带无界循环的可微分量子编程

Differentiable Quantum Programming with Unbounded Loops

方望、应明生、伍骁迪

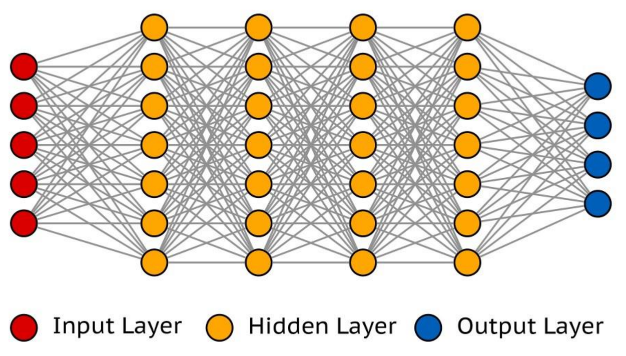
ACM Transactions on Software Engineering and Methodology

联系方式：fangw@ios.ac.cn

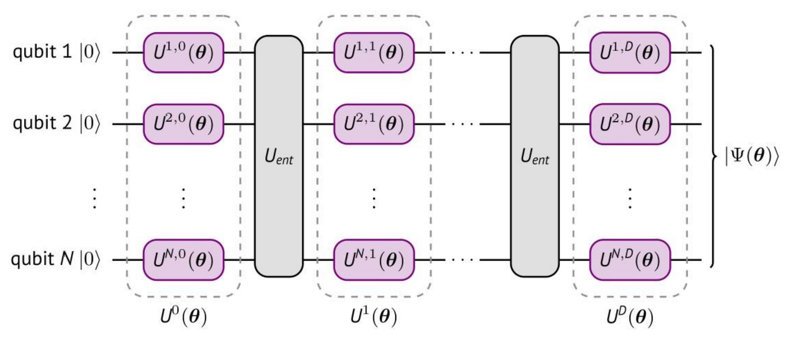
Github Repo

研究背景

带参数量子电路



经典神经网络



带参数量子电路

- 作为一个**具有强大表达能力**的模型被应用到量子机器学习领域 。
- 用以发掘现今量子计算硬件的潜能。

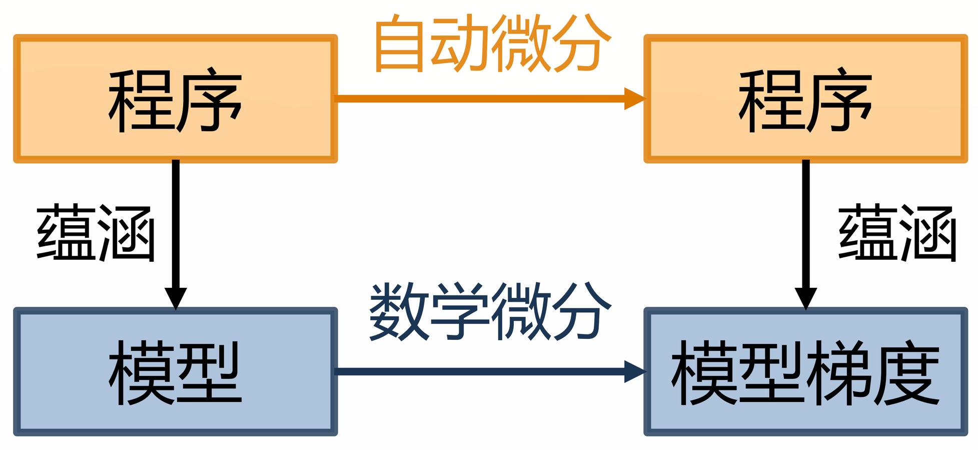
可微分编程与自动微分

经典机器学习框架：PyTorch TensorFlow

- 编写带**可训练参数**的模型。
- 通过**自动微分**计算梯度。

新的编程范式——**可微分编程**

- 编写高级的算法框架，留下一部分参数待定。
- 程序被参数化，具有可微性。



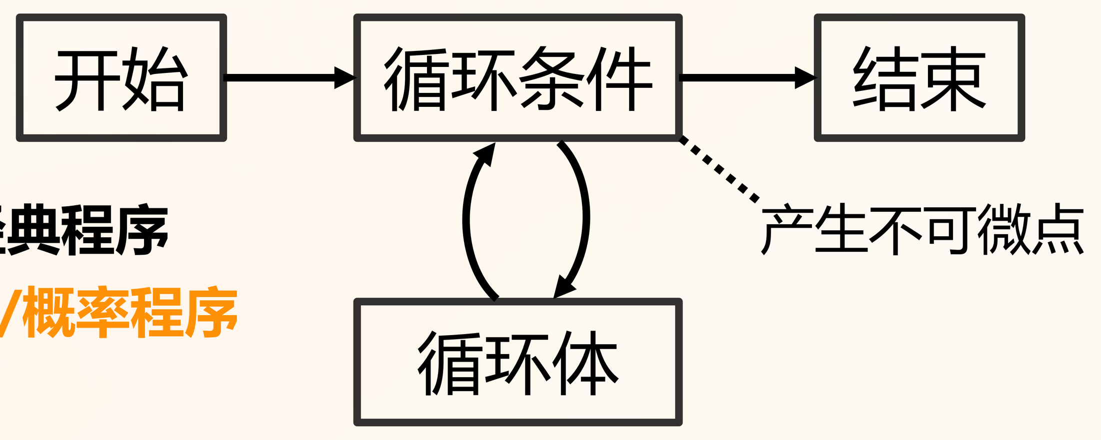
Deep Learning est mort.
Vive Differentiable Programming!
--- Yann LeCun

可微分量子编程

- 设计带参数量子程序：**参数化酉操作** $U = e^{-i\theta H}$
- 研究带参数量子程序的可微性
- 实现带参数量子程序的自动微分

无界循环的可微性

- **条件语句** → 函数分段定义、产生**不可微点**
  $\mathrm{ReLu}(x) \equiv \lambda x.\ \mathbf{if}\ x < 0\ \mathbf{then}\ 0\ \mathbf{else}\ x$
- 程序**语义**上的连续 ≠ 程序**语法**上的连续
  $\mathrm{SillyId}(x) \equiv \lambda x.\ \mathbf{if}\ x = 0\ \mathbf{then}\ 0\ \mathbf{else}\ x$
- **循环语句**将会使得上述简单情形变得复杂



一条执行路径 vs. 可能无限条执行路径

表：经典、概率和量子程序之间的比较

	经典	概率	量子
# 执行路径	1	**可能无限**	**可能无限**
路径概率分布	无	显式的	**隐式的**
链式求导法则	可用	可用	**不可用**

无限条路径的概率分布 → 无限求和的可微性
$F(\boldsymbol{\theta}) = \sum_\pi \mu_\pi(\boldsymbol{\theta}) f_\pi(\boldsymbol{\theta})$是否可微？

反例：处处不可微

借助Weierstrass的不可微函数，我们可以使用量子程序构造出**处处连续，但处处不可微**的函数。

$$S(\theta) \equiv \sum_k^\infty \frac{\sin(2^k\theta)}{2^k}$$

无界量子循环的可微性

充分条件：**有限维状态空间**

关键点：**有限维希尔伯特空间的紧致性**

引理：$\mathbf{Pr}$[程序在第$\boldsymbol{n}$次迭代结束循环] $\le \boldsymbol{c} \cdot \boldsymbol{\epsilon}^{\boldsymbol{n}}$

$$\sum_\pi \partial_\theta\big(\mu_\pi(\boldsymbol{\theta}) f_\pi(\boldsymbol{\theta})\big)$$ 一致收敛

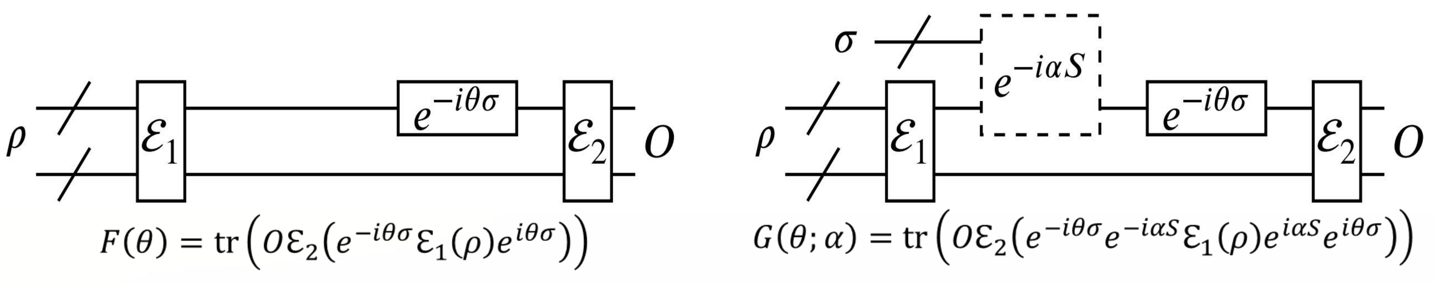
$$\partial_\theta \sum_\pi \mu_\pi(\boldsymbol{\theta}) f_\pi(\boldsymbol{\theta}) = \partial_\theta F(\boldsymbol{\theta})$$ 存在且连续

无界量子循环的自动微分

分离成两个模块：

- 带参数量子电路求导：带参数量子程序底层模型
- 无穷循环扩展：无穷求和转化为随机变量期望

带参数量子电路求导



图：对易子形式求导规则

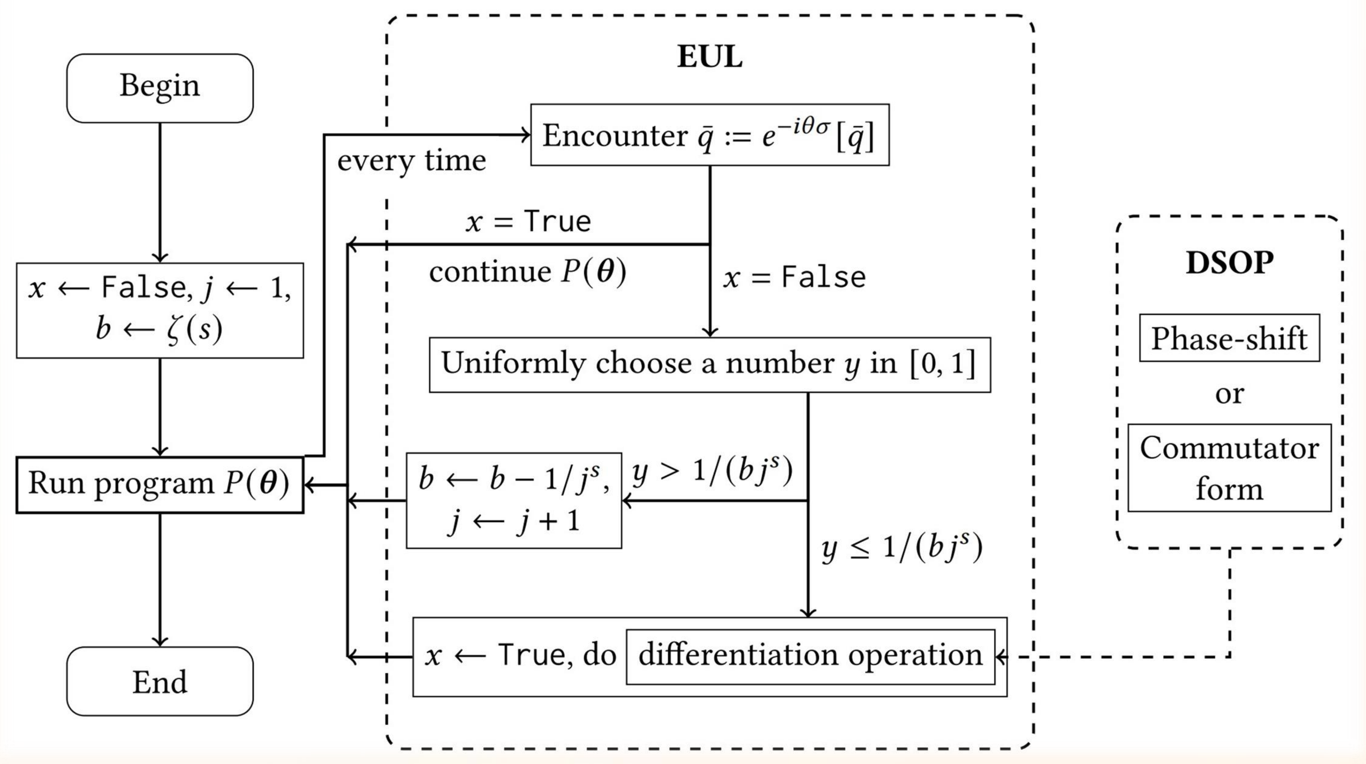
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}F(\theta) = \frac{1}{\sin(2\alpha)}G(\theta;\alpha) - G(\theta;-\alpha)$$

无界循环拓展

已有工作做法：

- 应用带参数电路求导规则求出所有偏导数。
- 无界循环 → 无穷项偏导数$\sum_{j=1}^\infty a_j$，已有工作 ✖

本工作：引入随机变量估计导数



依照上图构造随机变量$\mathrm{Pr}\left[X = a_j/\mu_j\right] = \mu_j$的流程，通过**源代码层面的代码转换规则**，将原始程序$P(\boldsymbol{\theta})$转换成微分程序$Q(\boldsymbol{\theta})$，使得$Q(\boldsymbol{\theta})$的输出恰好是$P(\boldsymbol{\theta})$的导数

采样复杂度

估计$Q(\boldsymbol{\theta})$表示的随机变量X的期望 → 限制其方差。

- 不加限制，X的方差可以无穷大：不高效。
- 找到**方差有界性条件**：$\lim_{n\to\infty}\sqrt[n]{\mu_n} = 1$。
- 给出一族μ_n使得采样复杂度符合上已有工作不能处理无限循环的方法。

总结

本工作研究了带无界循环量子程序的自动微分：

- 我们为带参数量子程序的可微性找到了一个**充分条件——有限维状态空间**。这个条件在实际应用中是简洁且合理的。
- 在上述条件下，我们建立了**源代码层面的代码转换规则**来实现**自动微分**，并证明了**正确性**。
- 为了说明提出方法的有效性，我们给出了一个符合上已有仅能处理有界循环的工作的采样复杂度。
- 除此之外，我们还将提出的方法实现成了一个**原型工具**，并在若干例子上做了案例分析。