量子近似　　方法：随机约束二元优化

Sarthak Gupta 和 *Vassilis Kekatos*

Bradley 电气与计算机工程系，弗吉尼亚理工大学，布莱克斯堡，弗吉尼亚州 24061，美国；{gsarthak,kekatos}@vt.edu

arXiv:2301.01443v1 [quant-ph] 4 Jan 2023

摘要

分析和实践证据表明，量子计算解决方案优于经典替代方案。基于变分量子本征求解器（VQE）和量子近似优化算法（QAOA）的量子启发式算法已通过数值实验证明，能够为困难的组合优化问题生成高质量解；然而，将约束纳入此类问题一直难以实现。为此，本文提出一种量子启发式算法，用于处理随机二元二次约束二次规划（QCQP）。鉴于量子电路能够高效地从难以采样的概率分布中生成样本，本文训练变分量子电路生成二元向量，以近似求解上述随机规划。该方法基于对偶分解，并需要依次求解一系列经过审慎调整的标准 VQE 任务。在量子模拟器上对若干合成问题实例进行的测试，证实了该方法的近最优性和可行性，也表明其有望为确定性二次约束二次规划生成可行解。

索引词— 量子近似优化算法，变分量子本征求解器，对偶分解，量子无约束二元优化（QUBO）。

1. 引言

量子计算机天生能够以并行方式处理规模呈指数级增长的计算，但其结果具有很强的概率性。Shor 整数因数分解算法、Grover 搜索算法以及 Harrow-Hassidim-Lloyd（HHL）线性系统求解器等量子算法，相较于经典计算机上已知的最佳算法，可实现多项式级甚至指数级加速 [1]。然而，其中一些量子算法需要在容错量子计算机上使用大量量子比特。在近期中等规模（含噪中等规模量子，NISQ）时代，量子计算机存在噪声，因此通常受限于量子门和/或量子比特的数量。考虑到这些限制，变分量子算法被认为是有望在 NISQ 环境中切实展现量子优势的工具 [2]。

本研究获得了弗吉尼亚联邦网络安全倡议（CCI）弗吉尼亚州西南部节点提供的种子基金资助。

变分量子计算涉及一系列参数化量子门。经典计算机通过闭环方式在外部更新这些门的参数，引导量子态朝着期望的方向演化。变分量子本征求解器（VQE）曾用于为组合优化问题提供高质量解，是一个典型示例。量子近似优化算法（QAOA） [3] 是 VQE 的一个特殊实例。在 QAOA 中，不仅参数，就连量子电路的架构也取决于具体问题。经 QAOA 训练的量子电路充当采样器，高效生成二元二次问题（例如最大割问题）的近似最优解； [4] 总结了有关 QAOA 的论述。

虽然大多数变分量子本征求解器/量子近似优化算法方案都针对无约束问题，但在机器学习、无线通信和金融（股票交易）优化等若干应用中，处理约束至关重要。人们通过两种方式尝试将约束纳入量子近似优化算法或绝热量子计算 [5]（针对非门模型量子计算机的量子近似优化算法对应方案）。一种方法是将约束问题转化为类拉格朗日函数的无约束最小化问题 [6, 7]。然而，只有当约束表示为布尔函数或线性等式时，才能稳妥地选择约束惩罚权重。另一种方法是修改量子电路的架构（通过量子近似优化算法的混合哈密顿量），将量子态限制在由约束张成的子空间内 [8, 9, 4, 10]。不过，构造此类“驱动”混合哈密顿量仍然高度依赖具体问题，且通常仅限于等式约束。文献 [11] 提出了一种绝热量子方法，用于处理二元线性约束二次规划问题。该方法针对对偶问题，并将量子计算机与经典运行的分支定界方案相结合。文献 [12] 采用交替方向乘子法（ADMM）处理混合二元二次凸问题，将二元变量和连续变量拆分为独立的最小化问题，分别由量子近似优化算法和经典凸优化器求解，并在每次 ADMM 迭代中执行。

与既有工作的关系。 据作者所知，利用量子启发式算法求解二元二次约束二次规划的研究鲜有涉及。我们提出一种基于量子的启发式算法，用于求解随机二元二次约束二次规划。利用量子电路从经典方法难以采样的概率质量函数中进行采样

（PMF），我们设计了一种对偶分解技术，通过求解一系列标准的变分量子本征求解器任务，系统地调整拉格朗日乘子。我们使用 IBM 提供的量子计算机模拟器进行数值测试，在随机生成的随机型和确定型二元二次约束二次规划上评估了该技术。

2. 量子计算预备知识

由 n 个量子比特（qubit）组成的量子系统，可用一个规模呈指数级增长的状态向量 $|\mathbf{x}\rangle \in \mathbb{C}^N$ 描述，其中 $N = 2^n$ 假设该系统处于纯态。狄拉克记号 $|\mathbf{x}\rangle$ 称为右矢，强调向量 $\mathbf{x}$ 的范数为 1，即 $\sum_{k=0}^{N-1} |x_k|^2 = 1$。若 $\mathbf{e}_k$ 是长度为 N 的第 k 个标准基向量，我们可以写作 $|\mathbf{x}\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} x_k |\mathbf{e}_k\rangle$。向量 $\mathbf{e}_k$ 也常表示为 $|\mathbf{e}_k\rangle = |k\rangle$，其中 k 是索引 k 的二进制表示。例如，一个含有 $n = 2$ 个量子比特的系统，其状态属于 $\mathbb{C}^4$，该空间由标准基向量 $\{\mathbf{e}_k\}_{k=0}^3$ 和 $\mathbf{e}_0 = [1\ 0\ 0\ 0]^\top = |00\rangle$ 张成。向量 $|\mathbf{x}\rangle$ 对量子态进行统计表征：如果测量量子系统的输出，其量子比特将以概率 $|x_k|^2$ 处于配置 $|k\rangle$，其中所有 k 均成立。符号 $\langle \mathbf{x}|$ 称为左矢，表示 $|\mathbf{x}\rangle$ 的共轭转置；而狄拉克括号 $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y}\rangle$ 表示状态之间的内积。

我们可以对量子系统执行的基本操作是演化和测量。前者可以描述为将酉算子 $\mathbf{U}$ 作用于状态 $|\mathbf{x}\rangle$，从而得到状态 $|\mathbf{y}\rangle = \mathbf{U}|\mathbf{x}\rangle$。尽管 $\mathbf{U}$ 的规模随系统大小呈指数增长，但通常可以利用量子门高效实现。在各种测量类型中，我们重点关注投影测量。投影测量与一个厄米矩阵（称为可观测量）及其特征值分解 $\mathbf{H} = \sum_{m=1}^{M} \lambda_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m^H$相关。如果对 $|\mathbf{x}\rangle$执行此类测量，以概率 $p_m := |\langle \mathbf{x}|\mathbf{v}_m\rangle|^2$观测到结果 m 。定义一个随机变量：当观测到结果 m 时，其取值为 λ_m。该变量的期望值为 $\langle \mathbf{x}|\mathbf{H}|\mathbf{x}\rangle = \sum_{m=1}^{M} p_m \lambda_m$。如果 $\mathbf{H}$ 是对角矩阵，则该测量是在计算基上进行的。这在实践中很重要，因为此时 $\mathbf{v}_m = \mathbf{e}_m$，结果 m与 $|m\rangle$相关，而且可以逐个测量每个量子比特。

如果量子系统 i 已被制备为状态 $|\mathbf{x}_i\rangle$，对于$i = 1, 2$，其联合状态将为 $|\mathbf{x}_1\rangle \otimes |\mathbf{x}_2\rangle$，其中 $\otimes$是克罗内克积。这通常表示为$|\mathbf{x}_1\rangle |\mathbf{x}_2\rangle$ 或 $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$。克罗内克积规则可推广到 n 个系统的组合。例如，$|1\rangle |1\rangle |0\rangle = \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_6 = |110\rangle$，其中中间所示的标准基向量属于 $\mathbb{R}^2$，末尾的标准基向量属于 $\mathbb{R}^8$。

3. 变分量子本征求解器（VQE）

变分量子本征求解器是一种启发式算法，可用于寻找一般形式组合优化问题的近似最优解

$$\min_{\mathbf{b}\in\{0,1\}^n} f(\mathbf{b}). \tag{1}$$

一个特别值得关注的例子是具有以下形式的二次无约束二元优化问题（QUBO）：

$$f(\mathbf{b}) = \mathbf{b}^\top \mathbf{A}\mathbf{b} + \mathbf{b}^\top \mathbf{c} + d \tag{2}$$

众所周知，这是 NP难问题。为便于后续推导，可以通过以下变换，用自旋 $\{\pm 1\}$变量来重新表述二次无约束二元优化

$$s_i = 1 - 2b_i = (-1)^{b_i} \ \text{ for } \ i = 0, \ldots, n-1. \tag{3}$$

将自旋变量收集到向量$\mathbf{s} = \mathbf{1} - 2\mathbf{b}$中，二次目标函数可等价地表示为

$$f(\mathbf{b}) = \bar{f}(\mathbf{s}) = \mathbf{s}^\top \bar{\mathbf{A}}\mathbf{s} + \mathbf{s}^\top \bar{\mathbf{c}} + \bar{d} \tag{4}$$

其中 $\bar{\mathbf{A}} = \frac{1}{4}\mathbf{A}$，$\bar{\mathbf{c}} = -\frac{1}{2}\mathbf{A}\mathbf{1} - \frac{1}{2}\mathbf{c}$，$\bar{d} = \frac{1}{4}\mathbf{1}^\top \mathbf{A}\mathbf{1} + \frac{1}{2}\mathbf{1}^\top \mathbf{c} + d$。接下来，我们将说明如何通过求解本征值最小化任务，让 VQE 对式 (1) 进行采样并获得高质量解。

VQE 方法属于变分量子算法这一类。变分 一词指的是量子电路并非固定不变，而是由收集在向量 $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^P$ 中的少量参数进行参数化。这些参数由经典计算机以闭环方式迭代调整，使量子系统最终达到理想状态。这个过程类似于神经网络的训练，其权重由优化算法更新。与神经网络类似，学习者需要选择网络架构（例如网络深度/宽度以及激活函数类型），变分量子电路的参数化形式（也称为拟设）需要事先指定。我们将采用二局域拟设：对所有量子比特施加单量子比特 R_Y门，然后施加完整的纠缠电路，以上操作重复 3 层（迭代） [2]。

给定 $\boldsymbol{\theta}$ 并由输入 $|0\rangle^n$驱动，量子电路会在其输出端产生量子态 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle = \mathbf{U}(\boldsymbol{\theta})|0\rangle^n$，其中 $N \times N$ 为酉算子矩阵 $\mathbf{U}(\boldsymbol{\theta})$。为简化记法，我们通常写作 $|\mathbf{x}\rangle$，而不写 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$。尽管 $|\mathbf{x}\rangle \in \mathbb{C}^N$ 的长度呈指数级增长，但量子电路可以轻松生成它，只是无法以计算高效的方式将其作为向量从电路中读出。相反，从中采样相对容易。每次运行由$|0\rangle^n$驱动的量子电路时，我们都会以概率 $p_k := |x_k|^2$ 观察到二进制输出 $|k\rangle = |\mathbf{e}_k\rangle$，其中 $k = 0, \ldots, N-1$。因此，量子电路可作为从指数规模的概率质量函数（PMF） $\{p_k\}_{k=0}^{N-1}$ 中高效采样的工具。

为了利用这一采样性质，我们接下来将代价$f(\mathbf{b})$与所谓的哈密顿量 矩阵$\mathbf{H}$ 联系起来，使得

$$\mathbf{H}|\mathbf{e}_k\rangle = f(|k\rangle)|\mathbf{e}_k\rangle \quad \text{for all } k. \tag{5}$$

矩阵 $\mathbf{H}$ 显然是对角矩阵，其对角线上包含了所有的 N 函数求值 $f(\mathbf{e}_k)$。此外，典范向量 $\mathbf{e}_k$ 构成了 $\mathbf{H}$ 的特征向量，每个特征向量对应的特征值为 $f(|k\rangle)$。因此，最小化

(1) 中的问题可以重新表述为：求$\mathbf{H}$的最小特征值所对应的特征向量

$$\min_{|\mathbf{x}\rangle} \langle \mathbf{x}| \mathbf{H} |\mathbf{x}\rangle . \tag{6}$$

只要 $|\mathbf{x}\rangle$ 可以取值为 $\{\mathbf{e}_k\}_{k=0}^{N-1}$ 中的任意一个，式（6）的极小化解就对应于式（1）的极小化解。例如，如果一个量子系统有 $n = 3$ 个量子比特，其状态将为 $|\mathbf{x}\rangle \in \mathbb{C}^8$。这里，$\mathbf{e}_k$ 是单位矩阵 $\mathbf{I}_8$ 的列。如果式（6）的极小化解是 $|\mathbf{e}_5\rangle = |b_1 b_2 b_3\rangle = |101\rangle$，那么式（1）的极小化解就是$\mathbf{b} = [1\,0\,1]^\top$；反之亦然。

尽管 $\mathbf{H}$ 的规模随系统大小呈指数增长，但由于它可以表示为如下形式，因此仅用 $\mathcal{O}(n^2)$ 个量子门即可实现：

$$\mathbf{H} = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} \bar{A}_{ij}\mathbf{Z}_i\mathbf{Z}_j + \sum_{i=0}^{n-1} \bar{c}_i\mathbf{Z}_i + \bar{d}\mathbf{I}_N \tag{7}$$

其中，$N \times N$ 厄米矩阵 $\mathbf{Z}_i$ 定义为

$$\mathbf{Z}_i = \mathbf{I}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{Z} \otimes \cdots \otimes \mathbf{I}_2 \text{ with } \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

这是一个克罗内克积，包含 $(n-1)$ 个单位矩阵 $\mathbf{I}_2$，以及一个作用于第 i 个量子比特的泡利 Z 算符 Z。按式（7）定义的矩阵 H 显然是对角矩阵。为证明式（5），首先注意到 Z $|0\rangle = |0\rangle$ 和 Z $|1\rangle = -|1\rangle$，或者更简洁地写作 Z $|b\rangle = (-1)^b |b\rangle$。因此，当 $\mathbf{Z}_i$ 作用于状态 $|\mathbf{b}\rangle = |b_1 b_2 \cdots b_n\rangle$ 时，其效果为 $\mathbf{Z}_i |\mathbf{b}\rangle = (-1)^{b_i} |\mathbf{b}\rangle = s_i |\mathbf{b}\rangle$，由式（3）可得。同样，也有 $\mathbf{Z}_i \mathbf{Z}_j |\mathbf{b}\rangle = s_i s_j |\mathbf{b}\rangle$。在将式（7）右乘任意 $|\mathbf{e}_k\rangle$，并利用 $f(\mathbf{b}) = f(\mathbf{s})$ 后，性质（5）便可立即得出。

如果将 (6) 中的 $|\mathbf{x}\rangle$ 限制在集合 $\mathcal{E} := \{\mathbf{e}_k\}_{k=0}^{N-1}$ 内，那么问题 (6) 就和问题 (1) 一样难。变分量子本征求解器将 (6) 松弛到所有量子态 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 组成的集合，其中的量子态可通过所选拟设参数化，并通过 $\boldsymbol{\theta}$ 参数化。于是，问题 (6) 是在 $\boldsymbol{\theta}$ 上求解，而非在 $|\mathbf{x}\rangle$ 上求解

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} F(\boldsymbol{\theta}) := \langle \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{H}|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle . \tag{8}$$

根据特征值性质 (5)，可知对于所有 k，都有 $\langle \mathbf{e}_n|\mathbf{H}|\mathbf{e}_k\rangle = f(|k\rangle)$。那么对于一般状态 $|\mathbf{x}\rangle$，$\langle \mathbf{x}|\mathbf{H}|\mathbf{x}\rangle$ 又如何呢？由于 $|\mathbf{x}\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} x_k |\mathbf{e}_k\rangle$，很容易证明：

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{H}|\mathbf{x}\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} |x_k|^2 f(|k\rangle) = \sum_{k=0}^{N-1} p_k f(|k\rangle). \tag{9}$$

换言之，函数 $F(\boldsymbol{\theta})$ 是在由 $|\mathbf{x}\rangle$ 定义的概率质量函数下 f 的平均值。例如，以概率 $|x_5|^2$ 发生的随机结果 $|k\rangle = |101\rangle$，会赋予随机变量 f，使其取值为 $f([1\,0\,1]^\top)$。因此，函数 $F(\boldsymbol{\theta})$ 实际上是函数 $f(\mathbf{b})$ 的期望（在量子计算术语中，即一个可观测量），其中 $\mathbf{b}$ 是从概率质量函数 $\{|x_k(\boldsymbol{\theta})|^2\}_{k=0}^{N-1}$ 中抽取的。理想情况下，问题（8）的全局极小化解$\boldsymbol{\theta}$ 通过 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 定义一个概率质量函数，该函数仅以非零概率抽取与$\mathbf{H}$的最小特征值对应的标准基向量 $|\mathbf{e}_k\rangle$。

问题（8）通过混合方式求解：量子计算机从 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 中抽样，并估计 $F(\boldsymbol{\theta})$ 及其梯度（如果需要）$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} F$。经典计算机利用先前的信息，并基于零阶或一阶优化算法（例如梯度下降或贝叶斯优化）迭代更新 $\boldsymbol{\theta}$。与训练神经网络一样，由于拟设的形式，$F(\boldsymbol{\theta})$ 是非凸的。此外，系综统计量 $F(\boldsymbol{\theta})$ 无法精确计算，只能通过样本均值 $\hat{F}(\boldsymbol{\theta}) := \sum_{r=1}^{R} f(\mathbf{b}_r)/R$ 进行估计；该均值基于 R 次运行计算，其中 $\mathbf{b}_r$ 是第 r次运行后的量子输出。

4. 约束变分量子本征求解器

如前所述，变分量子本征求解器通过对 (8) 采用变分形式，为求解二次无约束二元优化提供了一种有效的启发式算法。变分量子本征求解器能否推广到以下形式的二元二次约束二次规划?

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{b}\in\{0,1\}^n} \quad & f_0(\mathbf{b}) \\ \text{s.to} \quad & f_m(\mathbf{b}) \le 0, \quad m = 1 : M. \end{aligned} \tag{10}$$

这里 $f_m(\mathbf{b}) := \mathbf{b}^\top \mathbf{A}_m \mathbf{b} + \mathbf{b}^\top \mathbf{c}_m + d_m$，其中 $m = 0, \ldots, M$。众所周知，求解此类问题也是 NP 难的。提供一种能直接处理式 (10) 的量子启发式算法似乎颇具挑战。为此，我们放宽期望条件，旨在设计一种量子态 $|\mathbf{x}\rangle$，从中可以抽取二元值的 $\mathbf{b}$，以求解随机 二元二次约束二次规划:

$$\begin{aligned} \min_{|\mathbf{x}\rangle} \quad & \mathbb{E}_{\mathbf{x}}[f_0(\mathbf{b})] \\ \text{s.to} \quad & \mathbb{E}_{\mathbf{x}}[f_m(\mathbf{b})] \le 0, \quad m = 1 : M. \end{aligned} \tag{11}$$

与无约束设定一样，我们不对 $|\mathbf{x}\rangle$ 进行最小化，而是提出针对由 $\boldsymbol{\theta}$ 参数化并由量子态 $|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 表示的概率质量函数进行优化。具体而言，我们建议求解约束最小化问题

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\theta}} \quad & F_0(\boldsymbol{\theta}) \\ \text{s.to} \quad & F_m(\boldsymbol{\theta}) \le 0 : \quad \lambda_m, \quad m = 1 : M \end{aligned} \tag{12}$$

其中，每个可观测量 $F_m(\boldsymbol{\theta}) := \langle \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{H}_m|\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ 都依赖于哈密顿量 $\mathbf{H}_m$；该哈密顿量对所有 m 的定义方式与式 (7) 中的 $\mathbf{H}$ 类似。请注意，问题 (12) 可以改写为关于 $\mathbf{b}$ 的概率质量函数的线性规划（LP）并求解。不过，这需要针对 $\mathbf{b}$ 的所有 2^n 个取值计算 $\{f_m(\mathbf{b})\}_{m=0}^{M}$。此外，该线性规划的优化变量是概率质量函数值构成的向量，其规模也呈指数级增长。标准的变分量子本征求解器/量子近似优化算法也存在同样的问题。

与(10)不同，问题 (12) 针对连续变量 $\boldsymbol{\theta}$，因此我们可以为每个约束关联一个对偶变量 λ_m，并定义其拉格朗日函数

$$L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\lambda}) := F_0(\boldsymbol{\theta}) + \sum_{m=1}^{M} \lambda_m F_m(\boldsymbol{\theta}) \tag{13}$$

其中 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^M$ 收集了所有对偶变量。问题 (12) 可以通过对偶分解求解，根据该方法， $\boldsymbol{\lambda}$ 通过对 L执行次梯度上升步骤进行迭代更新，如下所示

$$\lambda_m^{t+1} := \max\left\{\lambda_m^t + \mu_t F_m(\boldsymbol{\theta}^t), 0\right\}, \quad m = 1:M \tag{14}$$

对于正步长 $\mu_t = \mu_0/(t+\alpha)$，满足 $\alpha > 0$，且 $\boldsymbol{\theta}^t$是在 $\boldsymbol{\lambda}^t$ 处取值的拉格朗日函数 $L(\boldsymbol{\theta}; \boldsymbol{\lambda}^t)$ 的极小化解：

$$\boldsymbol{\theta}^t \in \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \langle \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta}) | \mathbf{H}_0 + \sum_{m=1}^{M} \lambda_m^t \mathbf{H}_m | \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta}) \rangle . \tag{15}$$

问题 (15) 具有式 (8) 的二次无约束二元优化形式，因此适用于标准的变分量子本征求解器，甚至是著名的量子近似优化算法方法。在后者中，拟设采用依赖于问题哈密顿量 $\mathbf{H}_0 + \sum_{m=1}^{M} \lambda_m^t \mathbf{H}_m$ 的特定形式。这里，我们在通用的变分量子本征求解器框架下使用了与问题无关的拟设，并将量子近似优化算法留待未来研究。

5. 数值测试

针对 (12) 的新型求解器使用 Qiskit 库 [13] 以 Python 实现。我们使用 Qiskit 中的 变分量子本征求解器 类，对原始变量更新 (15) 进行最小化求解。除了提供第 3 节所述的拟设外，还将变分量子本征求解器类配置为使用“序列最小二乘规划”优化器。最大迭代次数设为 1，000，并使用 Aer模拟器 statevector 量子模拟后端。对于对偶变量更新 (14)，使用变分量子本征求解器返回的最小本征态，测量可观测量 $\mathbf{H}_m$ 上的约束违反情况。采用停止准则 $\|\boldsymbol{\lambda}^t - \boldsymbol{\lambda}^{t-1}\|_2 \leq 1 \cdot 10^{-5}$ 来确定对偶变量更新 (14) 是否收敛。

为说明所提出策略在求解式（11）中的随机二元二次约束二次规划时的应用，我们通过从标准正态分布中抽取 $\{\mathbf{A}_0, \mathbf{c}_0, \mathbf{d}_0\}$ 和 $\{\mathbf{A}_1, \mathbf{c}_1, \mathbf{d}_1\}$ 的各项，并确保所得问题可行，随机生成了若干个 2 位问题实例。我们将变分量子本征求解器方法与求解式（12）的概率质量函数的线性规划进行了比较；由于 2^n 的值较小，这种比较是可行的。对于这两种方法，表 1 列出了 4 个随机生成的问题实例所得到的概率质量函数及相应的对偶变量。

为研究该方法的可扩展性，并验证所得解与式 (10) 中确定性二次约束二次规划的兼容性，我们还抽样生成了 30 个可行的 5 位问题实例，每个实例包含三个约束。二次代价函数和约束函数的生成方式与前一次测试相同。为避免出现约束未起作用的实例，我们手动调整了约束函数中的常数 d_m，使至少有一个约束处于激活状态并产生非零对偶变量。在抽样的问题中，涉及 VQE 的对偶分解能够为 30 个问题实例中的 28 个求得最优解

表 1。通过线性规划和所提出的量子方法比较式（12）的精确解。

#	求得的概率质量函数		Dual	
	量子	LP	量子	LP
1	$[0.44, 0, 0.56, 0]$	$[0.44, 0, 0.56, 0]$	0.854	0.851
2	$[0.71, 0, 0.29, 0]$	$[0.70, 0, 0.30, 0]$	0.337	0.337
3	$[0, 0.80, 0, 0.20]$	$[0, 0.80, 0, 0.20]$	0.459	0.459
4	$[0, 0, 0.61, 0.39]$	$[0, 0, 0.60, 0.40]$	0.566	0.566

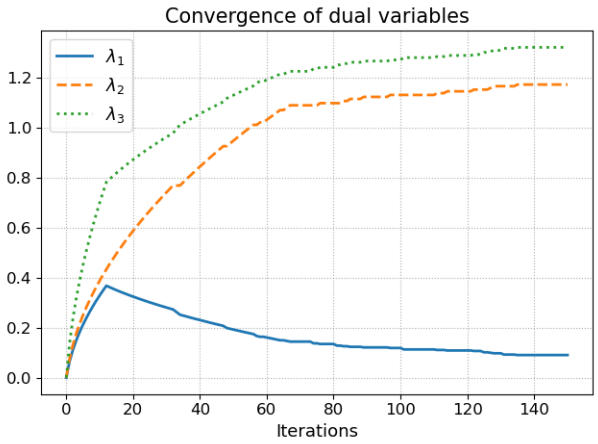


图 1。具有 $M = 3$ 个约束的随机二元二次约束二次规划中，对偶变量在对偶更新（14）下的收敛情况。

经测试，剩余 2 个实例则得到了不可行的二进制候选解。图 1 展示了其中一个问题实例的对偶变量收敛情况，该实例的三个约束均处于激活状态。

6. 结论

为满足处理随机二元二次约束二次规划的需求，我们开发了一种对变分量子本征求解器的新型推广。该方法利用对偶分解，依次求解一系列经过精心修改的变分量子本征求解器任务。数值测试表明，约束变分量子本征求解器算法收敛后，变分量子电路能够从随机策略中采样，生成使二元二次约束二次规划目标最小化、并在期望意义下满足其约束的二元向量。其中一些样本似乎也满足确定性二元 QCQP 的可行性要求。这种新颖的启发式算法为进一步发展约束离散优化奠定了基础。目前，我们正在探索几个令人振奋的方向：*i)*将该方法与量子近似优化算法结合，而非与变分量子本征求解器结合；*ii)* 如 [14, 15] 所示，采用原始-对偶分解替代方案，跳过 (15) 中的嵌套优化；以及 *iii)*处理混合二元设置。

7. 参考文献

[1] Michael A. Nielsen 和 Isaac L. Chuang，《量子计算与量子信息》，剑桥大学出版社，2000 年。[2] Osvaldo Simeone，“面向工程师的量子机器学习导论”，《信号处理基础与趋势》，第 16 卷，第 1–2 期，第 1–223 页，2022 年。[3] Edward Farhi、Jeffrey Goldstone 和 Sam Gutmann，“将量子近似优化算法应用于有界出现约束问题”，《量子物理》arXiv，2014 年。[4] S. Hadfield、Z. Wang、B. O’Gorman、E. G. Rieffel、D. Venturelli 和 R. Biswas，“从量子近似优化算法到量子交替算子拟设”，《算法》，第 12 卷，第 2 期，第 34 页，2019 年。[5] C. C. McGeoch，《绝热量子计算与量子退火：理论与实践》，第 5 卷，施普林格，瑞士，2014 年。[6] A. Lucas，“许多 NP 问题的伊辛表述”，《物理学前沿》，第 2 卷，第 5 期，第 1–15 页，2014 年。[7] M. Ohzeki，“突破量子退火器在求解带约束优化问题时的局限”，《科学报告》，第 10 卷，第 1 期，第 1–12 页，2020 年。[8] I. Hen 和 M. S. Sarandy，“用于量子退火约束优化的驱动哈密顿量”，《物理评论 A》，第 93 卷，第 6 期，第 062312 页，2016 年。

[9] I. Hen 和 F. M. Spedalieri，《用于约束优化的量子退火》，*Phys.Rev. Appl.*，第 5 卷，第 63 期，页码 034007，2016 年。[10]S. Hadfield、Z.Wang、E. G. Rieffel、B. O’Gorman、D. Venturelli 和 R. Biswas，《具有硬约束和软约束的量子近似优化》，载于 *ACMIntl. Workshopon PostMoore’s EraSupercomputing*，纽约，纽约州，2017 年，页码 15–21。[11] Pooya Ronagh、Brad Woods 和 Ehsan Iranmanesh，《通过量子绝热演化求解约束二次二元问题》，*QuantumInfo. Comput.*，第 16 卷，第 11–12 期，页码 1029–1047，2016 年 9 月。[12]Claudio Gambella 和 Andrea Simonetto，《用于在经典和量子计算机上进行混合二元优化的多块交替方向乘子法启发式算法》，*IEEE Trans. onQuantum Engineering*，第 1 卷，页码 1–22，2020 年 10 月。[13]《Qiskit：用于量子计算的开源框架》，2021 年。[14] S. Gupta、S. Misra、D. Deka 和 V. Kekatos，《基于 DNN 的随机交流最优潮流策略》，载于*Proc. PowerSyst. Comput. Conf.*，波尔图，葡萄牙，2021 年 6 月，（亦将发表于 Elsevier《Electric Power Systems Research》）。[15] S. Gupta、V. Kekatos 和 M. Jin，《使用代理控制智能逆变器：一种基于机会约束 DNN 的方法》，*IEEE Trans.Smart Grid*，第 13 卷，第 2 期，页码 1310–1321，2022 年 3 月。