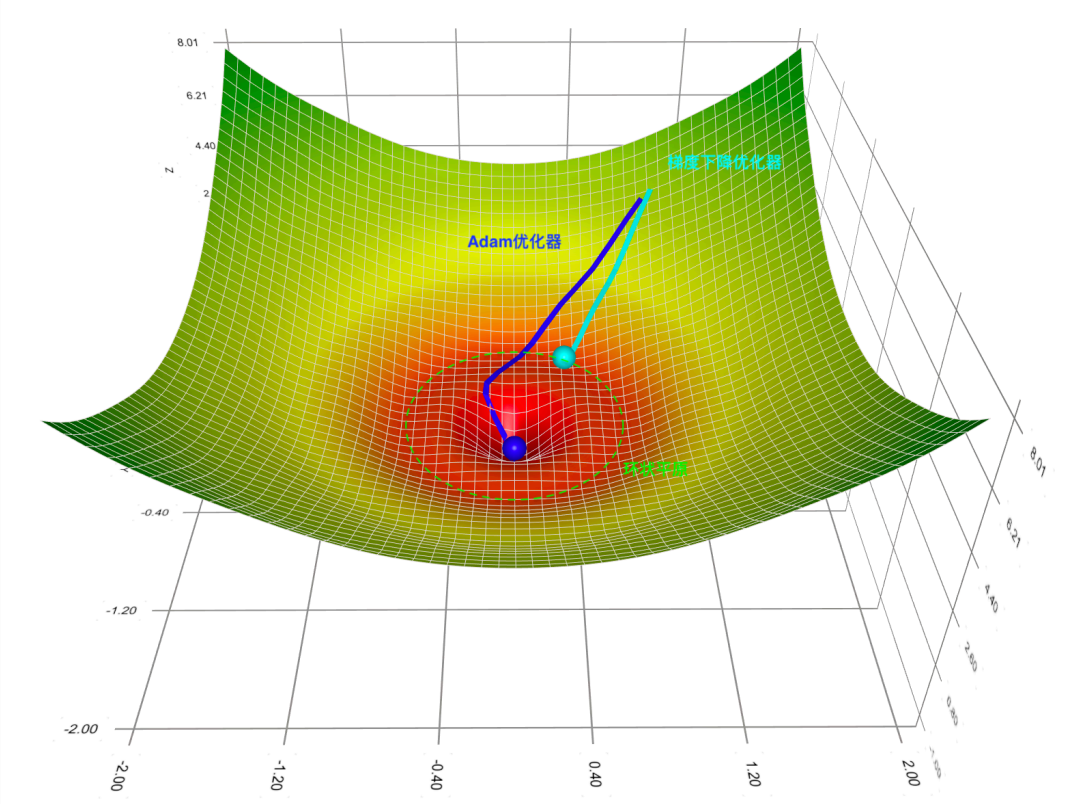
量子神经网络的贫瘠高原效应

(BARREN PLATEAUS)

概览

在经典神经网络的训练中，基于梯度的优化方法不仅仅会遇到局部最小值的问题，同时还要面对鞍点等附近梯度近似于零的几何结构。相对应的，在量子神经网络中也存在着一种**贫瘠高原效应**（Barren plateaus）。这个奇特的现象首先是由 McClean et al. 在 2018 年发现 (arXiv:1803.11173)。简单来说，就是当你选取的随机电路结构满足一定复杂程度时优化曲面（Optimization landscape）会变得很平坦，从而导致基于梯度下降的优化方法很难找到全局最小值。对于大多数的变分量子算法（VQE等等），这个现象意味着当量子比特数量越来越多时，选取随机结构的电路有可能效果并不好。这会让你设计的损失函数所对应的优化曲面变成一个巨大的高原，让从而导致量子神经网络的训练愈加困难。你随机找到的初始值很难逃离这个高原，梯度下降收敛速度会很缓慢。



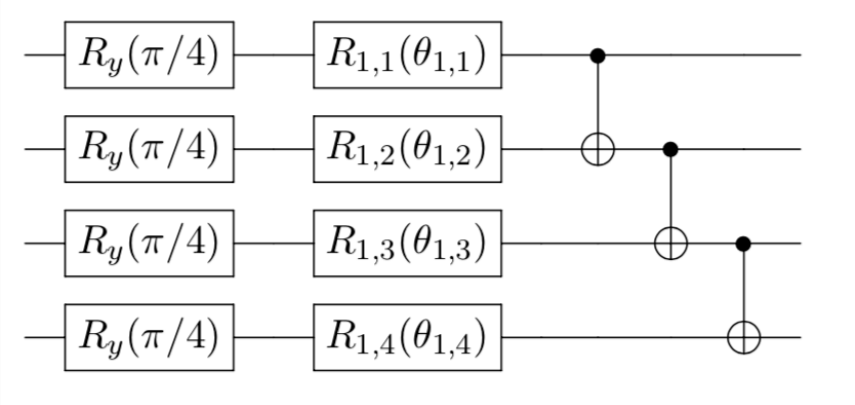
图片由 Gradient Descent Viz 生成

本教程主要讨论如何在量桨（PaddleQuantum）平台上展示贫瘠高原这一现象。其中并不涉及任何算法创新，但能提升读者对于量子神经网络训练中梯度问题的认识。首先我们先引入必要的 library和 package：

```
import time
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
import paddle.fluid as fluid
from paddle.fluid.framework import ComplexVariable
from paddle.complex import matmul, transpose
from paddle_quantum.circuit import UAnsatz
from paddle_quantum.utils import dagger
from paddle_quantum.state import density_op
```

随机的网络结构

这里我们按照原作者 McClean (2018)论文中提及的类似方法搭建如下随机电路（目前我们不支持内置的 control-Z 门，方便起见用 CNOT 替代）：



首先作用在所有量子比特上绕布洛赫球的 Y-轴旋转 $\pi/4$。

其余的结构加起来构成一个模块（Block），每个模块共分为两层：

- 第一层搭建随机的旋转门，其中 $R_{\ell,n} \in \{R_x, R_y, R_z\}$。下标 ℓ 表示处于第 ℓ 个重复的模块， 上图中 $\ell = 1$。第二个下标 n 表示作用在第几个量子比特上。
- 第二层由 CNOT 门组成，作用在每两个相邻的量子比特上。

在量桨中，我们可以这么搭建。

```python
def rand_circuit(theta, target, num_qubits):
    # 我们需要将 Numpy array 转换成 Paddle 动态图模式中支持的 variable
    const = fluid.dygraph.to_variable(np.array([np.pi/4]))

    # 初始化量子电路
    cir = UAnsatz(num_qubits)

    # ============== 第一层 ==============
    # 固定角度的 Ry 旋转门
    for i in range(num_qubits):
        cir.ry(const, i)

    # ============== 第二层 ==============
    # target是一个随机的数组,用来帮助我们抽取随机的单比特门
    for i in range(num_qubits):
        if target[i] == 0:
            cir.rz(theta[i], i)
        elif target[i] == 1:
            cir.ry(theta[i], i)
        else:
            cir.rx(theta[i], i)

    # ============== 第三层 ==============
    # 搭建两两相邻的 CNOT 门
    for i in range(num_qubits - 1):
        cir.cnot([i, i + 1])

    return cir.U
```

损失函数与优化曲面

当我们确定了电路的结构之后，我们还需要定义一个损失函数（Loss function）来确定优化曲面（Optimization landscape）。按照原作者 McClean (2018)论文中提及的，我们采用 VQE算法中常用的损失函数：

$$\mathcal{L} = \langle 0|U^\dagger(\boldsymbol{\theta})HU(\boldsymbol{\theta})|0\rangle$$

其中的酉矩阵 $U(\boldsymbol{\theta})$ 就是我们上一部分搭建的带有随机结构的量子神经网络。对于其中的哈密顿量 H 我们不妨先取最简单的形式 $H = |00\cdots0\rangle\langle 00\cdots0|$。设定好这些后，我们就可以从最简单的两个量子比特的情形开始采样了 -- 生成 300 组随机网络结构和不同的随机初始参数 $\{\theta_{\ell,n}^{(i)}\}_{i=1}^{300}$。每次计算梯度都是按照 VQE 的解析梯度公式计算关于**第一个参数** $\theta_{1,1}$ 的偏导数。然后统计得到的这 300 个梯度的平均值和方差。其中解析梯度的公式为：

$$\partial\theta_j \equiv \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\theta_j} = \frac{1}{2}\left[\mathcal{L}(\theta_j + \frac{\pi}{2}) - \mathcal{L}(\theta_j - \frac{\pi}{2})\right]$$

具体推导请参见：arXiv:1803.00745

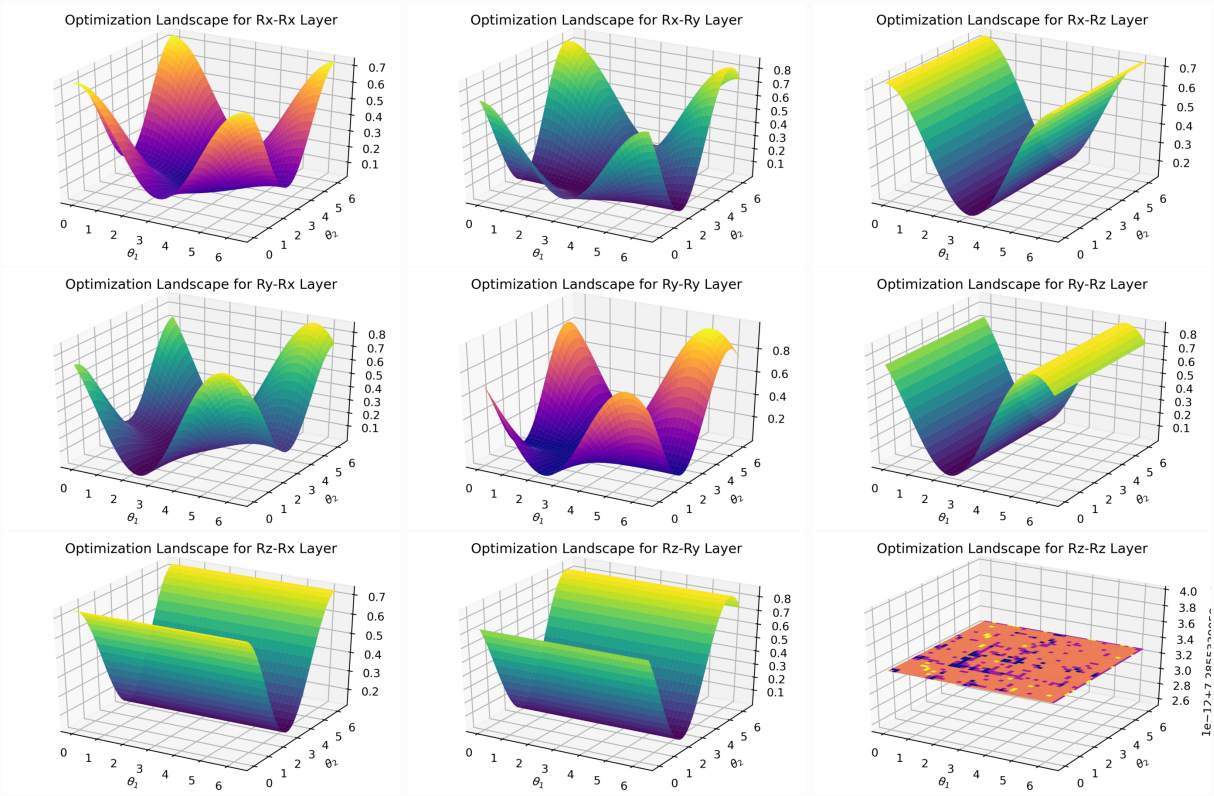
```
# 超参数设置
np.random.seed(42)          # 固定 Numpy 的随机种子
N = 2                       # 设置量子比特数量
samples = 300               # 设定采样随机网络结构的数量
THETA_SIZE = N              # 设置参数 theta 的大小
ITR = 1                     # 设置迭代次数
LR = 0.2                    # 设定学习速率
SEED = 1                    # 固定优化器中随机初始化的种子

# 初始化梯度数值的寄存器
grad_info = []

class manual_gradient(fluid.dygraph.Layer):

    # 初始化一个可学习参数列表，并用 [0, 2*pi] 的均匀分布来填充初始值
    def __init__(self, shape, param_attr=fluid.initializer.Uniform(
        low=0.0, high=2 * np.pi, seed=1),dtype='float64'):
        super(manual_gradient, self).__init__()

        # 将 Numpy array 转换成 Paddle 动态图模式中支持的 variable
        self.H = fluid.dygraph.to_variable(density_op(N))

    # 定义损失函数和前向传播机制
    def forward(self):

        # 初始化三个 theta 参数列表
        theta_np = np.random.uniform(
            low=0., high= 2 * np.pi, size=(THETA_SIZE))
        theta_plus_np = np.copy(theta_np)
        theta_minus_np = np.copy(theta_np)

        # 修改用以计算解析梯度
        theta_plus_np[0] += np.pi/2
        theta_minus_np[0] -= np.pi/2

        # 将 Numpy array 转换成 Paddle 动态图模式中支持的 variable
        theta = fluid.dygraph.to_variable(theta_np)
        theta_plus = fluid.dygraph.to_variable(theta_plus_np)
        theta_minus = fluid.dygraph.to_variable(theta_minus_np)

        # 生成随机目标，在 rand_circuit 中随机选取电路门
        target = np.random.choice(3, N)

        U = rand_circuit(theta, target, N)
        U_dagger = dagger(U)
        U_plus = rand_circuit(theta_plus, target, N)
        U_plus_dagger = dagger(U_plus)
        U_minus = rand_circuit(theta_minus, target, N)
        U_minus_dagger = dagger(U_minus)

        # 计算解析梯度
        grad = (matmul(matmul(U_plus_dagger,
```

```
                                self.H), U_plus).real[0][0]
                - matmul(matmul(U_minus_dagger,
                                self.H), U_minus).real[0][0])/2
        return grad

# 定义主程序段
def main():

    # 初始化paddle动态图机制
    with fluid.dygraph.guard():

        # 设置QNN的维度
        sampling = manual_gradient(shape=[THETA_SIZE])

        # 采样获得梯度信息
        grad = sampling()

    return grad.numpy()


# 记录运行时间
time_start = time.time()

# 开始采样
for i in range(samples):
    if __name__ == '__main__':
        grad = main()
        grad_info.append(grad)

time_span = time.time() - time_start
print('主程序段总共运行了', time_span, '秒')
print("采样", samples, "个随机网络关于第一个参数梯度的均值是：",
np.mean(grad_info))
print("采样", samples, "个随机网络关于第一个参数梯度的方差是：",
np.var(grad_info))
```

```
主程序段总共运行了 9.175814151763916 秒
采样 300 个随机网络关于第一个参数梯度的均值是： 0.005925709445960606
采样 300 个随机网络关于第一个参数梯度的方差是： 0.028249053148446363
```

优化曲面的可视化

接下来我们试着利用 Matplotlib来可视化这个优化曲面（Optimization landscape）。在**两个量子比特**的情况下，我们只有两个参数 θ_1 和 θ_2，并且第二层的随机电路电路总共有9种情况。这个很容易画出来：

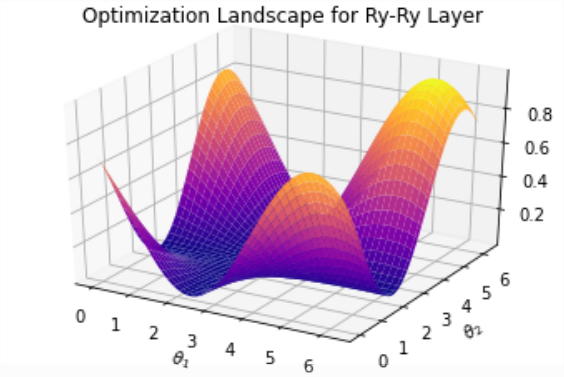


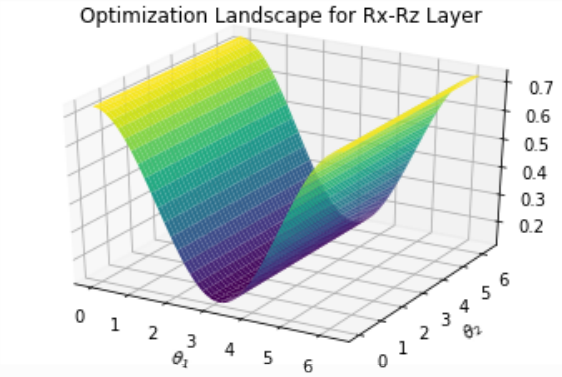
可以看到的是最后一张图中 R_z-R_z 结构所展示出的平原结构是我们非常不想见到的。在这种情况下，我们不能收敛到理论最小值。如果你想自己试着画一些优化曲面，不妨参见以下代码：

```
# 引入必要的 package
from matplotlib import cm
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
from matplotlib.ticker import LinearLocator, FormatStrFormatter

time_start = time.time()
N = 2

# 设置图像比例 竖：横 = 0.3
fig = plt.figure(figsize=plt.figaspect(0.3))

# 生成 x, y 轴上的点
X = np.linspace(0, 2*np.pi, 80)
Y = np.linspace(0, 2*np.pi, 80)

# 生成 2D 网格 (mesh)
xx, yy = np.meshgrid(X, Y)
```

```
18
19
20  # 定义必要的逻辑门
21  def rx(theta):
22      mat = np.array([[np.cos(theta/2), -1j*np.sin(theta/2)],
23                      [-1j*np.sin(theta/2), np.cos(theta/2)]])
24      return mat
25
26  def ry(theta):
27      mat = np.array([[np.cos(theta/2), -1*np.sin(theta/2)],
28                      [np.sin(theta/2), np.cos(theta/2)]])
29      return mat
30
31  def rz(theta):
32      mat = np.array([[np.exp(-1j*theta/2), 0],
33                      [0, np.exp(1j*theta/2)]])
34      return mat
35
36  def CNOT():
37      mat = np.array([[1,0,0,0],[0,1,0,0],[0,0,0,1],[0,0,1,0]])
38      return mat
39
40  # ============= 第一张图 =============
41  # 我们可视化第二层是 kron(Ry, Ry) 的情况
42  ax = fig.add_subplot(1, 2, 1, projection='3d')
43
44  # 向前传播计算损失函数:
45  def cost_yy(para):
46      L1 = np.kron(ry(np.pi/4), ry(np.pi/4))
47      L2 = np.kron(ry(para[0]), ry(para[1]))
48      U = np.matmul(np.matmul(L1, L2), CNOT())
49      H = np.zeros((2 ** N, 2 ** N))
50      H[0, 0] = 1
51      val = (U.conj().T @ H@ U).real[0][0]
52      return val
53
54  # 画出图像
55  Z = np.array([[cost_yy([x, y]) for x in X] for y in
    Y]).reshape(len(Y), len(X))
56  surf = ax.plot_surface(xx, yy, Z, cmap='plasma')
57  #cset = ax.contourf(xx, yy, Z, zdir='z', offset=np.min(Z),
    cmap='viridis')
58  ax.set_xlabel(r"$\theta_1$")
59  ax.set_ylabel(r"$\theta_2$")
60  ax.set_title("Optimization Landscape for Ry-Ry Layer")
61  #fig.colorbar(surf, shrink=0.5, aspect=5)
62
63  # ============= 第二张图 =============
64  # 我们可视化第二层是 kron(Rx, Rz) 的情况
65  ax = fig.add_subplot(1, 2, 2, projection='3d')
66
67
```

```python
def cost_xz(para):
    L1 = np.kron(ry(np.pi/4), ry(np.pi/4))
    L2 = np.kron(rx(para[0]), rz(para[1]))
    U = np.matmul(np.matmul(L1, L2), CNOT())
    H = np.zeros((2 ** N, 2 ** N))
    H[0, 0] = 1
    val = (U.conj().T @ H@ U).real[0][0]
    return val

Z = np.array([[cost_xz([x, y]) for x in X] for y in Y]).reshape(len(Y), len(X))
surf = ax.plot_surface(xx, yy, Z, cmap='viridis')
#cset = ax.contourf(xx, yy, Z, zdir='z', offset=np.min(Z), cmap='viridis')
ax.set_xlabel(r"$\theta_1$")
ax.set_ylabel(r"$\theta_2$")
ax.set_title("Optimization Landscape for Rx-Rz Layer")


plt.show()

time_span = time.time() - time_start
print('主程序段总共运行了', time_span, '秒')
```






```
主程序段总共运行了 2.8104310035705566 秒
```

更多的量子比特

接着我们再看看不断的增加量子比特的数量，会对我们的梯度带来什么影响。

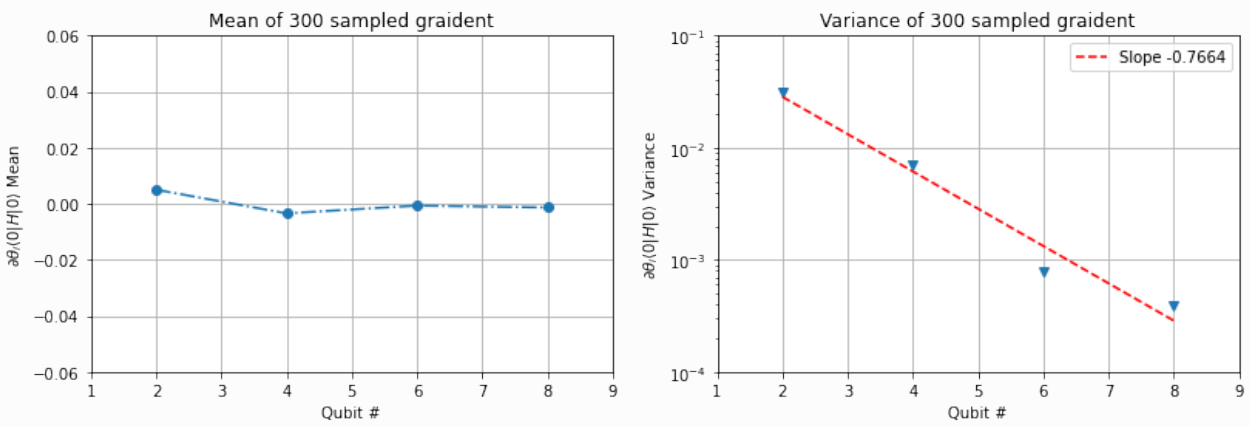
```
# 超参数设置
selected_qubit = [2, 4, 6, 8]
samples = 300
grad_val = []
means, variances = [], []


# 记录运算时长
time_start = time.time()

# 不断增加量子比特数量
for N in selected_qubit:
    grad_info = []
    THETA_SIZE = N
    for i in range(samples):
        class manual_gradient(fluid.dygraph.Layer):
            # 初始化一个长度为 THETA_SIZE 的可学习参数列表
            def __init__(self, shape, param_attr=
                fluid.initializer.Uniform(low=0.0, high=2 * np.pi,
                seed=1),dtype='float64'):
                super(manual_gradient, self).__init__()

                # 转换成 Paddle 动态图模式中支持的 variable
                self.H = fluid.dygraph.to_variable(
                         density_op(N))

            # 定义损失函数和前向传播机制
            def forward(self):

                # 初始化三个 theta 参数列表
                theta_np = np.random.uniform(
                    low=0., high= 2 * np.pi, size=(THETA_SIZE))
                theta_plus_np = np.copy(theta_np)
                theta_minus_np = np.copy(theta_np)

                # 修改用以计算解析梯度
                theta_plus_np[0] += np.pi/2
                theta_minus_np[0] -= np.pi/2

                # 转换成 Paddle 动态图模式中支持的 variable
                theta = fluid.dygraph.to_variable(theta_np)
                theta_plus = fluid.dygraph.to_variable(
                             theta_plus_np)
                theta_minus = fluid.dygraph.to_variable(
                              theta_minus_np)

```

```
                # 生成随机目标，在 rand_circuit 中随机选取电路门
                target = np.random.choice(3, N)

                U = rand_circuit(theta, target, N)
                U_dagger = dagger(U)
                U_plus = rand_circuit(theta_plus,
                                      target, N)
                U_plus_dagger = dagger(U_plus)
                U_minus = rand_circuit(theta_minus,
                                       target, N)
                U_minus_dagger = dagger(U_minus)


                # 计算解析梯度
                grad = ( matmul(matmul(U_plus_dagger,
                                self.H), U_plus).real[0][0]
                        - matmul(matmul(U_minus_dagger,
                                self.H), U_minus).real[0][0])/2

                return grad


        # 定义主程序段
        def main():

            # 初始化paddle动态图机制
            with fluid.dygraph.guard():

                sampling = manual_gradient(shape=[THETA_SIZE])

                # 采样获得梯度信息
                grad = sampling()

            return grad.numpy()

        if __name__ == '__main__':
            grad = main()
            grad_info.append(grad)

    # 记录采样信息
    grad_val.append(grad_info)
    means.append(np.mean(grad_info))
    variances.append(np.var(grad_info))
```

```
grad = np.array(grad_val)
means = np.array(means)
variances = np.array(variances)
n = np.array(selected_qubit)
print("我们接着画出这个采样出来的梯度的统计结果：")
```

```
fig = plt.figure(figsize=plt.figaspect(0.3))


# ============= 第一张图 =============
# 统计出随机采样的梯度平均值和量子比特数量的关系
plt.subplot(1, 2, 1)
plt.plot(n, means, "o-.")
plt.xlabel(r"Qubit #")
plt.ylabel(r"$ \partial \theta_{i} \langle 0|H |0\rangle$ Mean")
plt.title("Mean of {} sampled graident".format(samples))
plt.xlim([1,9])
plt.ylim([-0.06, 0.06])
plt.grid()

# ============= 第二张图 =============
# 统计出随机采样的梯度的方差和量子比特数量的关系
plt.subplot(1, 2, 2)
plt.semilogy(n, variances, "v")

# 多项式拟合
fit = np.polyfit(n, np.log(variances), 1)
slope = fit[0]
intercept = fit[1]
plt.semilogy(n, np.exp(n*slope  + intercept), "r--", label="Slope {:03.4f}".format(slope))
plt.xlabel(r"Qubit #")
plt.ylabel(r"$ \partial \theta_{i} \langle 0|H |0\rangle$ Variance")
plt.title("Variance of {} sampled graident".format(samples))
plt.legend()
plt.xlim([1,9])
plt.ylim([0.0001, 0.1])
plt.grid()

plt.show()
```

我们接着画出这个采样出来的梯度的统计结果：



要注意的是，在理论上，只有当我们选取的网络结构还有损失函数满足一定条件时 (2-design)详见论文(1), 才会出现这种效应。接着我们不妨可视化一下不同量子比特数量对的优化曲面的影响：

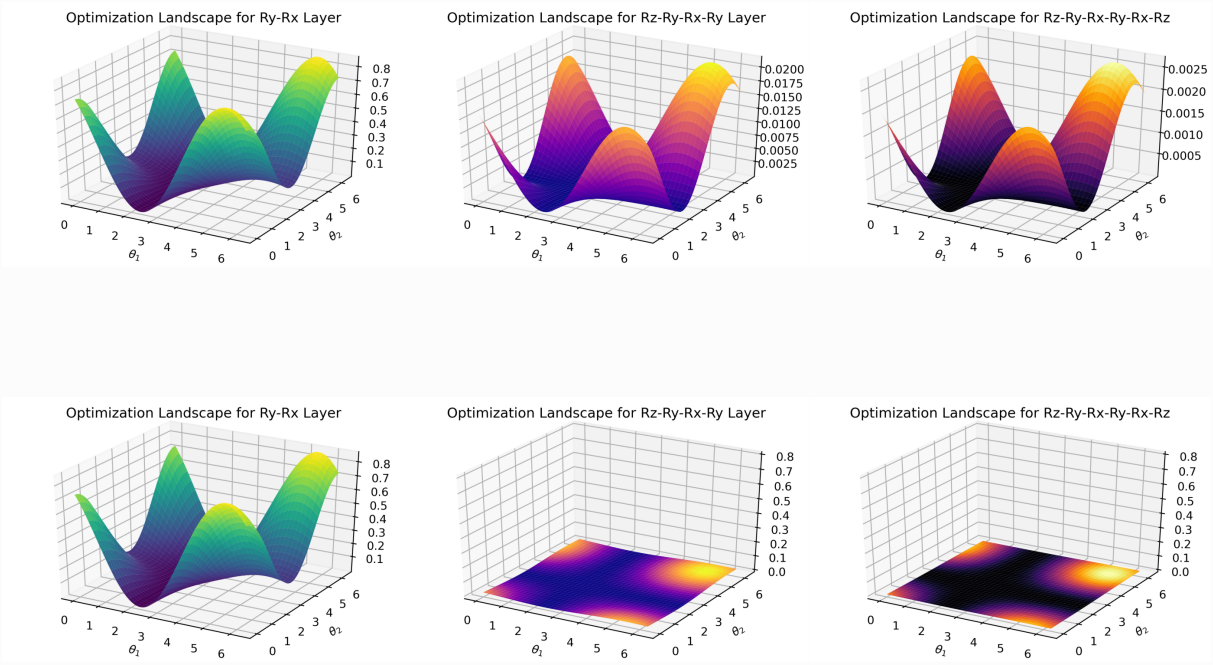


图 1. (a). 2-量子比特 (b). 4-量子比特 (c). 6-量子比特

画图时 θ_1 和 θ_2 是前两个电路参数, 剩余参数全部固定为 π。不然我们画不出这个高维度的流形。结果不出所料，陡峭程度随着 n 的增大越来越小了，**注意到 Z 轴尺度的极速减小**。相对于2量子比特的情况，6量子比特的优化曲面已经非常扁平了。

参考文献

(1) McClean, J. R., Boixo, S., Smelyanskiy, V. N., Babbush, R. & Neven, H. Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. Nat. Commun. 9, 4812 (2018).

(2) Cerezo, M., Sone, A., Volkoff, T., Cincio, L. & Coles, P. J. Cost-Function-Dependent Barren Plateaus in Shallow Quantum Neural Networks. arXiv:2001.00550 (2020).