàm mục tiêu Q2 kết hợp căn chỉnh nhân–mục tiêu có định tâm với số hạng chống tập trung của các phần tử ngoài đường chéo:

$$\mathcal{L}_{Q_2} = -A_C(k, y) + 0{,}10P_{Conc} \qquad (6)$$

$$P_{conc} = \left[max\left(0;\ 0{,}08 - \sigma_{off}\right)\right]^2 + \left[max\left(0;\ \mu_{off} - 0{,}90\right)\right]^2$$

Ở đây, $H = I - 11^T/n$, $Kc = HKH$, $Tc = HyyTH$ và $Ac(K,y) = \langle Kc,Tc\rangle F/(\|Kc\|F\|Tc\|F)$. Các đại lượng μ_{off} và σ_{off} lần lượt là trung bình và độ lệch chuẩn của phần tử ngoài đường chéo. Ngưỡng 0,90 hạn chế trung bình quá cao, còn ngưỡng 0,08 hạn chế độ phân tán quá thấp. Hệ số của P_{conc} là 0,10. Q2 dùng AdamW với tốc độ học 0,025 và suy giảm trọng số 10^{-4}, suy giảm trọng số là điều chuẩn tách rời của bộ tối ưu và không được cộng trực tiếp vào hàm mất mát (6) (Loshchilov & Hutter, 2019; Slattery et al., 2023; Thanasilp et al., 2024).

Ngoài nhân Q2, việc khảo sát nhân lai được tiến hành bằng tổ hợp lồi giữa nhân lượng tử và nhân RBF cổ điển:

$$K_{\mathrm{lai}} = \beta K_Q + (1 - \beta)K_{\mathrm{RBF}}, \quad (7)$$

Trong (7), $\beta \in \{0; 0{,}25; 0{,}50; 0{,}75; 1\}$ được chọn cùng C và γ bằng xác thực chéo ba phần trên các biểu diễn đã học từ tập huấn luyện ngoài. Biến thể nhân lượng tử chiếu dùng đặc trưng kỳ vọng Pauli cục bộ với SVM-RBF. Biến thể kết hợp đặc trưng lượng tử – cổ điển nối các đặc trưng kỳ vọng này với bốn đặc trưng cổ điển đã chuẩn hóa, rồi dùng quy trình chuẩn hóa và SVM-RBF; C và γ được dò bằng xác thực chéo. Các biến thể này chỉ được báo cáo trong đối sánh mô tả. Đối chứng RBF-SVM ghép cặp với Q2 và SVM tuyến tính ghép cặp với Q2 sử dụng đúng bốn đặc trưng được quy trình Q2 lựa chọn trong từng phép chia. Phân tích tách phần Q2 không có số hạng chống tập trung đặt hệ số của P_{conc} bằng 0 nhưng vẫn giữ hệ số suy giảm trọng số AdamW bằng 10^{-4}.

2.8. Chỉ số, kiểm định và thiết lập tính toán

Chỉ số chính là độ chính xác cân bằng (balanced accuracy, BA) (Brodersen et al., 2010). Độ chính xác, độ chính xác dương, độ nhạy, F1 và diện tích dưới đường cong đặc trưng hoạt động máy thu (receiver operating characteristic area under the curve, ROC-AUC) được lưu bổ sung (Fawcett, 2006). Bảng 2 dùng khoảng tin cậy bootstrap phân cấp 95% từ 3.000 lần lấy mẫu, các so sánh xác nhận với 10 phép chia ngoài ở Bảng 3 dùng 10.000 lần lấy mẫu, luôn lấy lại phép chia ngoài trước khi lấy các lượt chạy bên trong (Efron, 1979).

Các so sánh xác nhận được thực hiện trên 10 chênh lệch trung bình theo phép chia ngoài bằng kiểm định Wilcoxon (Wilcoxon, 1945). Giá trị p được hiệu chỉnh Holm theo sáu cỡ mẫu trong từng nhóm so sánh (Holm, 1979). Hai kiểm định một phía (two one-sided tests, TOST) với biên ±2 điểm phần trăm được dùng để đánh giá tương đương thực tế (Schuirmann, 1987; Lakens, 2017). Đơn vị độc lập của Wilcoxon và TOST là phép chia ngoài, hai khởi tạo huấn luyện được lấy trung bình trong mỗi phép chia.

Các mạch được mô phỏng bằng PennyLane 0.45.1 và PyTorch trên CPU; mô hình cổ điển dùng scikit-learn 1.7.2 (Pedregosa et al., 2011; Bergholm et al., 2018; Paszke et al., 2019). Phân tích số lần đo hữu hạn chỉ áp dụng cho Q0-K bảy qubit ở phép chia ngoài và giá trị khởi tạo huấn luyện đầu tiên. Mỗi phần tử nhân chính xác được lấy mẫu nhị thức với 256, 1.024 hoặc 4.096 lần đo (shot), lặp Monte Carlo 10 lần. Phân tích này không bao gồm nhiễu cổng, nhiễu đọc hoặc phần cứng lượng tử.

2.9. Dữ liệu và mã nguồn

Bộ dữ liệu Rice (Cammeo and Osmancik) được công bố công khai tại UCI Machine Learning Repository theo DOI 10.24432/C5MW4Z. Notebook, cấu hình tính toán và các tệp kết quả được cung cấp khi có yêu cầu qua tác giả liên hệ (nttien@ctu.edu.vn). Sáu giá trị khởi tạo phép chia ngoài của đối sánh mô tả là {2026; 2031; 2036; 2041; 2046; 2051}; phân tích xác nhận bổ sung {2056; 2061; 2066; 2071}. Giá trị khởi tạo lấy mẫu huấn luyện là {0; 1; 2; 3; 4} cho các chuẩn cổ điển và Q0-K trong đối sánh mô tả, và {0; 1} cho Q1, Q2, Q0-V cùng các đối chứng tương ứng. Với cỡ mẫu N, giá trị khởi tạo lấy mẫu và mô hình được tạo bằng 100000 × giá trị khởi tạo phép chia ngoài + 100 × giá trị khởi tạo huấn luyện + N. Q1 dùng thêm 10000 × (j + 1) cho phần xác thực chéo j = 0, 1, 2; hai lần khởi tạo tối ưu cuối của Q2 cách nhau 1000. Danh sách và quy tắc đầy đủ được lưu trong notebook.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

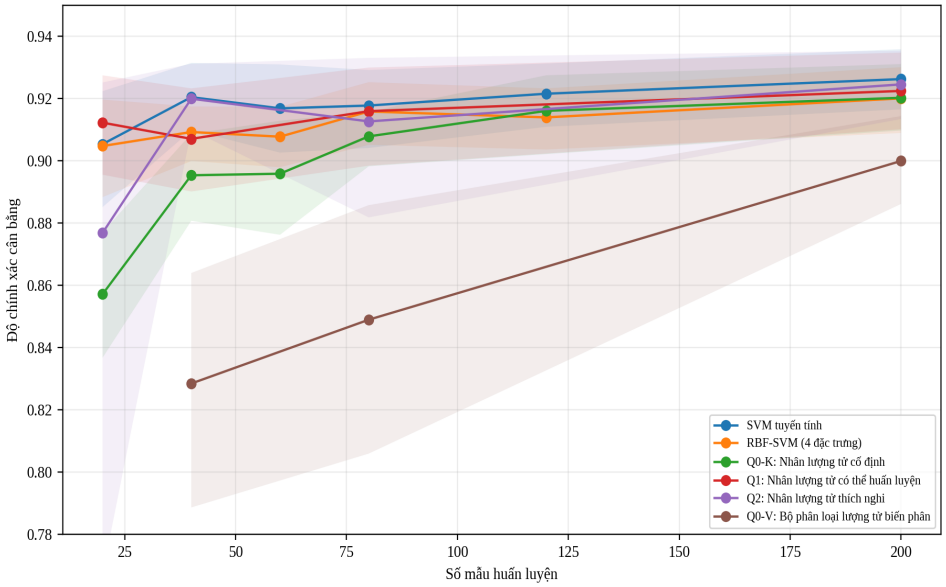
3.1. Bài toán chuẩn mô tả và đối chứng ghép cặp của Q1

Bảng 2 giữ lại bài toán chuẩn mô tả rộng với sáu phép chia ngoài để cho thấy bối cảnh hiệu năng của các họ mô hình. Tại N = 20, Q0-K đạt 85,72% và Q1 đạt 91,23%, nhưng chênh lệch 5,51 điểm phần trăm này không được quy riêng cho việc huấn luyện căn chỉnh vì Q0-K và Q1 còn khác cấu hình. Tác động của huấn luyện Q1 được đánh giá bằng đối chứng Q1 cố định ghép cặp trong Bảng 3.

Bảng 2. Độ chính xác cân bằng trung bình và khoảng tin cậy 95% trong bài toán chuẩn mô tả rộng với sáu phép chia ngoài

Mô hình	N = 20	N = 40	N = 80	N = 200
SVM tuyến tính	90,54 [88,52; 92,24]	92,05 [90,99; 93,15]	91,78 [90,42; 92,92]	92,63 [91,66; 93,59]
RBF-SVM (4F-toàn cục)	90,48 [88,84; 91,97]	90,93 [90,00; 91,75]	91,59 [90,52; 92,53]	92,01 [90,90; 93,01]
Q0-K: nhân cố định (4Q)	85,72 [83,68; 87,71]	89,54 [88,08; 90,87]	90,79 [89,83; 91,58]	92,03 [90,98; 93,11]
Q1: nhân huấn luyện được (4Q)	91,23 [89,56; 92,75]	90,71 [89,02; 92,33]	91,60 [89,85; 93,00]	92,25 [91,02; 93,48]
Q2: nhân thích nghi (4Q)	87,69 [76,75; 92,52]	92,00 [91,00; 93,12]	91,27 [88,19; 93,31]	92,46 [91,35; 93,54]
Q0-V: bộ phân loại biến phân (4Q)	–	82,85 [78,87; 86,40]	84,90 [80,60; 88,58]	90,00 [88,62; 91,44]

Ghi chú: F là số đặc trưng, Q là số qubit. Giá trị trong ngoặc vuông là khoảng tin cậy bootstrap phân cấp 95%. RBF-SVM (4F-toàn cục) ở Bảng 2 là mô hình tham chiếu được chọn trong Bài toán chuẩn rộng và khác với RBF-SVM ghép cặp với Q2 ở Bảng 3, vốn dùng đúng tập đặc trưng do Q2 chọn trong từng phép chia.



Hình 4. Đường học của các mô hình đại diện trong chế độ dữ liệu hạn chế

Ghi chú: Dải mờ biểu diễn khoảng tin cậy 95%.

Trong bài toán chuẩn mô tả, Q1 đạt cùng vùng hiệu năng với các chuẩn cổ điển mạnh nhưng không vượt tất cả chuẩn ở mọi cỡ mẫu. Q2 cũng không tạo một chuỗi cải thiện đơn điệu so với Q1. Bảng 2 trình bày kết quả đối sánh mô tả giữa các mô hình học máy cổ điển và lượng tử trên sáu phép chia dữ liệu ngoài độc lập, nhằm cung cấp cái nhìn tổng quan về hiệu năng phân loại trong điều kiện dữ liệu huấn luyện hạn chế. Tuy nhiên, do các mô hình có thể khác nhau về đặc trưng đầu vào và cấu hình, các chênh lệch hiệu năng trong Bảng 2 không được sử

dụng để khẳng định ưu thế thống kê của một phương pháp. Để đánh giá chặt chẽ hơn, Bảng 3 mở rộng phân tích lên 10 phép chia ngoài, với hai giá trị khởi tạo huấn luyện cho mỗi phép chia, đồng thời sử dụng các đối chứng ghép cặp nhằm kiểm soát những khác biệt về cấu hình và dữ liệu đầu vào. Các kết luận về sự khác biệt có ý nghĩa thống kê và tương đương thực tế giữa các mô hình được rút ra từ các kiểm định trên kết quả ghép cặp ở Bảng 3.

Hình 4 cho thấy các phương pháp nhân hội tụ về vùng 92% khi N tăng. VQC cải thiện theo số mẫu nhưng vẫn thấp hơn các phương pháp nhân trong phạm vi khảo sát. Kết quả này chỉ phản ánh ansatz và đầu ra hiện tại, không phải giới hạn chung của bộ phân loại lượng tử biến phân.

3.2. So sánh ghép cặp và phân tích tách phần

Trong 10 phép chia ngoài, Q2 cao hơn RBF-SVM ghép cặp với Q2 ở cả sáu cỡ mẫu, với ΔBA từ +0,19 đến +2,18 điểm phần trăm. Sau hiệu chỉnh Holm, khác biệt có ý nghĩa tại N = 80 (p = 0,0352) và N = 200 (p = 0,0391), TOST hỗ trợ tương đương thực tế tại N = 40, 60, 80, 120 và 200. So với SVM tuyến tính ghép cặp với Q2, ΔBA nằm trong khoảng −0,76 đến +0,48 điểm phần trăm, không cỡ mẫu nào có khác biệt có ý nghĩa (mọi p Holm = 1,0000) và TOST hỗ trợ tương đương tại N = 40 – 200. Tại N = 80 và 200, mức tăng lần lượt 0,74 và 0,61 điểm phần trăm có thể phát hiện về thống kê sau hiệu chỉnh Holm, nhưng vẫn nhỏ theo biên tương đương thực tế ±2 điểm phần trăm, hai kết luận này không mâu thuẫn.

RBF-SVM ghép cặp với Q2 ở Bảng 3 được huấn luyện trên đúng bốn đặc trưng Q2 chọn trong từng phép chia và không phải RBF-SVM (4F - toàn cục) của Bảng 2. RBF-SVM được chọn để đối sánh hai hàm nhân phi tuyến, SVM tuyến tính ghép cặp được bổ sung để kiểm tra liệu quan hệ gần tuyến tính trên cùng đầu vào đã đủ hay chưa. Kết quả tuyến tính cho thấy chưa có bằng chứng rằng biểu diễn lượng tử Q2 vượt một biên tuyến tính mạnh trên các tập bốn đặc trưng đã chọn. Tại N = 20, BA 85,93% ở Bảng 3 và 90,48% ở Bảng 2 thuộc hai quy trình khác nhau về lựa chọn đặc trưng và số phép chia/lượt chạy (10 × 2 so với 6 × 5). Vì vậy, không thể quy toàn bộ chênh lệch giữa hai giá trị cho riêng hàm nhân hoặc riêng lựa chọn đặc trưng.

Trong đối chứng Q1 cố định ghép cặp, Q1 tăng 5,35 điểm phần trăm tại N = 20 (CI 95% [3,30; 7,68], p Holm = 0,0117). Tại các cỡ mẫu còn lại, các chênh lệch nhỏ hơn và không đạt ý nghĩa sau hiệu chỉnh.

Việc phân tích tách phần Q2 cho BA hoàn toàn giống nhau giữa mô hình đầy đủ và mô hình bỏ số hạng chống tập trung ở cả 120 cặp chạy. Việc kiểm tra nhật ký huấn luyện cuối có sẵn của 72 lượt Q2 đầy đủ (hai lần khởi tạo mỗi lượt) cho thấy P_{conc} không được kích hoạt tại cả 6.480 bước: $\mu_{off} \in [0{,}410600;\ 0{,}813035]$ và $\sigma_{off} \in [0{,}134264;\ 0{,}347070]$. Nhật ký của 48 lượt Q2 đầy đủ được dùng lại từ lần chạy trước không có trong gói kiểm tra. Cả 120 lượt bỏ số hạng cho $P_{conc} = 0$ tại 10.800 bước được kiểm tra bổ sung, với $\mu off \in [0{,}331706;\ 0{,}813137]$ và $\sigma_{off} \in [0{,}117244;\ 0{,}361927]$. Vì vậy, số hạng không được kích hoạt trong các nhật ký bốn qubit đã kiểm tra, thay vì có thể kết luận nó không hữu ích nói chung. Hệ số suy giảm trọng số AdamW 10^{-4} được giữ ở cả hai nhánh.

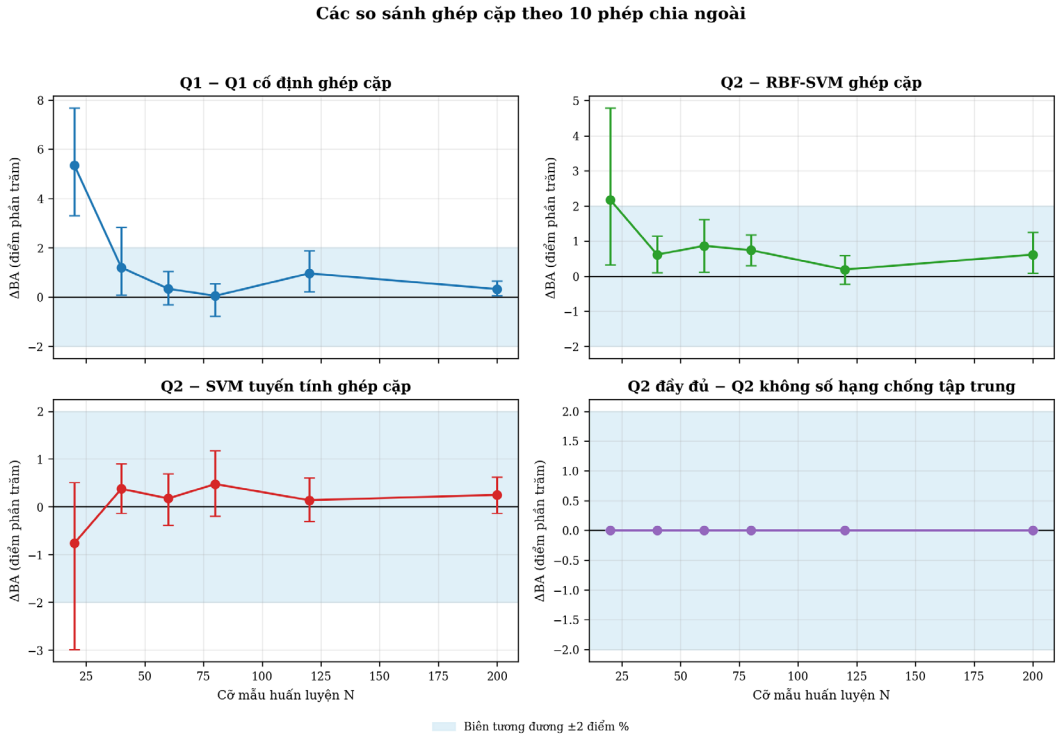
Trong phân tích lấy mẫu hữu hạn, BA của Q0-K bảy qubit thay đổi dưới khoảng 0,4 điểm phần trăm khi số lần đo tăng từ 256 lên 4.096 tại $N = 40{,}80{,}200$ (Hình 7). Kết quả này chỉ cho thấy độ nhạy thấp với nhiễu lấy mẫu nhị thức trong cấu hình đại diện; nó không phải bằng chứng về độ bền trước nhiễu phần cứng.

Bảng 3. Các so sánh ghép cặp và phân tích tách phần theo 10 phép chia ngoài, hai khởi tạo huấn luyện và sáu cỡ mẫu

So sánh	N	BA A (%)	BA B (%)	ΔBA (điểm %)	CI 95% (điểm %)	p Holm	TOST ±2 điểm %
Q1 − Q1 cố định ghép cặp	20	90,14	84,79	+5,35	[3,30; 7,68]	0,0117*	Không
	40	90,50	89,30	+1,20	[0,08; 2,84]	0,1562	Không
	60	90,79	90,45	+0,34	[-0,31; 1,04]	0,3828	Có
	80	91,05	91,00	+0,05	[-0,78; 0,54]	0,3086	Có
	120	91,71	90,75	+0,96	[0,21; 1,89]	0,1562	Có
	200	91,99	91,66	+0,33	[0,06; 0,65]	0,1562	Có
Q2 − RBF-SVM ghép cặp	20	88,10	85,93	+2,18	[0,33; 4,79]	0,0703	Không
	40	90,80	90,19	+0,61	[0,10; 1,14]	0,0820	Có
	60	91,34	90,48	+0,86	[0,11; 1,61]	0,1016	Có
	80	91,31	90,58	+0,74	[0,30; 1,18]	0,0352*	Có

So sánh	N	BA A (%)	BA B (%)	ΔBA (điểm %)	CI 95% (điểm %)	p Holm	TOST ±2 điểm %
	120	91,83	91,64	+0,19	[-0,22; 0,59]	0,1055	Có
	200	92,16	91,55	+0,61	[0,09; 1,25]	0,0391*	Có
Q2 – SVM tuyến tính ghép cặp	20	88,10	88,86	-0,76	[-2,99; 0,51]	1,0000	Không
	40	90,80	90,43	+0,38	[-0,14; 0,90]	1,0000	Có
	60	91,34	91,16	+0,18	[-0,39; 0,69]	1,0000	Có
	80	91,31	90,84	+0,48	[-0,20; 1,18]	1,0000	Có
	120	91,83	91,69	+0,14	[-0,31; 0,60]	1,0000	Có
	200	92,16	91,91	+0,25	[-0,14; 0,63]	1,0000	Có
Q2 đầy đủ – Q2 không số hạng chống tập trung	20	88,10	88,10	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]
	40	90,80	90,80	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]
	60	91,34	91,34	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]
	80	91,31	91,31	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]
	120	91,83	91,83	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]
	200	92,16	92,16	0,00	[0,00; 0,00]	1,0000	Không ước lượng[1]

*Ghi chú: A là mô hình đứng trước dấu trừ, B là mô hình đứng sau. ΔBA = BA(A) − BA(B). Dấu * chỉ p Holm < 0,05. TOST "Có" nghĩa là cả hai kiểm định một phía đều đạt p < 0,05 với biên ±2 điểm phần trăm. [1]Khi mọi chênh lệch đều bằng 0, phương sai bằng 0 nên p của TOST không ước lượng được; đây là sự đồng nhất quan sát, không phải kết luận TOST.*



Hình 5. Chênh lệch BA và khoảng tin cậy 95% của bốn so sánh ghép cặp theo 10 phép chia ngoài

Ghi chú: Vùng xanh biểu diễn biên tương đương ±2 điểm phần trăm.

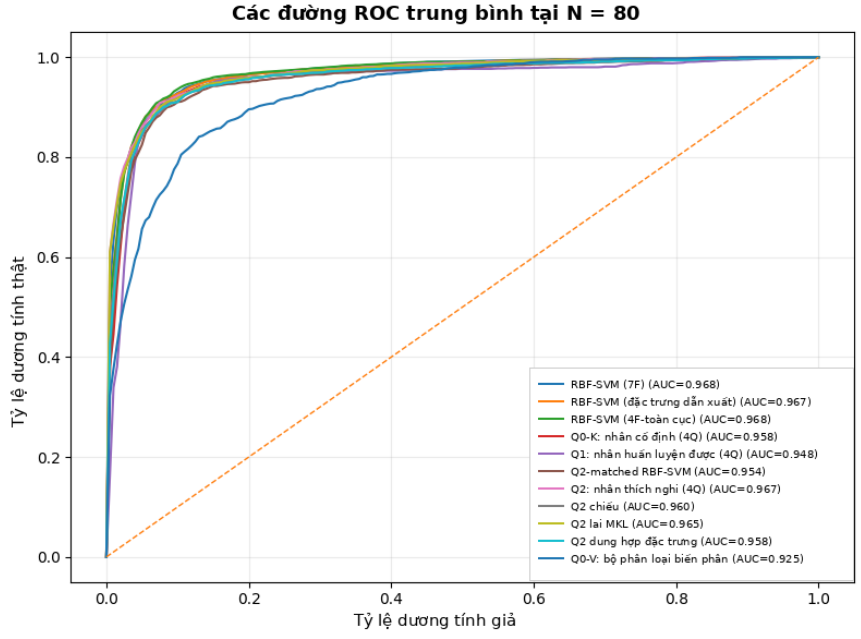
3.3. ROC và độ nhạy với số lần đo

Tại N = 80 trong bài toán chuẩn mô tả, Q2 đạt ROC-AUC 0,967, gần RBF-SVM 0,968 và RBF-SVM trên đặc trưng dẫn xuất 0,967. Q0-K và Q1 lần lượt đạt AUC 0,958 và 0,948; Q0-V đạt 0,925. Mặc dù BA của Q1 (91,60%) cao hơn Q0-K (90,79%) nhưng AUC của Q1 lại thấp hơn. Điều này không mâu thuẫn: BA đo hiệu năng tại ngưỡng quyết định đang dùng, còn ROC-AUC đo khả năng xếp hạng điểm dự đoán trên toàn bộ các ngưỡng. Vì vậy, kết quả không được diễn giải như một cải thiện đồng thời trên mọi chỉ số. Trong cùng đối sánh mô tả với sáu phép chia ngoài và hai lần lấy mẫu huấn luyện, tại N = 20, 40, 80 và 200, BA trung bình của nhân lai (7) lần lượt là 86,96%; 91,48%; 90,98%; 91,98%; của biến thể kết hợp đặc trưng lượng tử – cổ điển là 87,31%; 91,58%; 91,06%; 91,83%; và của nhân lượng tử chiếu là 87,52%; 91,73%; 90,71%; 91,71%. Các biến thể này chưa được mở rộng sang N = 60, 120 hoặc mười phép chia của phân tích xác nhận, nên các số liệu trên chỉ mang ý nghĩa mô tả và không được dùng để kết luận ưu thế thống kê.

3.4. Ý nghĩa của biểu diễn lượng tử

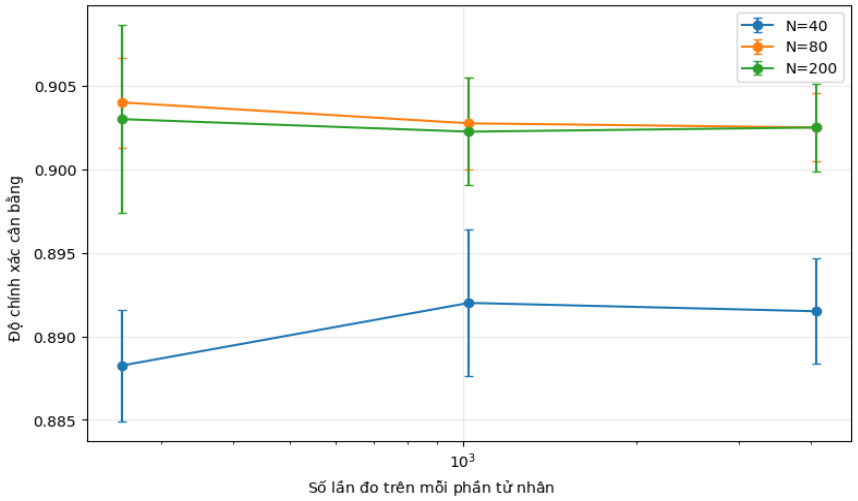
Kết quả quan trọng nhất không phải một tuyên bố vượt trội tổng quát, mà là sự thay đổi hình học tương đồng khi bản đồ lượng tử được học. So sánh Q1 với Q1 cố định ghép cặp cô lập trực tiếp bước căn chỉnh và cho mức tăng rõ tại N = 20. Ngược lại, mức chênh lệch Q1–Q0-K trong bài toán chuẩn rộng không được quy toàn bộ cho căn chỉnh nhân – mục tiêu vì hai mô hình còn khác lựa chọn đặc trưng và cấu hình. Q2 mở rộng khả năng biểu diễn bằng hệ số co giãn, dịch pha, tương tác RZZ phụ thuộc tích đặc trưng và lớp quay tổng quát, nhưng độ phức tạp cao hơn không bảo đảm cải thiện tại mọi cỡ mẫu.

Q2 cao hơn RBF-SVM ghép cặp ở cả sáu cỡ mẫu và đạt ý nghĩa sau Holm tại N = 80 và 200, nhưng không khác có ý nghĩa với SVM tuyến tính ghép cặp. Vì vậy, bằng chứng hiện tại ủng hộ hiệu năng cạnh tranh và sự tương đương thực tế trong phần lớn cỡ mẫu, chứ chưa cho thấy lợi thế nhất quán so với mọi chuẩn cổ điển. Nhật ký đã kiểm tra cho thấy số hạng chống tập trung không được kích hoạt; do đó, không quy hiệu năng quan sát cho số hạng này và không suy rộng kết quả sang các cấu hình khác. Cách diễn giải thận trọng phù hợp với các nghiên cứu nhấn mạnh vai trò của dữ liệu, thiên kiến quy nạp và quy trình đối sánh trong đánh giá QML (Abbas et al., 2021; Huang et al., 2021; Bowles et al., 2024; Schnabel & Roth, 2025).



Hình 6. Đường ROC trung bình của các mô hình tại N = 80

Ghi chú: Chú giải sử dụng tên mô hình thống nhất trong bản thảo thay cho định danh nội bộ của mã nguồn.



Hình 7. Độ nhạy của nhân lượng tử cơ sở bảy qubit đối với số lần đo dùng để ước lượng từng phần tử nhân trong mô phỏng lấy mẫu lý tưởng

3.5. Hạn chế và hướng phát triển

Nghiên cứu có năm hạn chế chính. Thứ nhất, các mạch được chạy trên bộ mô phỏng vectơ trạng thái nên thời gian tính chỉ phản ánh chi phí mô phỏng cổ điển. Thứ hai, dù phân tích xác nhận đã tăng lên 10 phép chia ngoài nhưng Q1 và Q2 vẫn chỉ dùng hai giá trị khởi tạo huấn luyện trong mỗi phép chia. Thứ ba, Q2 dùng một phép chia phát triển – thẩm định thay vì xác thực chéo nhiều phần, nên độ ổn định lựa chọn đặc trưng cần được khảo sát thêm. Thứ tư, việc phân tích số lần đo chưa bao gồm mô hình nhiễu hoặc phần cứng thật. Thứ năm, Cammeo–Osmancik là bộ dữ liệu chuẩn của hai giống lúa Thổ Nhĩ Kỳ, kết quả không thể suy rộng trực tiếp sang các giống và điều kiện canh tác tại Đồng bằng sông Cửu Long.

Hướng tiếp theo bao gồm việc tăng số khởi tạo và dùng xác thực chéo đầy đủ cho Q2, cấu trúc RZZ cần được thiết kế theo quan hệ Area–Convex Area và Major–Minor Axis; căn chỉnh ngẫu nhiên cần được áp dụng để giảm chi phí (Gentinetta et al., 2023) và nhiễu cổng, nhiễu đọc cùng phần cứng thật cũng cần được đánh giá. Để kiểm chứng khả năng chuyển giao sang Đồng bằng sông Cửu Long, dữ liệu hình thái của các giống lúa phổ biến tại khu vực cần được thu thập bằng cùng quy trình trích xuất đặc trưng; sau đó, việc đánh giá cần được tiến hành trên tập dữ liệu địa phương độc lập và kiểm tra chuyển miền. Do đó, kết quả nghiên cứu hiện tại được xem là bài toán chuẩn phương pháp trên dữ liệu hình thái dạng bảng, không phải xác nhận ứng dụng sản xuất tại Việt Nam.

4. KẾT LUẬN

Nhân lượng tử huấn luyện được Q1 và nhân lượng tử thích nghi Q2 tạo ra các biểu diễn cạnh tranh cho phân loại Cammeo–Osmancik trong điều kiện dữ liệu hạn chế. Đối chứng ghép cặp cho thấy Q1 cao hơn phiên bản cố định 5,35 điểm phần trăm tại N = 20 và đạt ý nghĩa sau Holm. Q2 cao hơn RBF-SVM ghép cặp 0,19 – 2,18 điểm phần trăm, có ý nghĩa tại N = 80 và 200, nhưng không khác có ý nghĩa với SVM tuyến tính ghép cặp, TOST hỗ trợ tương đương thực tế với cả hai đối chứng tại N = 40 – 200. Loại số hạng chống tập trung không làm thay đổi BA quan sát, số hạng này không được kích hoạt trong nhật ký huấn luyện bốn qubit đã kiểm tra. Vì vậy, kết quả nghiên cứu ủng hộ tiếp tục phát triển bản đồ đặc trưng lượng tử có tham số nhưng chưa cung cấp bằng chứng về ưu thế lượng tử tổng quát hoặc tăng tốc trên phần cứng lượng tử.

LỜI CẢM TẠ

Nhóm tác giả cảm ơn UCI Machine Learning Repository đã công bố bộ dữ liệu Rice (Cammeo and Osmancik).

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Abbas, A., Sutter, D., Zoufal, C., Lucchi, A., Figalli, A., & Woerner, S. (2021). The power of quantum neural networks. *Nature Computational Science, 1*(6), 403–409. https://doi.org/10.1038/s43588-021-00084-1

Bergholm, V., Izaac, J., Schuld, M., Gogolin, C., Ahmed, S., Ajith, V., Alam, M. S., Alonso-Linaje, G.,... & Killoran, N. (2018). *PennyLane: Automatic differentiation of hybrid quantum-classical computations* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.1811.04968

Biamonte, J., Wittek, P., Pancotti, N., Rebentrost, P., Wiebe, N., & Lloyd, S. (2017). Quantum machine learning. *Nature, 549*(7671), 195–202. https://doi.org/10.1038/nature23474

Boser, B. E., Guyon, I. M., & Vapnik, V. N. (1992). A training algorithm for optimal margin classifiers. In D. Haussler (Ed.), *Proceedings of the fifth annual workshop on Computational learning theory* (pp. 144–152). ACM. https://doi.org/10.1145/130385.130401

Bowles, J., Ahmed, S., & Schuld, M. (2024). *Better than classical? The subtle art of benchmarking quantum machine learning models* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2403.07059

Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine Learning, 45*(1), 5–32. https://doi.org/10.1023/A:1010933404324

Brodersen, K. H., Ong, C. S., Stephan, K. E., & Buhmann, J. M. (2010). The balanced accuracy and its posterior distribution. In *2010 20th International Conference on Pattern Recognition* (pp. 3121–3124). IEEE. https://doi.org/10.1109/ICPR.2010.764

Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O., & Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature, 559*(7715), 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

Cawley, G. C., & Talbot, N. L. C. (2010). On over-fitting in model selection and subsequent selection bias in performance evaluation. *Journal of Machine Learning Research, 11*, 2079–2107. https://www.jmlr.org/papers/v11/cawley10a.html

Çelik, A. (2024). Evaluating the impact of data normalization on rice classification using machine learning algorithms. *Acadlore Transactions on AI and Machine Learning, 3*(3), 162–171. https://doi.org/10.56578/ataiml030303

Cerezo, M., Arrasmith, A., Babbush, R., Benjamin, S. C., Endo, S., Fujii, K., McClean, J. R., Mitarai, K., Yuan, X., Cincio, L., & Coles, P. J. (2021). Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics, 3*(9), 625–644. https://doi.org/10.1038/s42254-021-00348-9

Chatnuntawech, I., Tantisantisom, K., Khanchaitit, P., Boonkoom, T., Bilgic, B., & Chuangsuwanich, E. (2018). *Rice classification using spatio-spectral deep convolutional neural network* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.1805.11491

Cinar, I., & Koklu, M. (2019). Classification of rice varieties using artificial intelligence methods. *International Journal of Intelligent Systems and Applications in Engineering, 7*(3), 188–194. https://doi.org/10.18201/ijisae.2019355381

Cortes, C., & Vapnik, V. (1995). Support-vector networks. *Machine Learning, 20*(3), 273–297. https://doi.org/10.1007/BF00994018

Cox, D. R. (1958). The regression analysis of binary sequences. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological), 20*(2), 215–242. https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1958.tb00292.x

Cristianini, N., Shawe-Taylor, J., Elisseeff, A., & Kandola, J. S. (2002). On kernel-target alignment. In T. G. Dietterich, S. Becker, & Z. Ghahramani (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems 14* (pp. 367–374). MIT Press. https://doi.org/10.7551/mitpress/1120.003.0052

Efron, B. (1979). Bootstrap methods: Another look at the jackknife. *The Annals of Statistics, 7*(1), 1–26. https://doi.org/10.1214/aos/1176344552

Fawcett, T. (2006). An introduction to ROC analysis. *Pattern Recognition Letters, 27*(8), 861–874. https://doi.org/10.1016/j.patrec.2005.10.010

Friedman, J. H. (2001). Greedy function approximation: A gradient boosting machine. *The Annals of Statistics, 29*(5), 1189–1232. https://doi.org/10.1214/aos/1013203451

Gentinetta, G., Sutter, D., Zoufal, C., Fuller, B., & Woerner, S. (2023). Quantum kernel alignment with stochastic gradient descent. In *2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)* (Vol. 1, pp. 256–262). IEEE. https://doi.org/10.1109/QCE57702.2023.00036

Geurts, P., Ernst, D., & Wehenkel, L. (2006). Extremely randomized trees. *Machine Learning, 63*(1), 3–42. https://doi.org/10.1007/s10994-006-6226-1

Havlíček, V., Córcoles, A. D., Temme, K., Harrow, A. W., Kandala, A., Chow, J. M., & Gambetta, J. M. (2019). Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces. *Nature, 567*(7747), 209–212. https://doi.org/10.1038/s41586-019-0980-2

Holm, S. (1979). A simple sequentially rejective multiple test procedure. *Scandinavian Journal of Statistics, 6*(2), 65–70. https://www.jstor.org/stable/4615733

Huang, H.-Y., Broughton, M., Mohseni, M., Babbush, R., Boixo, S., Neven, H., & McClean, J. R. (2021). Power of data in quantum machine learning. *Nature Communications, 12*(1), 2631. https://doi.org/10.1038/s41467-021-22539-9

Hubregtsen, T., Wierichs, D., Gil-Fuster, E., Derks, P.-J. H. S., Faehrmann, P. K., & Meyer, J. J. (2022). Training quantum embedding kernels on near-term quantum computers. *Physical Review A, 106*(4), 042431. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.042431

Kakavand, S., Strohmeyer, C., & Schlotter, M. (2026). *Benchmarking quantum kernel support vector machines against classical baselines on tabular data: A rigorous empirical study with hardware validation* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2604.18837

Kingma, D. P., & Ba, J. (2015). Adam: A method for stochastic optimization. In *3rd International Conference on Learning Representations (ICLR)*. https://arxiv.org/abs/1412.6980

Lakens, D. (2017). Equivalence tests: A practical primer for t tests, correlations, and meta-analyses. *Social Psychological and Personality Science, 8*(4), 355–362. https://doi.org/10.1177/1948550617697177

Le, H. N., Pham, T. B. T., Truong, D. A. K., Vo, K. D., & Nguyen, T. T. (2026). *Efficient molecular dynamics simulation of 2D penta-silicene materials using machine learning potentials* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2602.11548

Liu, Y., Arunachalam, S., & Temme, K. (2021). A rigorous and robust quantum speed-up in supervised machine learning. *Nature Physics, 17*(9), 1013–1017. https://doi.org/10.1038/s41567-021-01287-z

Loshchilov, I., & Hutter, F. (2019). Decoupled weight decay regularization. In *7th International Conference on Learning Representations (ICLR)*. https://openreview.net/forum?id=Bkg6RiCqY7

McClean, J. R., Boixo, S., Smelyanskiy, V. N., Babbush, R., & Neven, H. (2018). Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. *Nature Communications, 9*(1), 4812. https://doi.org/10.1038/s41467-018-07090-4

Merchant, A., Batzner, S., Schoenholz, S. S., Aykol, M., Cheon, G., & Cubuk, E. D. (2023). Scaling deep learning for materials discovery. *Nature, 624*(7990), 80–85. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9

Mitarai, K., Negoro, M., Kitagawa, M., & Fujii, K. (2018). Quantum circuit learning. *Physical Review A, 98*(3), 032309. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.032309

Park, D. K., Blank, C., & Petruccione, F. (2020). The theory of the quantum kernel-based binary classifier. *Physics Letters A, 384*(21), 126422. https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126422

Paszke, A., Gross, S., Massa, F., Lerer, A., Bradbury, J., Chanan, G., Killeen, T., Lin, Z., Gimelshein, N., Antiga, L., Desmaison, A., Köpf, A., Yang, E., DeVito, Z., Raison, M., Tejani, A., Chilamkurthy, S., Steiner, B., Fang, L., … Chintala, S. (2019). PyTorch: An imperative style, high-performance deep learning library. In H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. Fox, & R. Garnett (Eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems* (Vol. 32, pp. 8024–8035). Curran Associates. https://papers.nips.cc/paper_files/paper/2019/hash/bdbca288fee7f92f2bfa9f7012727740-Abstract.html

Pearson, K. (1901). On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 2*(11), 559–572. https://doi.org/10.1080/14786440109462720

Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., Vanderplas, J., Passos, A., Cournapeau, D., Brucher, M., Perrot, M., & Duchesnay, É. (2011). Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research, 12*(85), 2825–2830. https://www.jmlr.org/papers/v12/pedregosa11a.html

Pérez-Salinas, A., Cervera-Lierta, A., Gil-Fuster, E., & Latorre, J. I. (2020). Data re-uploading for a universal quantum classifier. *Quantum, 4*, 226. https://doi.org/10.22331/q-2020-02-06-226

Phan, T.-T.-H., Vo, Q.-T., & Nguyen, H.-D. (2024). A novel method for identifying rice seed purity using hybrid machine learning algorithms. *Heliyon, 10*(14), e33941. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e33941

Rumelhart, D. E., Hinton, G. E., & Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature, 323*(6088), 533–536. https://doi.org/10.1038/323533a0

Schmidt, J., Marques, M. R. G., Botti, S., & Marques, M. A. L. (2019). Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science. *Npj Computational Materials, 5*(1), 83. https://doi.org/10.1038/s41524-019-0221-0

Schnabel, J., & Roth, M. (2025). Quantum kernel methods under scrutiny: A benchmarking study.

Quantum Machine Intelligence, 7(1), 58. https://doi.org/10.1007/s42484-025-00273-5

Schuirmann, D. J. (1987). A comparison of the two one-sided tests procedure and the power approach for assessing the equivalence of average bioavailability. *Journal of Pharmacokinetics and Biopharmaceutics, 15*(6), 657–680. https://doi.org/10.1007/BF01068419

Schuld, M. (2021). *Supervised quantum machine learning models are kernel methods* [Preprint]. arXiv. https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.11020

Schuld, M., & Killoran, N. (2019). Quantum machine learning in feature hilbert spaces. *Physical Review Letters, 122*(4), 040504. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.040504

Schuld, M., Sinayskiy, I., & Petruccione, F. (2015). An introduction to quantum machine learning. *Contemporary Physics, 56*(2), 172–185. https://doi.org/10.1080/00107514.2014.964942

Schuld, M., Sweke, R., & Meyer, J. J. (2021). Effect of data encoding on the expressive power of variational quantum-machine-learning models. *Physical Review A, 103*(3), 032430. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.032430

Sim, S., Johnson, P. D., & Aspuru-Guzik, A. (2019). Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms. *Advanced Quantum Technologies, 2*(12), 1900070. https://doi.org/10.1002/qute.201900070

Slattery, L., Shaydulin, R., Chakrabarti, S., Pistoia, M., Khairy, S., & Wild, S. M. (2023). Numerical evidence against advantage with quantum fidelity kernels on classical data. *Physical Review A, 107*(6), 062417. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.107.062417

Sweke, R., Wilde, F., Meyer, J. J., Schuld, M., Fährmann, P. K., Meynard-Piganeau, B., & Eisert, J. (2020). Stochastic gradient descent for hybrid quantum-classical optimization. *Quantum, 4*, 314. https://doi.org/10.22331/q-2020-08-31-314

Thanasilp, S., Wang, S., Cerezo, M., & Holmes, Z. (2024). Exponential concentration in quantum kernel methods. *Nature Communications, 15*(1), 5200. https://doi.org/10.1038/s41467-024-49287-w

UCI Machine Learning Repository. (2019). Rice (cammeo and osmancik). University of California, Irvine. https://doi.org/10.24432/C5MW4Z

Varma, S., & Simon, R. (2006). Bias in error estimation when using cross-validation for model selection. *BMC Bioinformatics, 7*(1), 91. https://doi.org/10.1186/1471-2105-7-91

Wilcoxon, F. (1945). Individual comparisons by ranking methods. *Biometrics Bulletin, 1*(6), 80–83. https://doi.org/10.2307/3001968