

# メタヒューリスティクスと古典ニューラルネットワークを用いた量子最適化

Taihei Takahashi (Keio Univ · Yamamoto Lab)

## Abstract

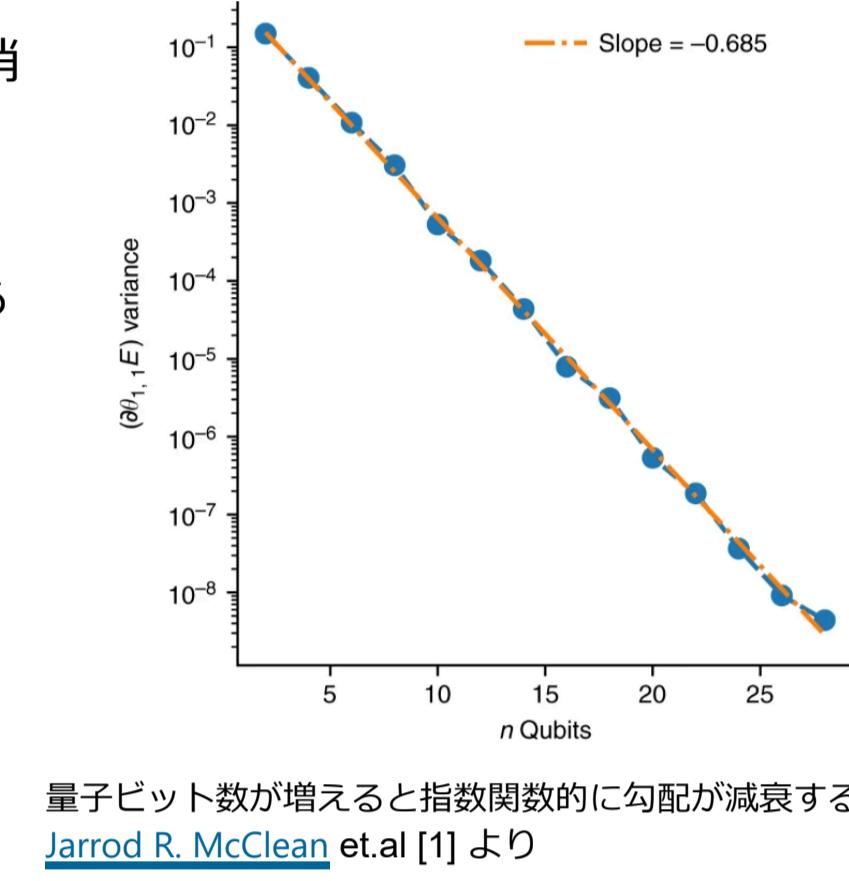
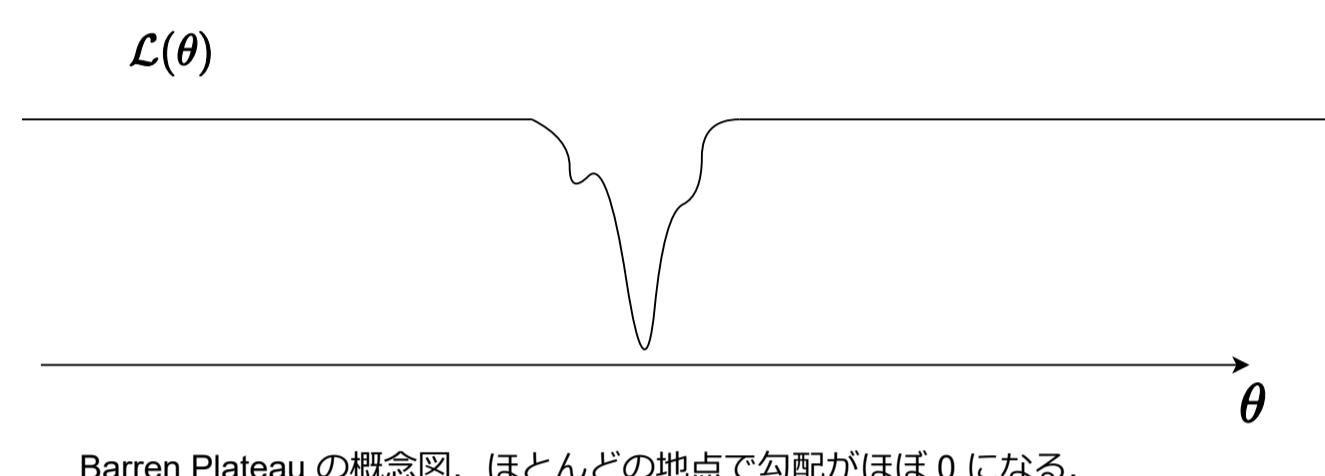
量子計算機は一部のアルゴリズムで古典計算機と比較して指數関数的な改善を示すなど有望な技術であるが、現在の Noisy Intermediate Quantum (NISQ) 段階ではそれらの強力なアルゴリズムを用いることができない。この NISQ 段階での有望なアルゴリズムとしては Variational Quantum Algorithm (VQA) が存在する。VQA は Parametrized Quantum Circuit (PQC) を用いて量子回路を古典的に最適化する量子・古典ハイブリッドアルゴリズムである。

VQA の現在の課題として Barren Plateau が存在する。Barren Plateau は回路のパラメータに対する損失関数の勾配が問題サイズに対して指數関数的に消失する問題であり、これは VQA が基本的に勾配降下法に従って学習するため、勾配が指數関数的に消失することによって学習に必要なステップ数が指數関数的に増大することが実際の課題として出現する。

そのため Barren Plateau 問題を解決するための手法が Warm Start 法の Pretraining や ADAPT-VQE のような Adaptive に回路を構成する手法が提案されている。一方で直近では各イテレーションでの必要ショット数に注目したショット数・評価パラメータ削減手法に注目が集まっている。ショット数削減手法としては学習の進捗状況に応じて Adaptive に削減する方法が提案されている。評価パラメータの削減手法としてはメタヒューリスティクスのアルゴリズム (PSO) や ACO を用いた手法が提案されている。これらのメタヒューリスティクスを用いた theta アルゴリズムは理論的な保証はないものの、多数の点を用いて最適化を実行することから Local minima に強いと考えられており、また勾配に直接依存しないことから勾配消失に対しても比較的堅牢な性質を有していることが期待されている。本研究においては ACO について連続変数問題への改善をおこなったアルゴリズムを最小固有状態を求める VQA のパラメータ最適化に対して適用し、その声質について他のアルゴリズムと比較し観察した。実験結果からは改善された ACO が PSO と比較して高い性能を持つことがわかったものの、古典ニューラルネットワークを用いた量子回路の最適化には劣っていることが判明した。今後の方向性として、古典ニューラルネットワークと VQA を組み合わせた技法の性質について注目することが重要と考えられる。

## How can we deal with Barren Plateau?

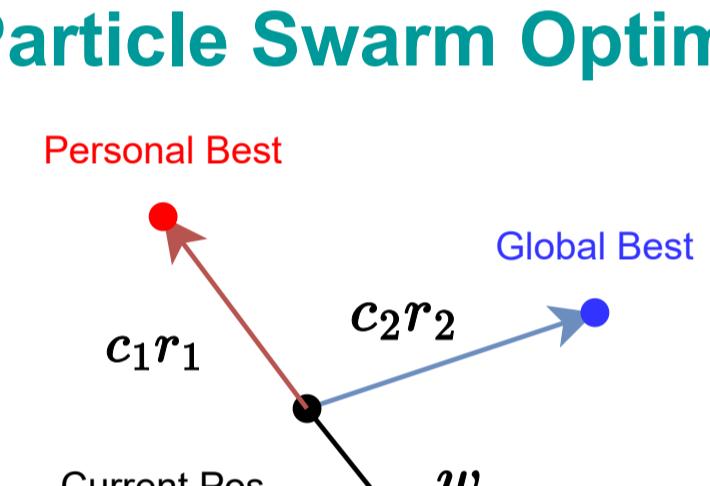
- Barren Plateau とは、Parametrized Quantum Circuit を学習している間に勾配が消失する問題。
- 次元の問い合わせる問題。
- 消失した勾配の場所を抜ける方法と、その速度が重要である。
- PSO などのメタヒューリスティクスは勾配に直接依存しないため強い可能性がある。



量子ビット数が増えると指數関数的に勾配が減衰する。  
Jarrod R. McClean et.al [1] より

## Introduction | PSO, GAQPSO, ACO, ALACO, NNVQA

### Background① Particle Swarm Optimization (PSO)



Particle Swarm Optimization は、多数の運動する粒子を用いて最適な点を探査するメタヒューリスティクス手法である。

更新規則：

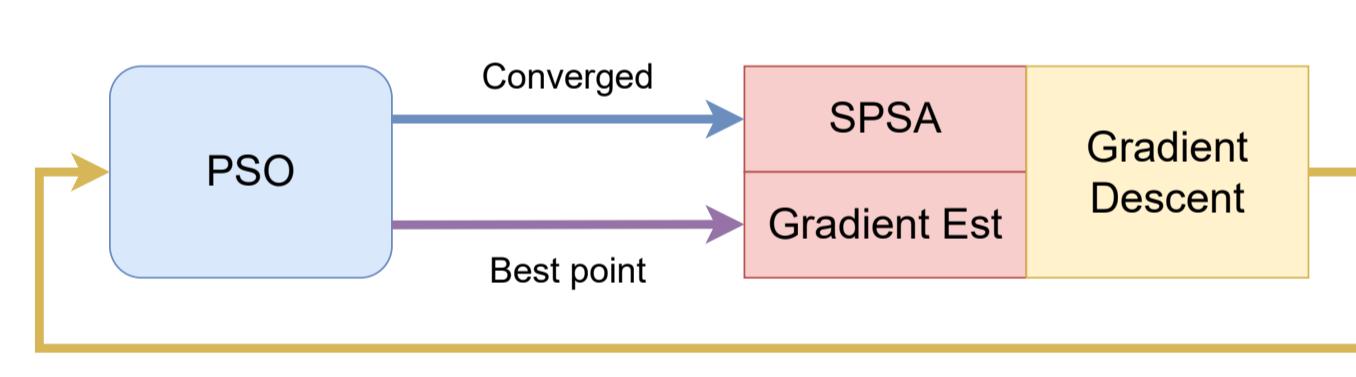
$$x = x + v.$$

$$v = wv + c_1r_1(\hat{x}_P - x) + c_2r_2(\hat{x}_G - x).$$

PSO の粒子の運動規則。Global Best, Personal Best, Momentum によって駆動される。

### Background② PSO for VQE : GAQPSO[2]

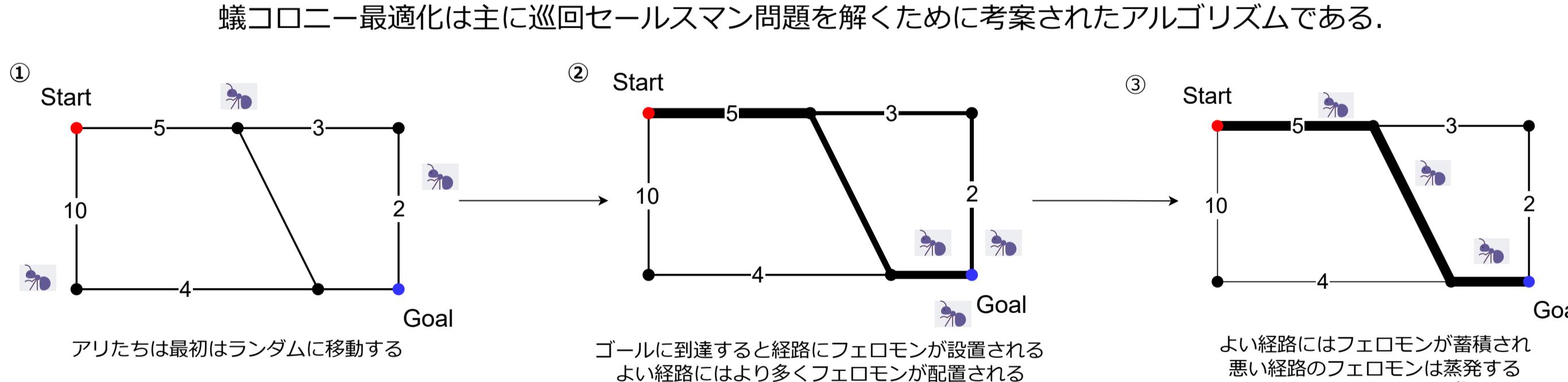
Gradient-based Adaptive Quantum PSO(GAQPSO) は勾配を用いて PSO を改善する手法である。



GAQPSO のアルゴリズム。最初に PSO を実行し、収束したら勾配降下法によって更新する。勾配消失したら PSO で更新する。もし現時点の Best Point なら正確な Gradient を求める。そうでなければ SPSA で勾配降下する。

### Background③ Ant Colony Optimization (ACO)

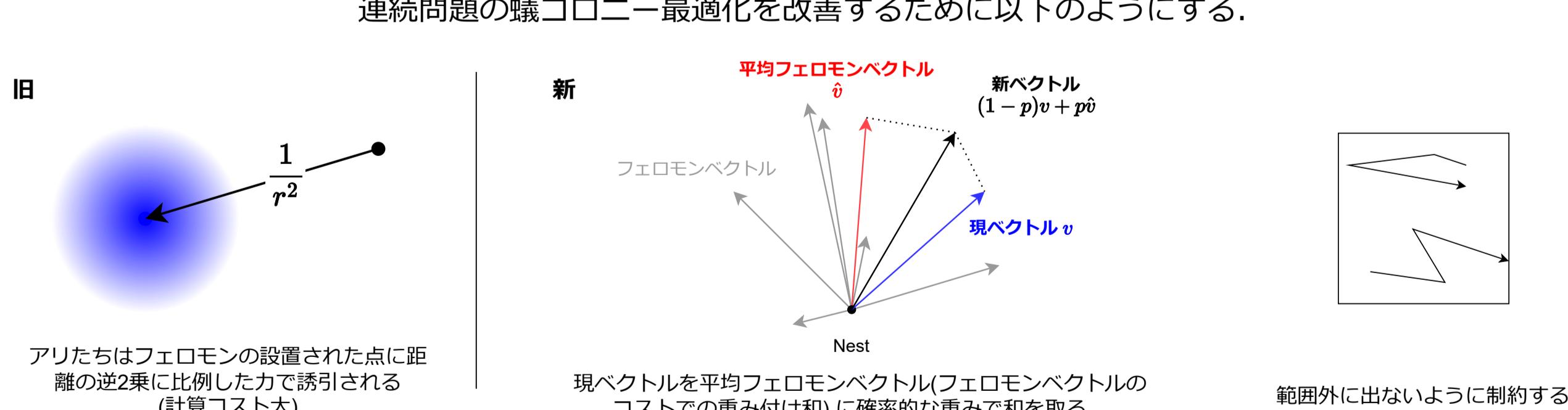
蟻コロニー最適化は主に巡回セールスマン問題を解くために考案されたアルゴリズムである。



アリたちは最初はランダムに移動する  
ゴールに到達すると経路にフェロモンが設置される  
よい経路にはより多くのフェロモンが配置される  
よい経路にはフェロモンが蓄積され悪い経路のフェロモンは蒸発する  
フェロモンにアリたちは集まる

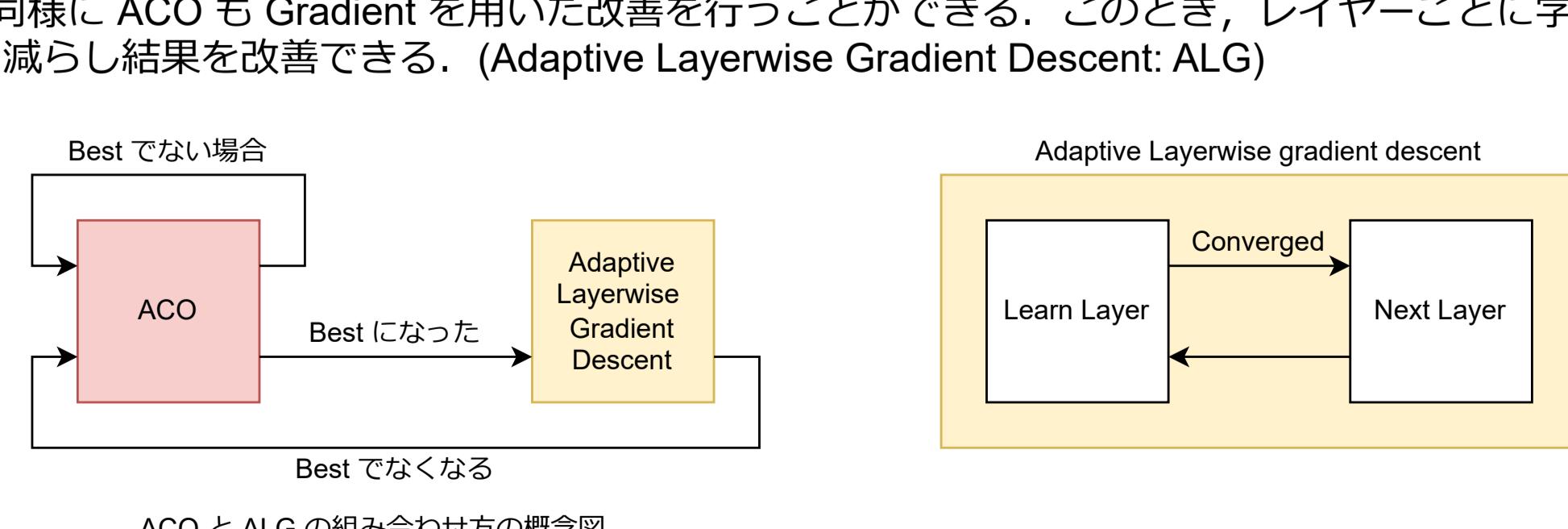
### Background④ ACO for Continuous space (and for VQA)

連続問題の蟻コロニー最適化を改善するために以下のようにする。



### Background⑤ Adaptive Layerwise Learning

GAQPSO と同様に ACO も Gradient を用いた改善を行うことができる。このとき、レイヤーごとに学習することによって複雑さを減らし結果を改善できる。(Adaptive Layerwise Gradient Descent: ALG)



ACO と ALG の組み合わせ方の概念図。

ALG 対象のレイヤーが収束したら次のレイヤーの学習に移る

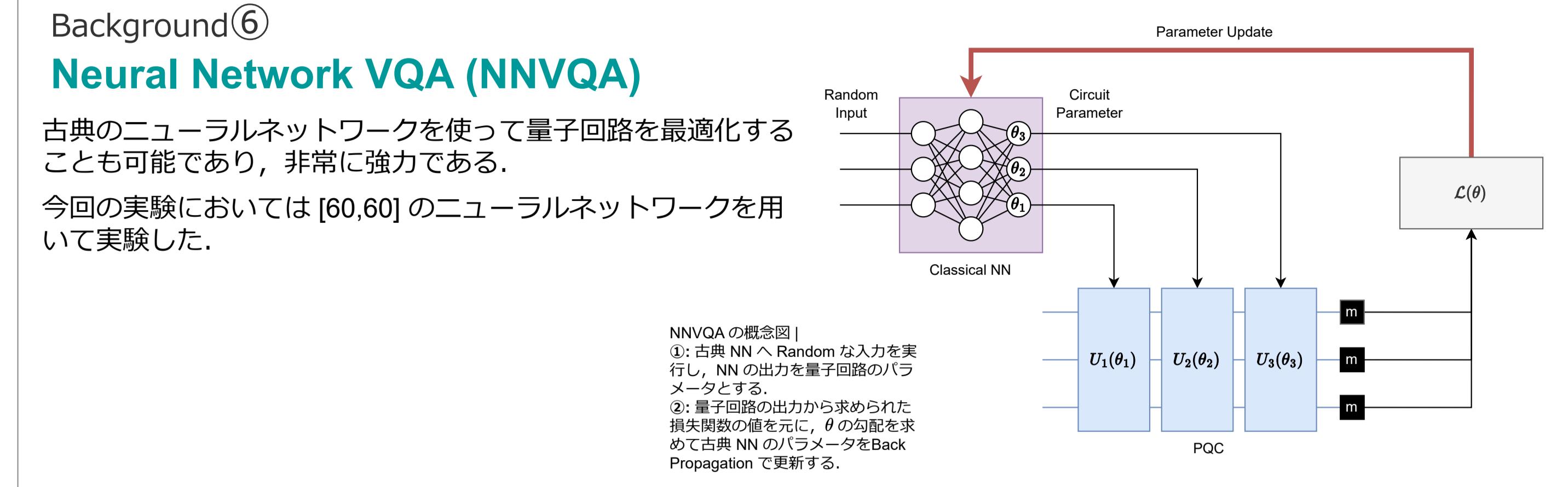
PSO と組み合わせると収束判定などの Hyperparameter が増えてチューニングが難しくなるため、Adaptive Layerwise は ACO でのみ実行した。

## Background⑥

### Neural Network VQA (NNVQA)

古典のニューラルネットワークを使って量子回路を最適化することも可能であり、非常に強力である。

今回の実験においては [60,60] のニューラルネットワークを用いて実験した。



## Method

### Term Limited Hamiltonian

$N$  qubit system の Hamiltonian  $H$  は

$$H_i = \sum_{i=1}^{4^N} c_i P_i$$

で表すことができる。ここで  $P_i$  は  $i$  番目のパリ作用素。しかしながら、これをすべて計算するのは非常に時間がかかるため、 $\{P_i\}$  からランダムに所定の数(今回は 500 まで)だけ取ってきてハミルトニアンを構成した。

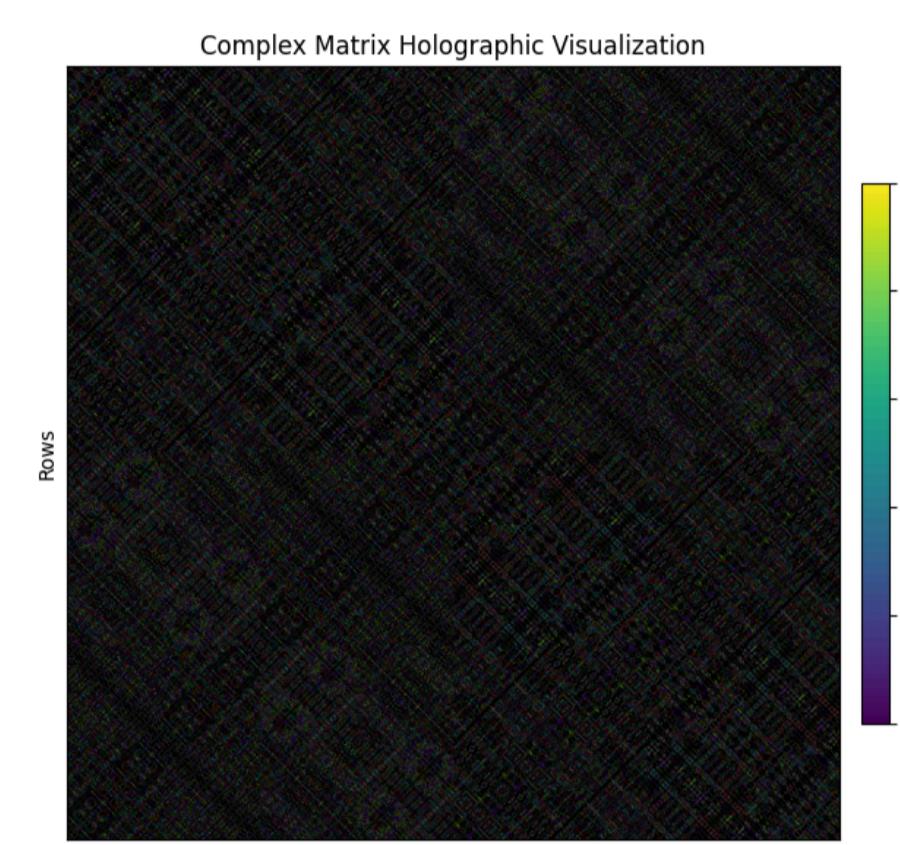


Figure2 | 生成した Hamiltonian。小さい要素が全体的に入っていることがわかる。

## Results

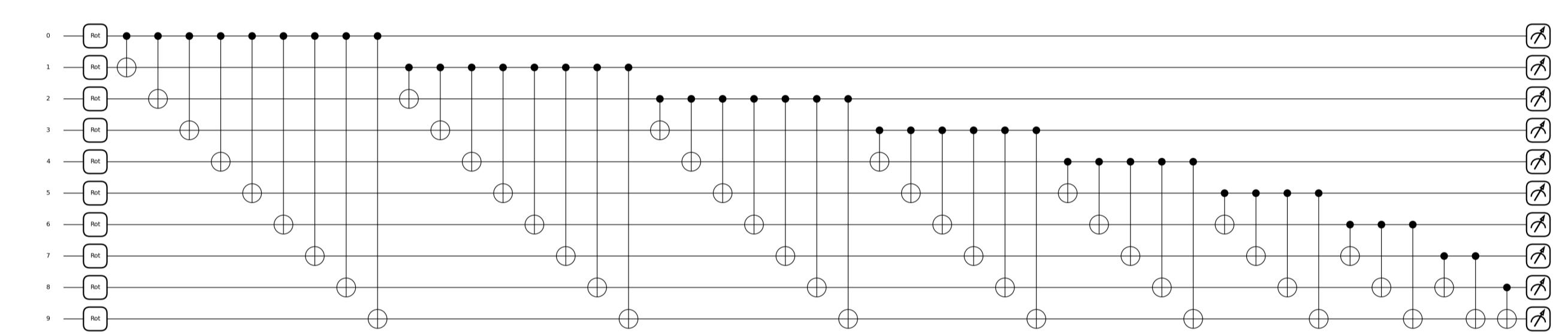


Figure1 | 1 layer full entangling circuit, ACO と PSO は 2 layer 重ねて使った。NN は1layer だけ使った

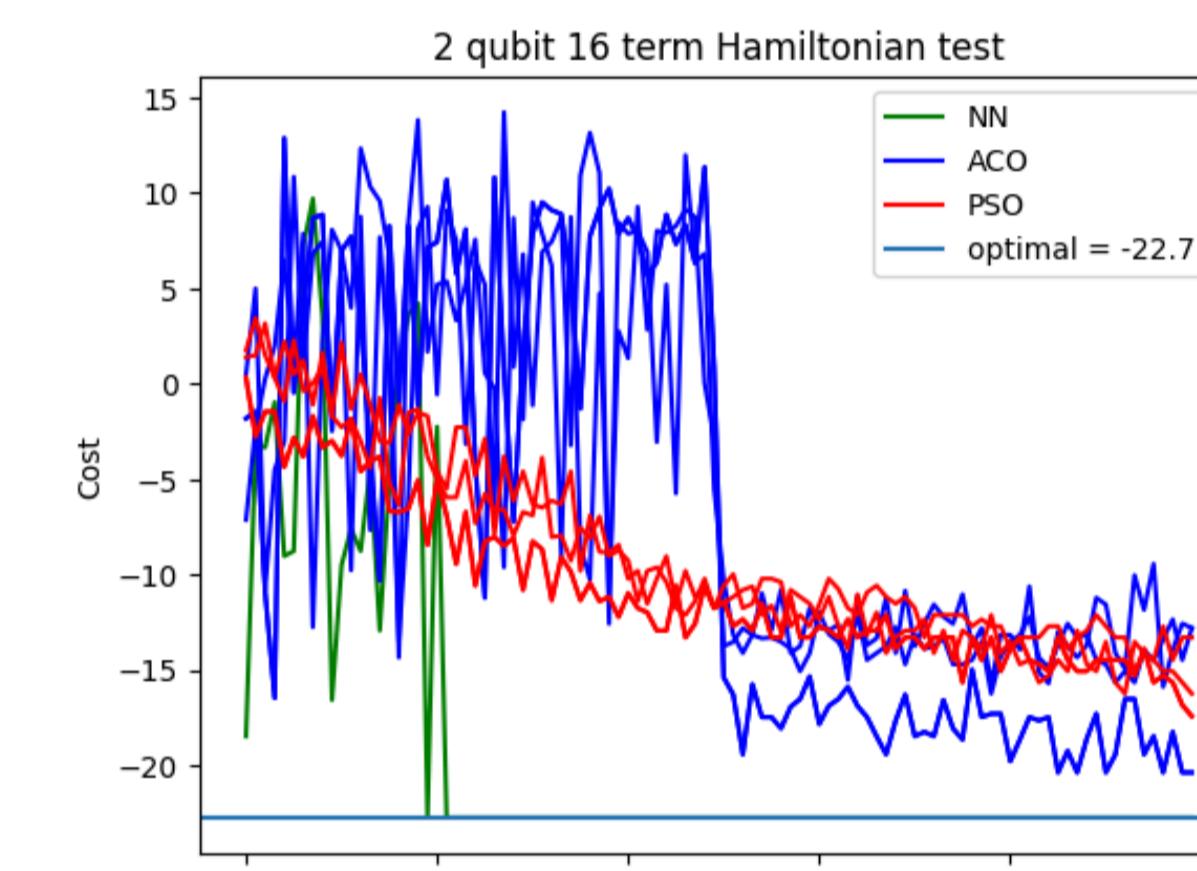


Figure3 | 2qubit の小問題での性能比較。PSO と比較して ACO は早期に低 Cost の値を発見している他、最終的な最小への接近度も大きい。

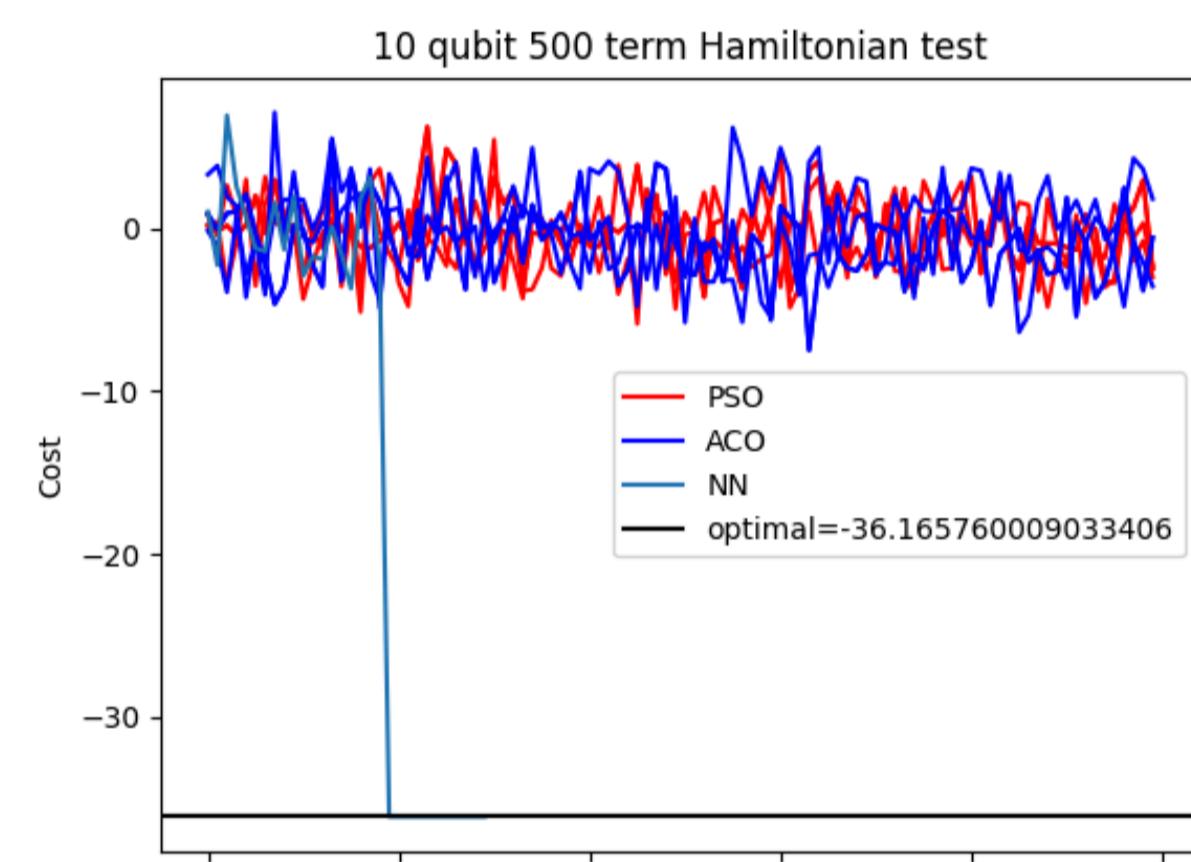


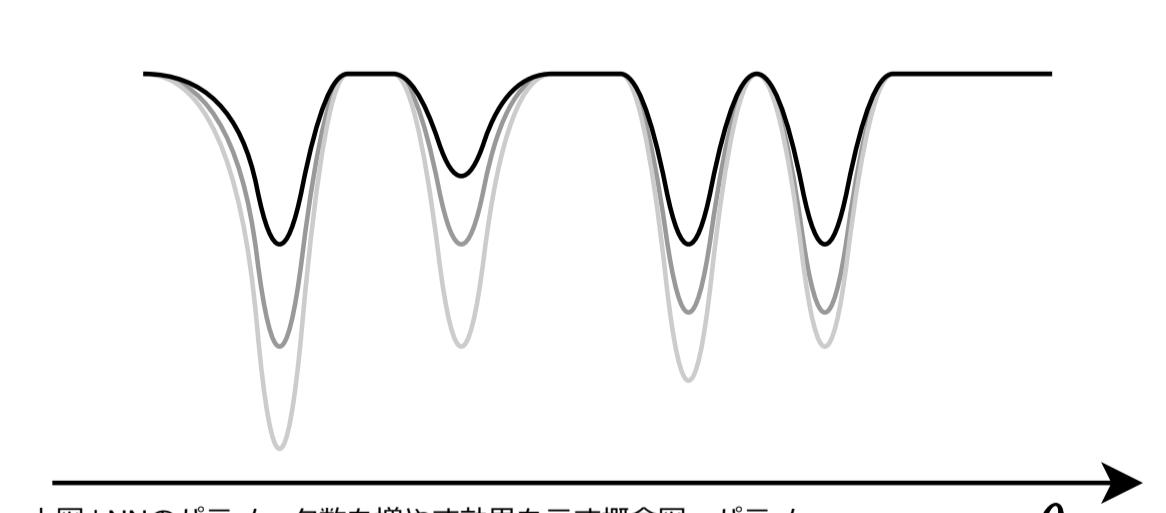
Figure4 | 10qubit の難しい問題の領域において Neural Network (NN) が圧倒的に性能が高いことがわかる。

## Neural Network has hint to solve the problem

### Discussions and Future work

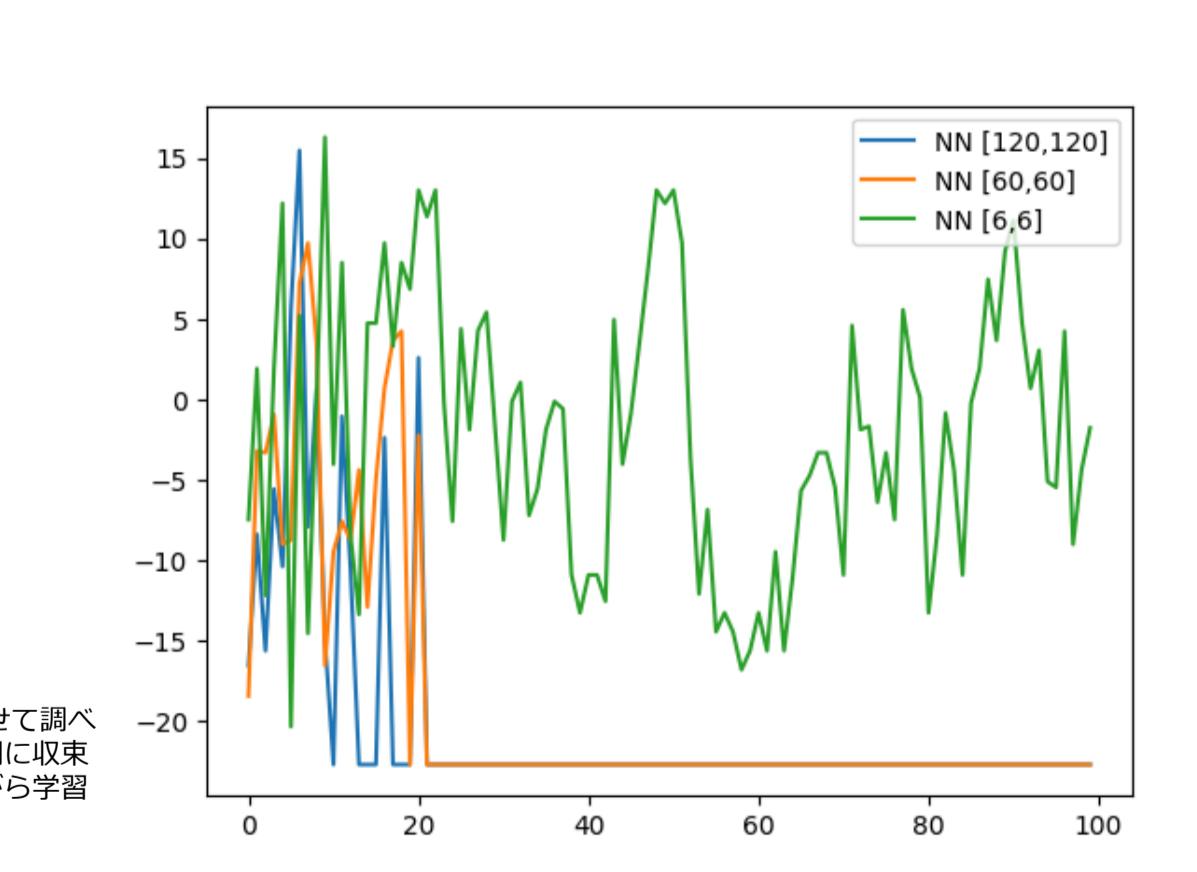
#### Discussion① Why do neural networks perform well?

古典のニューラルネットワークはパラメータ数が増えると任意の Local Minima が深くなり、最終的に Global minima に近くなる性質があるため。今回のパラメータ数は十分大きかったと考えられる。



#### Discussion② Mystery of learning instability.

ニューラルネットワークについて、学習が非常に不安定であるのは奇妙である。また、ACO も同様だが、Optimal に徐々に接近するのではなく急激に接近する事象が観察された。この際の内部のメカニズムは未解明であり、興味深い。



右図 | NN のノード数を変化させて調べた図。ノード数が多いければ早期に収束するようになるが、しかしながら学習は非常に不安定なままである。

## References

[1] Jarrod R. McClean et.al, Barren plateaus in quantum neural network training landscapes [Nov 2018]

[2] Hao Mei, et.al, Particle swarm optimization for a variational quantum eigensolver [Nov 2024]

[3] Does provable absence of barren plateaus imply classical simulability Or, why we need to rethink variational quantum computing (M. Cerezo et.al.) [arXiv:2312.09121 (2023)]