

量子自适应搜索：一种用于多变量函数全局优化的混合量子-经典算法

G. Intoccia¹, U. Chirico^{1,2}, V. Schiano Di Cola², G. Pepe¹, S. Cuomo¹

¹ 那不勒斯腓特烈二世大学 ² 量子 2 π 股份有限公司

摘要

本工作提出了量子自适应搜索 (QAGS)，这是一种用于多变量函数全局优化的混合量子-经典算法。该方法采用了一种自适应机制，基于目标函数的量子估计概率分布动态地缩小搜索空间。一个量子状态通过适当的复振幅映射编码了解的质量信息，使得能够识别最有前景的区域，并逐步收紧搜索范围；然后经典的优化器对解决方案进行局部细化。分析表明，QAGS 确保了搜索空间向全局最优值收缩，具有可控的计算复杂度。在基准函数上的数值结果表明，与经典方法相比，QAGS 实现了更高的精度，同时在时间和空间复杂性方面也具有优势。

1. 介绍

量子优化算法旨在利用量子力学原理来解决由于变量数量呈指数级增长而在经典计算中难以处理的问题。变分方法如变分量子本征解算器 (VQE) 和量子近似优化算法 (QAOA) 已经获得了广泛的关注。QAOA 通过交替应用代价哈密顿量和混合哈密顿量以非经典的方式探索解空间，同时一个经典的优化器迭代地调整参数以最大化目标哈密顿量的期望值。正如原始工作 Farhi et al. (2014) 所示，这种方法对于诸如最大割 (MaxCut) 之类的问题可以提供理论优势，量子叠加允许采样难以用经典方法探索的状态。尽管存在有前景的理论加速效果，现实中实施的量子算法到目前为止除了在高度专门化的场景下和需要大量资源外，并未显示出显著优于经典方法的优势。事实上，已经证明对于最大割问题，实现量子优越性需要数百个量子比特 Guerreschi and Matsuura (2019)，即使 QAOA 表现出加速效应，这些也往往被纠错的开销以及多次测量的需求所抵消。基准测试 Shaydulin and Alexeev (2019) 显示，QAOA 的 NISQ (噪声中等规模量子) 实现仅实现了微小改进，性能对参数和问题结构高度敏感，限制了其当前的可扩展性。

在这项工作中，我们引入了一种非变分方法来解决优化连续 n 变量函数的问题。具体来说，我们提出了一种结合幅度编码的混合非变分方法，作为上述量子优化算法的一种替代方案。这种方法可能在计算上优于当前的经典算法，特别是在处理大规模问题和寻找高维域中复杂函数极小值时。QAGS 算法有效地结合了量子计算与经典优化技术的优点，其实现使得克服维度灾难成为可能。

2. 方法实现

我们考虑寻找一个在 d 维域上定义的函数 $f: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ 的全局最小值问题。

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x} \in \Omega} f(\mathbf{x}) \quad \Omega = \prod_{i=1}^d [l_i, u_i] \quad (1)$$

其中 $[l_i, u_i]$ 是每个变量 x_i 的初始边界。

算法开始在初始空间上定义一个网格。对于每个维度 i ，我们在区间 $[l_i, u_i]$ 上离散化为 2^n 个点，其中 n 是每个维度的量子比特数：

$$x_{ij} = l_i + j \frac{u_i - l_i}{2^n - 1}, \quad j = 0, \dots, 2^n - 1 \quad (2)$$

这种离散化创建了一个均匀网格，将经典点映射到量子态。我们构造了一个其振幅编码目标函数值的量子态。

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{f(\mathbf{x}) - f_{\min}}{\sigma} \right) \quad (3)$$

其中：

- $f_{\min}$ 是当前最小值
- σ 是标准差
- Z 归一化状态。

算法在网格 $\mathbf{x} \in \mathcal{G}$ 的所有点上评估 f 并构造一个量子态：

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{G}} \sqrt{d(\mathbf{x})} |\mathbf{x}\rangle \quad (4)$$

其中概率振幅是从函数值推导出来的：

$$d(\mathbf{x}) \propto \frac{\exp \left(-\frac{f(\mathbf{x}) - f_{\min}}{\sigma} \right)}{Z} \quad (5)$$

振幅编码遵循玻尔兹曼分布，该分布给出了系统处于某一状态的概率作为该状态能量和系统温度的函数。

$$p(\mathbf{x}) \propto \exp \left(-\frac{f(\mathbf{x})}{kT_{\text{eff}}} \right) \quad (6)$$

其中 $kT_{\text{eff}} = \sigma$ 和基态能量偏移了 $f_{\min}$ 。

量子电路测量状态 $|\psi\rangle$ ，得到的概率为：

$$P(\mathbf{x}) = |\langle \mathbf{x} | \psi \rangle|^2 \quad (7)$$

这些概率构成了搜索空间上的离散概率分布，较高的概率对应于更有希望的区域。我们将最具潜力的区域识别为包含前 25% 概率质量的区域：

$$\Omega_h^{(k)} = \{\mathbf{x} | P(\mathbf{x}) \geq P_{75}\} \quad (8)$$

每个维度的新界限是通过限制到 $\Omega_h^{(k)}$ 的投影来计算的，其中点代表与选定概率振幅相对应的量子态的十进制编码。这给出了优化后的搜索域：

$$[l_i^{(k+1)}, u_i^{(k+1)}] = [\max(l_i, \min x_i), \min(u_i, \max x_i)]_{\mathbf{x} \in \Omega_h^{(k)}} \quad (9)$$

这将搜索空间缩小到包含高概率区域的超矩形内。

然后在优化的边界内应用一个经典的优化程序来确定解。

$$\mathbf{x}_l^{(k+1)} = \arg \min_{\mathbf{x} \in [l^{(k+1)}, u^{(k+1)}]} f(\mathbf{x}) \quad (10)$$

算法在以下情况下终止：

- 搜索空间的收缩变得微不足道 ($|\mathbf{u}^{(k+1)} - \mathbf{l}^{(k+1)}| < \delta$)
- 最大迭代次数已达到 ($k = K_{\max}$)
- 量子分布变得过于集中

搜索空间的逐步收缩确保了：

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Vol}(\Omega^{(k)}) = 0 \quad (11)$$

以概率密度集中在全局最小值周围。

示例 1. 我们考虑一个二维函数优化问题，其中包含：

- 全局界限： $x_1 \in [-5, 5]$, $x_2 \in [-10, 10]$
- 当前有希望的区域 $\Omega_h^{(k)}$ ： $x_1 \in [-2.1, 1.8]$, $x_2 \in [3.5, 7.2]$

更新后的界限变为：

- 对于 x_1 ： $[\max(-5, -2.1), \min(5, 1.8)] = [-2.1, 1.8]$
- 对于 x_2 ： $[\max(-10, 3.5), \min(10, 7.2)] = [3.5, 7.2]$

此策略确保：

- 搜索空间的逐步收缩
- 边界从不超过原始限制

3. 实验分析

所提出的量子-经典混合方法展示了令人信服的理论优势，尽管其实际实现需要仔细考虑几个关键因素。

模拟结果使用 Python 3.10, NumPy 1.24 和 Qiskit 1.0.0 获得。

然而，在实际硬件上实现振幅编码仍然具有挑战性，特别是当使用大量量子比特时，因为实施大量的门变得不切实际。

因此，这里展示的结果利用了每个维度的有限数量的量子比特，尤其是随着问题维度的增加。

尽管如此，我们的方法设计明确考虑了这一约束条件，提供了一个显著优势：

- 在密集网格上需要大量量子比特的量子方法（例如，VQE）
- 经典方法需要大量采样以获得更高的精度

虽然低量子比特数可能仅对非常大的域构成挑战，但该方法在大多数场景中仍然极具前景。

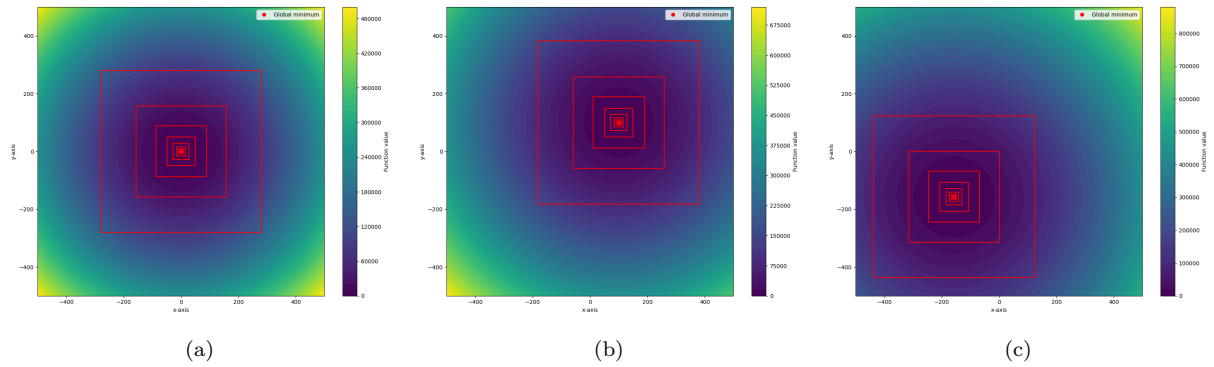


图 1: 二维球面函数的搜索空间逐步细化，针对三个不同的全局最小值：(a) 最小值位于 $(0, 0)$ ，(b) 最小值位于 $(100, 100)$ ，以及 (c) 最小值位于 $(-50\pi, -50\pi) \approx (-157.08, -157.08)$ 。在每个图中，红色点标记真正的全局最小值 (x^*, y^*) ，而红色矩形代表量子搜索算法连续迭代过程中的边界框。

为了可视化搜索过程的行为，我们考虑 2D Sphere 函数：

$$f(x, y) = (x - x^*)^2 + (y - y^*)^2$$

我们展示了三个不同的矩形边界框序列，这些序列模拟了搜索域的迭代收缩。在每个图中，红色矩形表示连续迭代中的边界，而红点标记真正最小值。随着迭代的进行，边界变得越来越窄，并集中在全局最优值周围。

测试了结果准确性，使用了标准优化基准函数，详情如下以及算法的性能结果。使用的经典优化器是 `scipy.optimize.minimize`，默认方法为 L-BFGS-B（一种拟牛顿有界优化算法）。

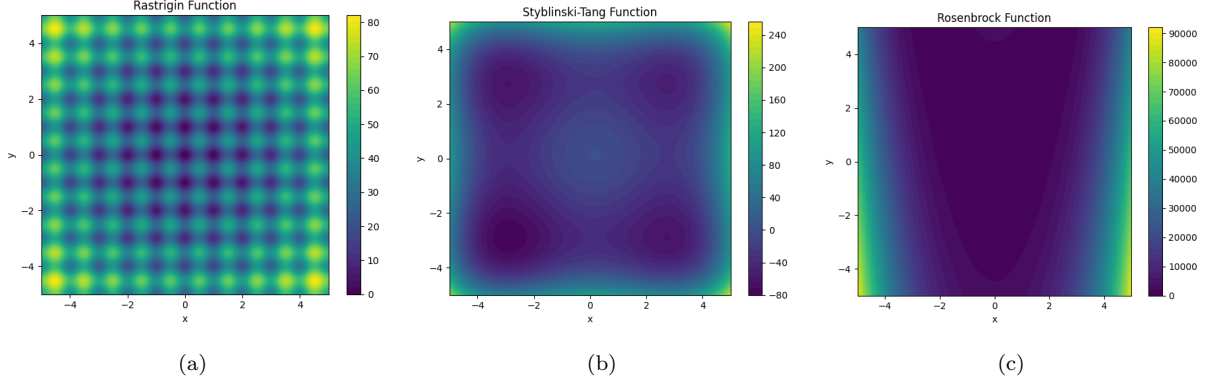


图 2: 在基准函数上测试优化算法。实验结果突出显示了性能和鲁棒性。

Rastrigin 函数. *Rastrigin* 函数 (图 2(a)) 定义如下:

$$f(\mathbf{x}) = 10n + \sum_{i=1}^n [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)], \quad (12)$$

其中, 定义域为 $[-5.12, 5.12]^n$, 全局最小值位于 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, 值为 $f(\mathbf{0}) = 0$ 。

如表 1 所示, 该算法在应用于 *Rastrigin* 函数的仿真时几乎产生了精确的结果。

维度	配置	找到点	结果	实数最小值	绝对误差
2	5 qubits	[0.00, 0.00]	0.00	0.00	0.00
3	4 qubits	[0.00, 0.00, 0.00]	0.00	0.00	0.00
5	3 qubits	[0.00, 0.00, 0.00, 0.00, 0.00]	0.00	0.00	0.00
8	2 qubits	[0.00, 0.00, 0.00, ..., 0.00]	0.00	0.00	0.00

表 1: *Rastrigin* 函数的结果。

Styblinski-Tang 函数. *Styblinski-Tang* 函数 (图 2(b)) 定义如下:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i), \quad (13)$$

其中定义域为 $[-5, 5]^n$, 全局最小值为 $x_i \approx -2.903534$, 且 $f(\mathbf{x}) \approx -39.166n$ 。

维度	配置	找到点	结果	真实最小值	绝对误差
2	5 qubits	[-2.90, -2.90]	-78.33	-78.33	1.31×10^{-4}
3	4 qubits	[-2.90, -2.90, -2.90]	-117.50	-117.50	1.97×10^{-4}
5	3 qubits	[-2.90, -2.90, -2.90, -2.90, -2.90]	-195.83	-195.83	3.29×10^{-4}
8	2 qubits	[-2.90, -2.90, -2.90, ..., -2.90]	-313.33	-313.33	5.26×10^{-4}

表 2: *Styblinski - Tang* 函数结果

罗斯布罗克函数. Rosenbrock 函数 (图 2(c)) 为

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n-1} [100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (1 - x_i)^2], \quad (14)$$

其中定义域为 $\mathbb{R}^n$ 。在 $\mathbf{x} = (1, \dots, 1)$ 中的全局最小值, 为 $f(\mathbf{x}) = 0$ 。

维度	配置	找到点	结果	实最小值	绝对误差
2	5 qubits	[1.00, 1.00]	0.00	0.00	2.00×10^{-15}
3	4 qubits	[1.00, 1.00, 1.00]	0.00	0.00	4.80×10^{-13}

表 3: Rosenbrock 函数结果 ($[-500, 500]^n$ 域)

表 3 展示了在广泛领域 ($[-500, 500]^n$) 内高度准确的结果, 表明了相对于经典方法的显著优势。然而, 在不相应增加量子比特数量的情况下提高维度可能会损害解的精度和收敛性, 可能导致搜索趋向次优区域。为了在没有额外量子比特的情况下保持高性能, 在更高维度中限制领域变得至关重要, 这已在表 4 所示结果中得到证明。

维度	配置	找到的点	结果	实数最小值	绝对误差
5	3 qubits	[1.00, 1.00, 1.00, 1.00, 1.00]	0.00	0.00	1.70×10^{-14}
8	2 qubits	[1.00, 1.00, 1.00, 1.00, 1.00]	0.00	0.00	1.70×10^{-14}

表 4: Rosenbrock 函数结果 ($[-10, 10]^n$ 域)

3.1. 经典与量子对比分析

本节展示了 QAGS 算法与自适应网格搜索之间的性能比较。结果显示, 特别是在内存效率方面, 量子-经典混合方法具有显著优势。所有测试均在球形函数上进行。

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^d x_i^2, \quad (15)$$

表 5 显示, 在经典方法和量子方法都达到收敛时, 量子方法显示出显著减少的执行时间和内存使用。这些结果是在一个受限域 $[-5, 5]^d$ 中获得的。

维度	时间（秒）		内存（MB）		解的值	
	Quantum	Classic	Quantum	Classic	Quantum	Classic
2	0.18	0.33	920.62	2956.47	0.00	0.00
5	0.63	1.46	920.62	2956.47	0.00	0.01
7	0.29	0.94	920.62	2956.51	0.00	0.00
8	1.09	5.94	920.64	2956.51	0.00	0.00
10	17.90	164.31	920.64	7654.20	0.00	0.00

表 5: 比较优化结果对于 $[-5, 5]^d$

图 3 显示了两种方法的比较内存使用情况。图 4 表明，量子方法展示了随维度变化的表现可变量性缩放，而经典方法在低维空间中表现出更一致的行为，但在高维空间中的扩展性能逐渐恶化。

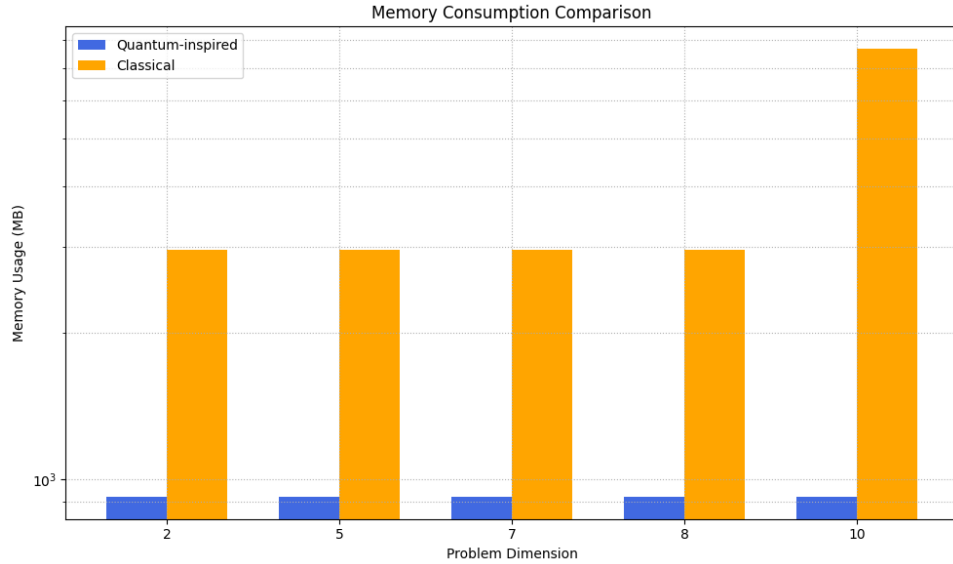


图 3: 内存使用分布于混合量子计算（域 $[-5, 5]^d$ ）。

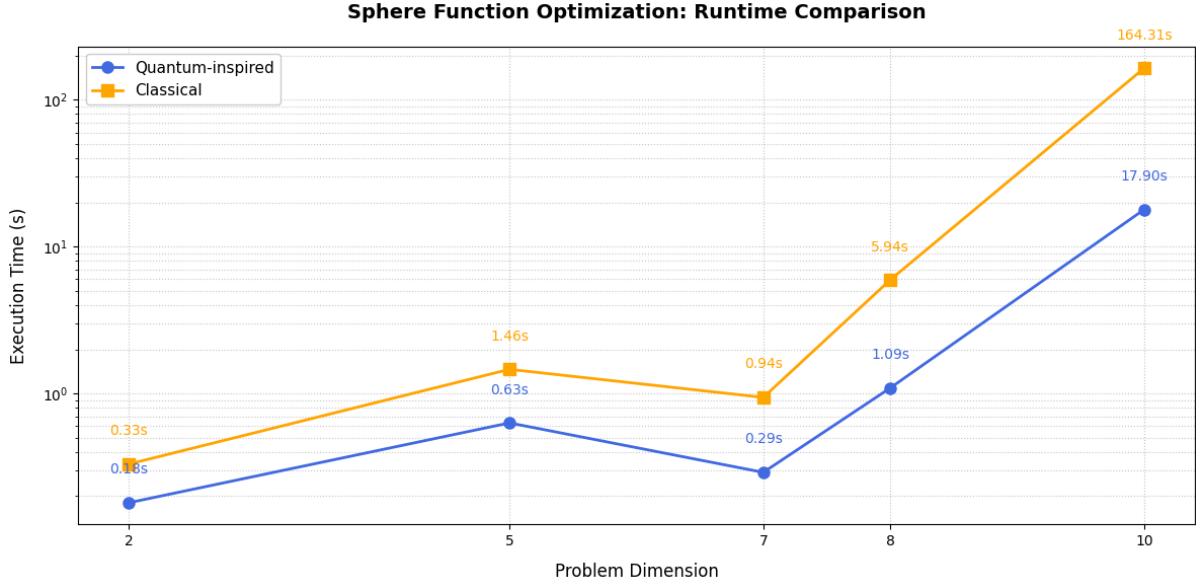


图 4: Sphere 函数优化的比较性能分析 (域 $[-5, 5]^d$)。

我们现在检查当扩展域范围时，这种性能趋势是否持续。表 6 展示了在扩展域 $[-500, 500]^d$ 中评估的 Sphere 函数的经典与量子基准测试结果。

维度	时间 (秒)		内存 (MB)		解值	
	Quantum	Classic	Quantum	Classic	Quantum	Classic
2	0.09	0.30	402.51	142.59	1.62e-27	0.05
5	0.30	0.11	407.68	635.05	0.00	0.00
7	0.32	0.91	407.70	175.76	0.00	0.00
8	1.04	4.98	417.31	307.67	0.00	0.00
10	17.41	151.94	640.95	5204.81	0.00	0.00

表 6: 比较优化结果对于 Sphere 函数 (定义域 $[-500, 500]^d$)

我们的分析首先考察了经典内存行为，这在领域变化中保持近似恒定。这种稳定性源自为解决计算约束而实施的自适应网格点选择策略。具体来说，经典方法被修改以减少网格密度同时保持收敛保证，因为过多的网格点（受限于维数灾难）之前导致运行时失败。这种优化在较低维度下创造了相对于量子方法的明显内存优势。

然而，在更高维度时基本的量子优势变得明显。在维度 $d=10$ 的情况下，比较测量显示量子方法所需的内存比经典实现少 87.7%。

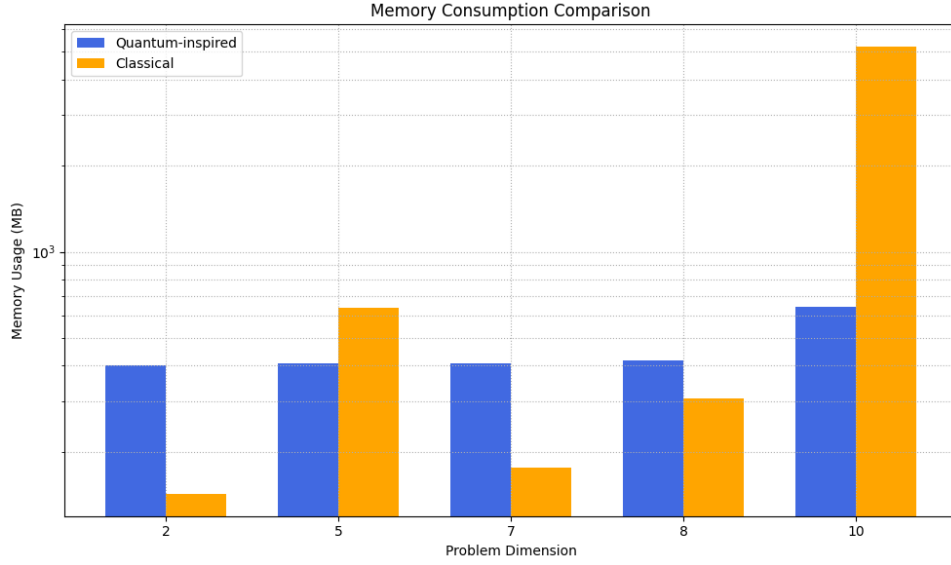


图 5: 内存使用分布于混合量子计算（域 $[-500, 500]^d$ ）。

在运行性能中也观察到了相同的行为，因为在某些维度上减少网格点可能会使结果产生偏差。然而，数据清楚地表明，在第 10 维时，量子方法与经典方法相比将计算时间减少了 88.54%。

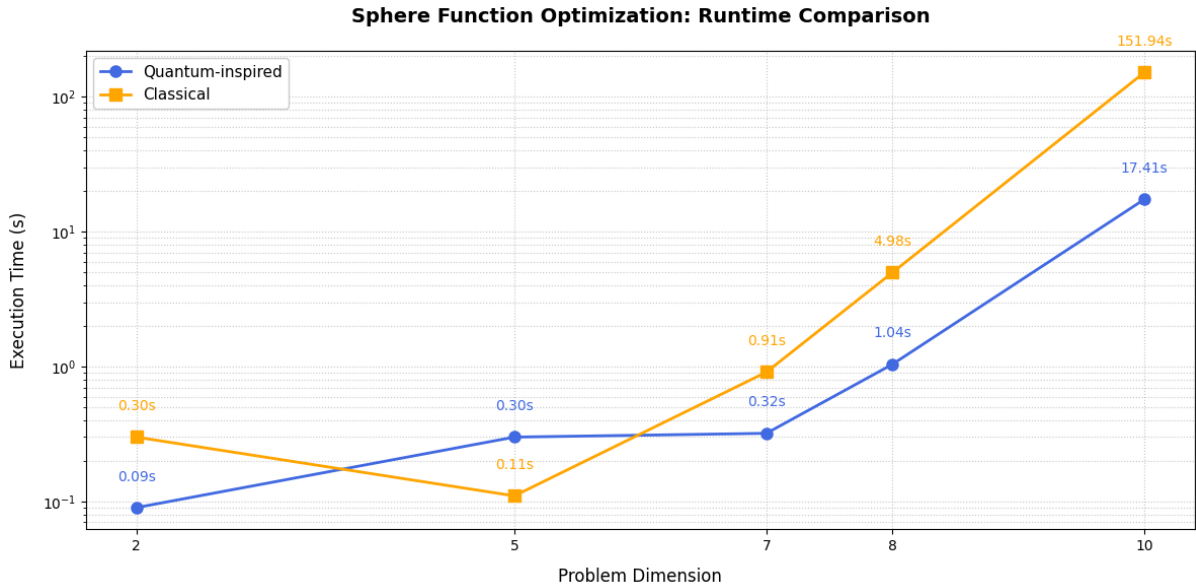


图 6: 球函数优化的比较性能分析（域 $[-500, 500]^d$ ）。

4. 结论

本研究介绍了一种新的连续多元函数优化方法论，旨在解决经典优化技术中存在的内在局限性，并可能在实际量子硬件中实现。虽然所展示的结果显示出了巨大的潜力，但它们并没有考虑来自现实世界量子门操作中的潜在错误和噪声。然而，我们的主要目

标是证明新兴的量子科学计算方法可以超越经典方法，特别是在减轻困扰高维优化问题的维度灾难方面。

所提出的方案通过提供一个强大的理论基础，能够解决复杂问题并促进新的跨学科应用，在数学优化领域做出了实质性贡献。该方法在传统方法因维度扩展而遇到计算瓶颈的场景中表现出特别的有效性。值得注意的是，我们的结果揭示了在超过十维的问题中，即使考虑到域扩展效应，量子优势在内存效率（高达 87.7% 的减少）和计算速度（收敛速度快 88.54%）方面一直存在。

这项工作开启了几个重要的研究方向，包括开发抗噪声实现和硬件特定优化，这些可以弥合理论潜力与实际量子优势之间的现有差距。该框架为解决纯经典方法仍难以处理的优化挑战建立了关键的 stepping stone。

References

Mathematical Aspects of Deep Learning. Cambridge University Press, 2022.

Marvin Bechtold, Johanna Barzen, Frank Leymann, Alexander Mandl, Julian Obst, Felix Truger, and Benjamin Weder. Investigating the effect of circuit cutting in qaoa for the maxcut problem on nisq devices. *Quantum Science and Technology*, 8(4):045022, September 2023. ISSN 2058-9565. doi:10.1088/2058-9565/acf59c. URL <http://dx.doi.org/10.1088/2058-9565/acf59c>.

Gilles Brassard, Peter Hoyer, Michele Mosca, and Alain Tapp. Quantum amplitude amplification and estimation. *AMS Contemporary Mathematics Series*, 305, 06 2000. doi:10.1090/conm/305/05215.

Jaeho Choi and Joongheon Kim. A tutorial on quantum approximate optimization algorithm (qaoa): Fundamentals and applications. In *2019 international conference on information and communication technology convergence (ICTC)*, pages 138–142. IEEE, 2019.

Andrew J Daley, Immanuel Bloch, Christian Kokail, Stuart Flannigan, Natalie Pearson, Matthias Troyer, and Peter Zoller. Practical quantum advantage in quantum simulation. *Nature*, 607(7920):667–676, 2022.

Suguru Endo, Zhenyu Cai, Simon C Benjamin, and Xiao Yuan. Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 90(3):032001, 2021.

Jennifer Faj, Ivy Peng, Jacob Wahlgren, and Stefano Markidis. Quantum computer simulations at warp speed: Assessing the impact of gpu acceleration: A case study with ibm qiskit aer, nvidia thrust & cuquantum. In *2023 IEEE 19th International Conference on e-Science (e-Science)*, pages 1–10. IEEE, 2023.

Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, and Sam Gutmann. A quantum approximate optimization algorithm, 2014. URL <https://arxiv.org/abs/1411.4028>.

Rudolf J Freund and William J Wilson. *Statistical methods*. Elsevier, 2003.

Walter Gautschi. *Numerical analysis*. Springer Science & Business Media, 2011.

John Golden, Andreas Bärttschi, Daniel O’ Malley, and Stephan Eidenbenz. Numerical evidence for exponential speed-up of qaoa over unstructured search for approximate constrained optimization. pages 496–505, 09 2023. doi:10.1109/QCE57702.2023.00063.

- Gian Giacomo Guerreschi and A. Matsuura. Qaoa for max-cut requires hundreds of qubits for quantum speed-up. *Scientific Reports*, 9, 05 2019. doi:10.1038/s41598-019-43176-9.
- Ali Javadi-Abhari, Matthew Treinish, Kevin Krsulich, Christopher J. Wood, Jake Lishman, Julien Gacon, Simon Martiel, Paul D. Nation, Lev S. Bishop, Andrew W. Cross, Blake R. Johnson, and Jay M. Gambetta. Quantum computing with qiskit, 2024. URL <https://arxiv.org/abs/2405.08810>.
- Alexei Yu Kitaev, Alexander Shen, and Mikhail N Vyalyi. *Classical and quantum computation*. Number 47. American Mathematical Soc., 2002.
- Seth Lloyd. Hybrid quantum computing. In *Quantum information with continuous variables*, pages 37–45. Springer, 2003.
- Ashley Montanaro and Leo Zhou. Quantum speedups in solving near-symmetric optimization problems by low-depth qaoa. 11 2024. doi:10.48550/arXiv.2411.04979.
- Tim Poštuvan, Jiaxuan You, Mohammadreza Banaei, Rémi Lebrete, and Jure Leskovec. Adagrid: Adaptive grid search for link prediction training objective, 2022. URL <https://arxiv.org/abs/2203.16162>.
- Wolfgang Scherer. *Mathematics of quantum computing*, volume 11. Springer, 2019.
- Ruslan Shaydulin and Yuri Alexeev. Evaluating quantum approximate optimization algorithm: A case study. In *2019 Tenth International Green and Sustainable Computing Conference (IGSC)*, page 1 – 6. IEEE, Oct 2019. doi:10.1109/igsc48788.2019.8957201. URL <http://dx.doi.org/10.1109/IGSC48788.2019.8957201>.
- Andrew Steane. Quantum computing. *Reports on Progress in Physics*, 61(2):117, 1998.
- Felix Truger, Johanna Barzen, Frank Leymann, and Julian Obst. Warm-starting the vqe with approximate complex amplitude encoding, 2024. URL <https://arxiv.org/abs/2402.17378>.
- Colin P. Williams. *Quantum Gates*, pages 51–122. Springer London, London, 2011. ISBN 978-1-84628-887-6. doi:10.1007/978-1-84628-887-6_2. URL https://doi.org/10.1007/978-1-84628-887-6_2.
- Dan-Bo Zhang, Zhan-Hao Yuan, and Tao Yin. Variational quantum eigensolvers by variance minimization, 2020. URL <https://arxiv.org/abs/2006.15781>.
- Zewen Zhang, Roger Paredes, Bhuvanesh Sundar, David Quiroga, Anastasios Kyrillidis, Leonardo Dueñas-Osorio, Guido Pagano, and Kaden Hazzard. Grover-qaoa for 3-sat:

quadratic speedup, fair-sampling, and parameter clustering. *Quantum Science and Technology*, 10, 11 2024. doi:10.1088/2058-9565/ad895c.