arXiv:2301.12393v1 [quant-ph] 29 Jan 2023

量子退火的逻辑量子比特实现：增广拉格朗日方法

Hristo N. Djidjev
保加利亚科学院信息与通信技术研究所，保加利亚索非亚；洛斯阿拉莫斯国家实验室 CCS-3，美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 87545

摘要。 在量子退火器上求解优化问题，通常需要将问题中的每个变量表示为一组相互连通的量子比特，称为逻辑量子比特或链。链权重以链中量子比特之间的铁磁耦合形式施加，使链中的物理量子比特在低能量样本中倾向于取相同的值。赋予合适的链强度值，对于量子退火求解困难问题的能力至关重要，但目前没有通用方法可以计算该值；即使找到了最优值，它也可能因过大而不适用于获得准确的退火结果。本文提出一种基于优化的方法，用于生成合适的逻辑量子比特表示，从而减小链权重，并表明由此产生的优化问题可以通过增广拉格朗日方法成功求解。在 D-Wave Advantage系统上进行的实验，以及针对随机图最大团问题的实验表明，我们的方法优于D-Wave默认的链强度赋值方法和二次惩罚方法。

关键词：量子退火；增广拉格朗日方法；二次惩罚方法，D-Wave；伊辛问题；QUBO；次嵌入；逻辑量子比特；断链，最大团

1. 引言

量子退火（QA）是一种在专用量子设备上求解优化问题的方法，旨在解决传统计算机难以求解的 NP 难问题 [8]。由 D-Wave Systems 公司设计的最大型商用量子退火机拥有数千个量子比特，并能为以下类型的二次优化问题提出高质量解

$$\text{minimize } Is(\boldsymbol{s}) = \sum_{i<j} J_{ij} s_i s_j + \sum_i h_i s_i, \tag{1}$$

称为伊辛问题，其中 $\boldsymbol{s} = (s_1, \ldots, s_N)$ 和 $s_i \in \{-1, 1\}$ 是变量。当问题 (1) 中的变量被限制为 $s_i \in \{0, 1\}$ 时，相应的表述

称为二次无约束二元优化 ($QUBO$)问题。通过对变量进行线性变换，两种表述可以轻松地相互转换，但 D-Wave 硬件原生实现的是伊辛形式。问题 (1) 是 NP 难问题，难以求解，许多其他 NP难问题也可以轻松地重新表述为伊辛问题和 QUBO 问题 [12]。

为了在 D-Wave量子退火器上求解伊辛问题 (1)，需要将问题的系数发送到设备。设备使用量子退火多次求解该问题，并返回所得的解，称为样本。这些样本会在后处理中进行分析，并选择伊辛函数值最低的样本作为解。这样做的依据是，量子退火本身只占总求解时间的一小部分，而总求解时间还包括将问题映射到硬件上并对其进行编程所需的时间。

为了将伊辛问题映射到量子处理单元 (QPU) 上，系数 h_i（称为线性偏置）必须映射到 QPU 上互不相同的量子比特，而每个系数 J_{ij}（称为二次偏置）必须映射到一个耦合器，该耦合器连接分别对应于 i 和 j的量子比特。然而，QPU 中可能不存在这样的耦合器，因为当前 D-Wave 设备中的量子比特并非完全连接。图 1 展示了当前最大型量子退火机 Advantage™ 系统所采用的 Pegasus 图的连接模式；每个量子比特平均连接约 15 个耦合器。相比之下，对于许多优化问题，与二次偏置对应的图非常稠密，这意味着对于大多数可能的量子比特对 (i, j)，都存在非零耦合器 J_{ij} 。为解决这一问题，需要将伊辛问题次嵌入到 QPU 中。具体而言，考虑一个顶点为 $\{1, \ldots, N\}$、无向边为 $\{(i, j) \mid J_{ij} \neq 0\}$的图，我们将其称为伊辛图。将硬件图 定义为一个图，其顶点是 QPU 的量子比特，并且每一对对应量子比特由耦合器连接的顶点之间都有一条边。于是，将伊辛图嵌入硬件图的次嵌入 是一个映射 M，它将伊辛图的顶点映射到硬件图顶点的连通子集；这些子集两两不相交，并且对于伊辛图的每条边 (i, j)，硬件图中都存在一条边 (i', j')，使得 $i' \in M(i)$ 且 $j' \in M(j)$。与顶点集合 $M(i)$对应的量子比特集合称为逻辑量子比特，简称链。一般而言，寻找这样的嵌入是 NP-难问题，但已有良好的启发式算法 [2, 3]。

为了使与逻辑量子比特对应的量子比特集合能够忠实地表示一个量子比特，必须要求这些量子比特在量子退火过程结束时取相同的值。为此，链中的每个耦合器（i, j）都被赋予一个负偏置，例如 $-\mu$，以便在最小化问题中促使物理量子比特 i 和 j 取相同的值。该偏置的幅度 μ 由 D-Wave 的参数 `chain strength`控制，十分重要。如果 μ 过低，就无法确保链中的物理量子比特取相同的值。如果 μ 过大，那么硬件对伊辛问题系数的表示精度就会降低，因为在归一化到硬件可接受的范围后，某些问题系数可能会变得过小，低于 QPU 的有限分辨率。选择合适的链强度值

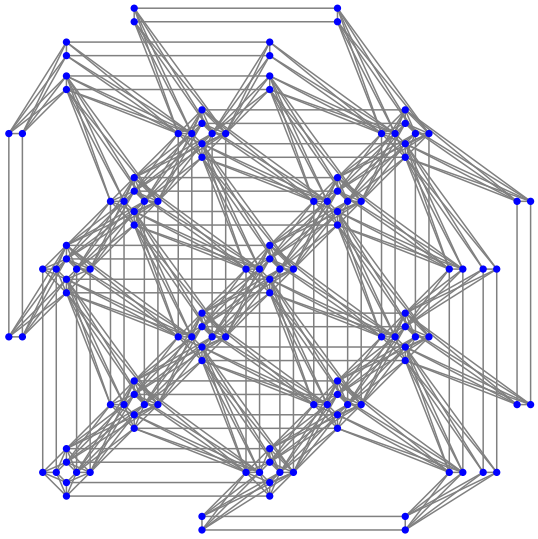

图 1：三阶 Pegasus 图 $P(3)$ 的连接模式。蓝色圆点代表量子比特，连接各点的边代表耦合器。本文实验所用的 `Advantage system4.1` 计算机基于 $P(16)$ Pegasus 图，拥有 5627 个可用量子比特和 40279 个可用耦合器（部分量子比特和耦合器因缺陷而被禁用）。

通常需要通过反复试验来确定。尽管 D-Wave 软件提供了一种称为 `uniform torque compensation` 的启发式方法来设定该值，但它并非总能奏效，从而导致所谓的断链，也就是逻辑量子比特对应的物理量子比特同时取了两种值 $+1$ 和 -1。这类断链会在后处理中通过启发式方法解决，例如 D-Wave 的默认方法 `majority vote`，我们在实验分析中采用了该方法。有关解决断链的更高级方法，请参见 [13]。

断链是提升量子退火器 [4] 的精度和可扩展性的一大障碍。本文提出一种基于优化的方法，用于寻找良好的链表示。与以往方法仅在耦合器上使用二次偏置不同，该方法还在量子比特上使用线性偏置。为此，我们将如下问题表示为一个约束优化问题：在所有链中的量子比特都应取相同值这一条件下，最小化伊辛函数 (1)。然而，伊辛模型 (1) 不支持约束，因此必须将约束加入目标函数。在 D-Wave 上求解约束问题的典型方法是惩罚方法，即将约束 $\boldsymbol{as} = \boldsymbol{b}$ 作为二次惩罚项 $\mu/2(\boldsymbol{as} - \boldsymbol{b})^2$ 加入。对于逻辑量子比特表示，这意味着在链的耦合器上使用负偏置 $-\mu$ ，因此惩罚方法得到的逻辑量子比特表示与上文讨论的表示类似，也存在类似的缺点。本文将表明，相较于惩罚方法，采用增广拉格朗日方法能够取得更好的结果。我们将在下一节详细讨论增广拉格朗日方法；该方法会在二次惩罚项中加入一个线性拉格朗日

项 $\boldsymbol{\lambda}^T(\boldsymbol{as}-\boldsymbol{b})$，并使用迭代过程为 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 μ寻找最优或近似最优值。

本文的主要贡献如下。

(i) 我们证明，通过定义线性偏置和二次偏置，并使用增广拉格朗日方法求出这些偏置的取值，可以构造出良好的逻辑量子比特表示。(ii) 我们在最大团问题（一类重要的 NP 难问题）以及最多包含 100 个顶点的图上测试了我们的实现。(iii) 我们证明，我们的实现优于 D-Wave 默认的逻辑量子比特表示，也优于二次惩罚方法。(iv) 我们证明，可以针对一整类图优化并存储增广拉格朗日系数的取值，然后用这些取值求解该类中任意图上的问题。

本文其余部分安排如下。第2节概述与本研究相关的已有成果。第3节介绍我们的方法，并给出其实现的伪代码。第4节分析所提出的逻辑量子比特实现，并将其与其他算法进行比较。最后，我们总结全文并列出开放问题。

2. 相关工作

若干研究致力于通过经验方法，为特定问题确定合适的链强度值。King和McGeoch [10] 探讨了在量子退火器上求解优化问题时的算法工程问题，包括寻找最佳链强度参数；他们针对一类3-SAT实例进行了经验分析。Pudenz [15] 通过经验分析比较了逻辑量子比特参数设置的不同策略，例如逻辑量子比特和耦合器上的伊辛问题偏置分布，以及链权重的设置。Grant和Humble[7] 针对一组投资组合优化问题实例，评估了链断裂的概率及其受具体嵌入方式影响的程度。Lee [11]使用模拟退火和精确优化方法，为假设的二维 $L\times L$ 架构估算最佳链强度，其中 $L=4$分别取 6 和 8；为使主量子比特之间能够形成链，他们在二维架构上增加了第三个维度。Venturelli等人[17] 研究了对应于Sherrington–Kirkpatrick自旋玻璃模型的全连接伊辛模型的最优参数设置。他们证明，对于所研究的问题，最佳链强度随 $\sqrt{N}$变化，其中 N 为变量数量。对于一般伊辛问题，同一方法表明，最佳链强度与 $\sigma\sqrt{N}$成正比，其中 σ^2 为二次耦合器的方差；D-Wave软件采用的正是这一公式。这样的链强度设置，以及 —

—

退火时长和次嵌入参数，在 [16] 中针对自旋玻璃和信道通信问题进行了分析，并提出了这三个参数之间相互依赖关系的分析及其调优策略。

3. 方法

本节首先将逻辑量子比特表示问题表述为一个优化问题，并介绍通用的二次惩罚项方法和增广拉格朗日方法。

3.1. 将逻辑量子比特表示为约束

在求解优化问题 P 时，另一种确保表示给定逻辑量子比特 Q 的所有物理量子比特取值相同的思路，是将这一条件视为添加到 P中的一项（附加）约束。若 P 是一个约束问题，可以先使用上一节介绍的方法将其转化为无约束问题。因此，不失一般性地，我们可以假设 P本身是一个式（1）所示类型的伊辛问题，即无约束问题。假设针对 P的一个次嵌入将每个变量 s_i映射到集合 $C_i = \{s_i^1, \dots s_i^{k_i}\}$，其中 s_i^k是物理量子比特；再设连接 C_i中成对顶点的活动耦合器集合为 E_i，我们称其为链耦合器。我们假设这些链是连通的，即每个图 $(C_i,\ E_i)$ 都是连通图。定义 $\mathcal{E} = \bigcup_i E_i$ 记 C_{ij} 为集合 $\{(k,\ l) \in \mathcal{E} \mid s_i^k \in C_i,\quad s_j^l \in C_j\}$，即连接链 C_i 和 C_j的耦合器集合，我们称之为逻辑耦合器。在式（1）的伊辛$(\boldsymbol{s})$ 中，将每个 s_i 替换为 C_i, $i = 1$、.....、 N, 后，得到伊辛函数

$$Is'(\boldsymbol{s'}) = \sum_{i<j} \sum_{(k,l)\in C_{ij}} J_{ij}^{kl} s_i^k s_j^l + \sum_i \sum_{s_i^k \in C_i} h_i^k s_i^k, \tag{2}$$

其中， J_{ij}^{kl}和 h_i^k是适当选取的系数， $\boldsymbol{s'}$ 是包含所有变量s_i^k、 $k \in C_i$、 $1 \le i \le N$的向量。本文也采用了 D-Wave 的伊辛嵌入工具所使用的均匀扩散方法 [16],，该方法为每个逻辑量子比特和耦合器赋予相同的权重。因此，我们定义

$$J_{ij}^{kl} = J_{ij}/|C_{ij}|, \quad h_i^k = h_i/|C_i|. \tag{3}$$

为了确保逻辑量子比特中的所有变量s_i^k 在最优解中取相同的值，我们可以添加以下约束：

$$s_x = s_y \text{ for each } (s_x, s_y) \in \bigcup_i E_i, \tag{4}$$

也就是说，每条链耦合器两端的量子比特应取相同的值。由于图（$C_i,\ E_i$）是连通的，(4) 确保了对应于任意给定链的所有变量都取相同的值。

然而，所得问题“在满足（4）的条件下最小化 $Is'(\boldsymbol{s'})$”无法直接在 D-Wave 上求解，因为它并非无约束问题。要将其转换为无约束问题

，通常会将（4）作为惩罚项加入目标函数，从而得到一个问题

$$\text{minimize } Is'(\boldsymbol{s'}) + \Pi(\boldsymbol{s'}),\ \boldsymbol{s'} \in \{-1,1\}^n, \tag{5}$$

其中，$\Pi(\boldsymbol{s'})$ 是一个惩罚函数：当所有约束均得到满足时，其值为零；否则，其值为足够大的正数，以防违反某些约束的赋值成为最优解。在下一小节中，我们将讨论定义适当函数 Π 的两种方法。

3.2. 约束优化的惩罚方法和增广拉格朗日方法

二元优化问题中最常见的约束是变量之间的等式约束和不等式约束。这里我们考虑定义域 $\mathcal{D} = \{-1,1\}^N$ 和等式约束问题，因为这正是我们的问题 (5) 所属的类型；不过，所述方法最初是为连续定义域设计的，也可以推广到含不等式约束或混合问题。我们在本小节中考虑如下约束问题

$$\text{minimize } f(\boldsymbol{s})\ \ \text{subject to } c(\boldsymbol{s}) = 0,\ \boldsymbol{s} \in \mathcal{D}. \tag{6}$$

3.2.1. 惩罚方法 二次惩罚方法（惩罚法）使用惩罚函数$\Pi(\boldsymbol{s}) = \mu/2\,||c(\boldsymbol{s})||^2$，将 (6) 转化为无约束问题

$$\text{minimize } f(\boldsymbol{s}) + \frac{\mu}{2}\,||c(\boldsymbol{s})||^2,\ \boldsymbol{s} \in \mathcal{D}. \tag{7}$$

选择足够大的惩罚因子 $\mu > 0$，即可确保（假设（6）确实存在可行解）(7) 的每个最优解都满足 $c(\boldsymbol{s}) = 0$，从而得到（6）的一个最优解。但是，如果惩罚因子选得过大，由于所有系数都要归一化以满足硬件限制，提交给量子退火机的伊辛问题中就会出现一些绝对值非常小的系数。再考虑到量子退火机的模拟特性以及数模转换器量化步长有限，这样大的 μ 值会对问题（7）的解的质量产生负面影响。即使在连续情形下，较大的 μ 值也会导致病态条件。因此，找到合适的惩罚因子对该方法的成功至关重要。

在我们的惩罚方法实现中，我们将采用一种迭代过程来计算合适的惩罚因子：从较小的 μ 值开始，并在每次迭代中增大该值，直至满足所有约束。该方法的伪代码见算法1。

3.2.2. 增广拉格朗日方法 增广拉格朗日方法结合了惩罚方法（PM）的思想与拉格朗日乘子法。拉格朗日乘子法通过构造函数$\mathcal{L}(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{s}) + \boldsymbol{\lambda}^T c(\boldsymbol{s})$来尝试求解问题（6），其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 是一个称为拉格朗日乘子的系数向量，并考察其驻点，即所有偏导数均为零的点，

算法1 二次惩罚方法

输入： 初始 $\mu > 0$，增加因子 $\rho > 1$
输出： 最终 μ 惩罚函数

重复
  $\boldsymbol{s} \leftarrow$ 使 $_{\boldsymbol{s}\in\mathcal{D}}\left(f(\boldsymbol{s})$ 取得最小值 $+\frac{\mu}{2}||c(\boldsymbol{s})||^2\right)$ ▷ 在量子退火机上求解
  若 $c(\boldsymbol{s}) > 0$ **则**
    $\mu \leftarrow \rho\mu$
  结束 if
直到 $c(\boldsymbol{s}) = 0$ 或达到迭代次数上限 ▷ 也可以采用其他停止准则

包括关于拉格朗日乘子 $\boldsymbol{\lambda}$的偏导数为零的点。这些点包含原问题（6）的所有最优解。但拉格朗日乘子法不能直接用于 D-Wave，因为 $\mathcal{L}(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\lambda})$不是伊辛问题，因为 $\boldsymbol{\lambda}$ 由实数组成，必须通过迭代方法计算。然而，像算法1那样在每次迭代时增大系数值的简单过程并不可行，因为（i）必须使用 $\boldsymbol{\lambda}$ 的精确值，不同于 PM，后者只需令 μ 足够大；（ii）不同于作为单个数的 μ，$\boldsymbol{\lambda}$ 是一个向量，因此更难以精确估计。为此，增广拉格朗日方法（增广拉格朗日法）通过添加一个二次惩罚项来扩展 $\mathcal{L}(\boldsymbol{s}, \boldsymbol{\lambda})$，从而得到无约束问题

$$\text{minimize } f(\boldsymbol{s}) + \boldsymbol{\lambda}^T c(\boldsymbol{s}) + \frac{\mu}{2}||c(\boldsymbol{s})||^2, \ \boldsymbol{s} \in \mathcal{D}, \tag{8}$$

其中，$\boldsymbol{\lambda}$ 是一个维度等于逻辑量子比特数量的向量，是一种更好的替代方案。与 PM 相比，它还会使 μ 的值更低。标准增广拉格朗日法（ALM）实现的伪代码见算法 2。

算法 2 增广拉格朗日方法

输入： 初始 $\mu > 0$、初始 $\boldsymbol{\lambda}$、增加因子 $\rho > 1$
输出： 增广拉格朗日函数的最终 μ、$\boldsymbol{\lambda}$

重复
  $\boldsymbol{s} \leftarrow$ 对 $_{\boldsymbol{s}\in\mathbb{B}^N}\left(f(\boldsymbol{s}) + \boldsymbol{\lambda}^T c(\boldsymbol{s}) + \frac{\mu}{2}||c(\boldsymbol{s})||^2\right)$求最小值 ▷ 在量子退火机上求解
  如果 $c(\boldsymbol{s}) \neq 0$ **则**
    $\boldsymbol{\lambda} \leftarrow \boldsymbol{\lambda} + \mu c(\boldsymbol{s})$
    $\mu \leftarrow \rho\mu$
  结束如果
直到 $c(\boldsymbol{s}) = 0$ 或达到迭代上限 ▷ 也可以采用其他停止准则

在下一小节中，我们将介绍如何将这些方法应用于逻辑量子比特的实现问题。

3.3. 将这些方法应用于量子退火和逻辑量子比特的实现

假设我们需要在量子退火机上求解由方程 (2)–(4) 确定的约束问题，即

$$\text{minimize } Is'(\boldsymbol{s'}) = \sum_{i<j} \frac{J_{ij}}{|C_{ij}|} \sum_{(k,l)\in C_{ij}} s_i^k s_j^l + \sum_i \frac{h_i}{|C_i|} \sum_{s_i^k \in C_i} s_i^k \tag{9}$$

$$\text{subject to } s_x = s_y \text{ for each } (s_x, s_y) \in \bigcup_i E_i. \tag{10}$$

将 (9)–(10) 转换为类型 (8) 的无约束问题后，得到

$$\text{minimize } Is^*(\boldsymbol{s'}) = Is'(\boldsymbol{s'}) + \sum_{(s_x,s_y)\in\mathcal{E}} \lambda_{xy}(s_x - s_y) + \frac{\mu}{2} \sum_{(s_x,s_y)\in\mathcal{E}} (s_x - s_y)^2, \tag{11}$$

其中 $\mathcal{E} = \bigcup_i E_i$。应用平方公式，并利用 $s^2 = 1$ 对于 $s \in \{-1, 1\}$ 的事实，我们将 $Is^*(\boldsymbol{s'})$ 简化为

$$Is^*(\boldsymbol{s'}) = Is'(\boldsymbol{s'}) + \sum_{(s_x,s_y)\in\mathcal{E}} (\lambda_{xy}s_x - \lambda_{xy}s_y - \mu\, s_x s_y) + \mu|E|. \tag{12}$$

注意，$\mu|E|$ 是一个常数，在关于 s' 进行最小化时可以忽略。

公式 (12) 导出了算法 2 的以下实现方式，适用于算法 3 中给出的逻辑量子比特。我们采用的具体停止准则是：不存在断链，或迭代次数超过 20 次。

在许多应用中，增广拉格朗日法在实践中被认为是非常好的选择[1], ，但将其应用于逻辑量子比特有其独特之处，可能会影响其有效性。这些特点包括以下几点。

1. 原始方法是针对连续变量开发的。在这种情况下，在温和条件下，无论拉格朗日乘子 [6]的初始值如何，增广拉格朗日法都会收敛到全局最优解。然而，对于像我们这样涉及离散变量的情况，目前没有理论结果能够保证最优性。

2. 我们的情况中，约束的数量可能相当多（等于变量的数量）。已有研究表明，在连续 情形下，增广拉格朗日法对于数量达数百个 [5] 的约束也能取得良好效果，这让我们有理由相信它在我们的情况下也可能奏效。但这仍需验证。

3. 量子退火器是随机采样器，这意味着在退火结束时测量量子态的结果是随机的。因此，每次迭代的结果不仅取决于参数 $\boldsymbol{\lambda}$ 和μ，还取决于偶然因素。此外，退火机容易受到环境噪声、硬件泄漏及其他相互作用的影响，这些因素可能会显著影响量子退火过程的结果 [14]。

因此，有必要通过实验分析我们算法的实际有效性，这将在第4节中讨论。

算法 3 增广拉格朗日方法

输入： 伊辛模型 为$(\boldsymbol{s})$，初始 $\mu_0 > 0$，初始 $\boldsymbol{\lambda}_0$，增加因子 $\rho > 1$
输出： 增广拉格朗日函数的最终 μ, $\boldsymbol{\lambda}$

1. 为 伊辛$(\boldsymbol{s})$ 寻找一个嵌入，并使用 D-Wave 的 Ocean 软件函数 `embed ising` 构造转换后的伊辛 伊辛′$(\boldsymbol{s}')$，但将参数 `chain strength` 设为 0（这样我们就可以通过增广拉格朗日法定义链强度）。令 $J'(s_x, s_y)$ 和 $h'(s_x)$ 分别表示 伊辛′$(\boldsymbol{s}')$ 中 $s_x s_y$ 和 s_x 前面的系数，并令 $J^*(s_x, s_y)$ 和 $h^*(s_x)$ 表示 伊辛$^*(\boldsymbol{s}')$ 中对应的系数。

2. 为算法 2 的参数设置合适的初始值。在我们的实现中，我们设置 $\mu \leftarrow \mu_0 = 1.5$, $\boldsymbol{\lambda} \leftarrow \boldsymbol{\lambda}_0 = \mathbf{0}$, $\rho \leftarrow 1.1$。
3. 构造集合 $\mathcal{E}$，其中包含由耦合器连接的同链量子比特对。
4. 初始化 $Is^*(\boldsymbol{s}') \leftarrow Is'(\boldsymbol{s}')$，并重复步骤 (i)–(v)，直至满足停止准则。

(i) 对每个 $(s_x, s_y) \in \mathcal{E}$ 执行以下更新$h^*(s_x) \leftarrow h'(s_x) + \lambda_{xy} h^*(s_y) \leftarrow h'(s_y) - \lambda_{xy} J^*(s_x, s_y) = \mu$(ii) 将 Is$^*(\boldsymbol{s}')$ 提交给量子退火机，并获取样本列表（候选解）。(iii) 找出产生最佳解的样本 σ。(iv) 按如下方式更新 $\boldsymbol{\lambda}$：对于 $(s_x, s_y) \in \mathcal{E}$，执行 $(\sigma_x, \sigma_y) \leftarrow$取 (s_x, s_y) 的值，来源于 $\sigma\lambda_{xy} \leftarrow \lambda_{xy} + \mu(\sigma_x - \sigma_y)$ 结束循环。(v) $\mu \leftarrow \alpha\mu$

3.4. 在一类问题上使用增广拉格朗日法

到目前为止，我们已将增广拉格朗日法应用于单个问题，为该问题找到逻辑量子比特的一种表示。这里，我们提出一种修改方法，使增广拉格朗日法能够构造逻辑量子比特的实现，进而用于求解给定类别中的一组问题。为此，该类别中的问题应具有相同数量的变量（逻辑量子比特）。该算法与算法 3 类似，但我们分别求解集合中的每个问题；更新拉格朗日系数 $\boldsymbol{\lambda}$ 时，我们会考虑所有解中违反的约束（断链）。具体细节见算法 4。

算法 4 用于求解同等规模问题集合的增广拉格朗日法

输入： 一组伊辛模型 $\mathcal{S}\, Is_1(\boldsymbol{s}) \ldots, Is_k(\boldsymbol{s})$，初始 $\mu_0 > 0$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_0$，增长因子$\rho > 1$

输出： 伊辛模型集合的最终 μ, $\boldsymbol{\lambda}$

1. 找到一个包含 dim($\boldsymbol{s}$) 个顶点的完全图的嵌入，并用它嵌入 $\mathcal{S}$ 中的每个图；然后使用 Ocean 的 `embed ising` 函数构造变换后的伊辛模型集合 $\mathcal{S}'\, Is_1'(\boldsymbol{s}) \ldots, Is_k'(\boldsymbol{s})$，并将参数 `chain strength` 设为 0。令 J'、 h'、 J^* 和 h^* 如算法 3 中所定义。

2–3. 按算法 3 中的定义设置 μ、 $\boldsymbol{\lambda}$、 ρ 和 $\mathcal{E}$ 。

4. 初始化 $Is_i^*(\boldsymbol{s'}) \leftarrow Is_i'(\boldsymbol{s'})$，针对 $1 \le i \le k$，并记 $\mathcal{S}^* = \{Is_1^*(\boldsymbol{s}) \ldots, Is_k^*(\boldsymbol{s})\}$。重复步骤 (i)–(v)，直至满足停止准则。

(i) 按算法 3 更新 $\boldsymbol{h^*}$ 和 $\boldsymbol{J^*}$ 。(ii) 将 $\mathcal{S}^*$ 中的每个问题提交给量子退火机，并获取每个问题的一组样本。(iii) 找出样本 σ_i ，使其得到的 $1 \le i \le k$的Is_i^* 最佳解。(iv) 按如下方式更新 $\boldsymbol{\lambda}$ for $(s_x, s_y) \in \mathcal{E}$ do(

$\sigma_x^i\ \sigma_y^i \leftarrow \quad s_x\ s_y \quad \sigma_i \quad 1 \le i \le k$,) values of (,) from for ( )e

$\lambda_{xy} \leftarrow \lambda_{xy} + \mu \sum_{i=1}^{k} \sigma_x^i - \sigma_y^i\ /k$

nd for(v) $\mu \leftarrow \alpha\mu$

4. 结果

4.1. 实验设置

我们在最大团问题的实例上测试所提出的方法。团是一个完全连通的图，即每对顶点之间都有一条边。图 G 的最大团（*MC*）是 G 的一个子图，该子图是规模最大的团。最大团问题（*MCP*）要求在G中找到一个最大团，并且这是一个 NP-困难问题 [9]。

为了构造 MCP 的输入图，我们使用概率参数 $p = 0.5$ 和顶点数 $n \in \{50, 75, 100\}$ 生成 Erd˝os–R´enyi 随机图。对于每种数值组合（n， p），我们生成五个随机（n， p）图。

为了在 D-Wave 退火机上求解最大团问题，我们必须将其编码为 QUBO 或伊辛问题。为此，我们为 G 的每个顶点i 定义一个二元变量 $x_i \in \{0, 1\}$ ，用于指示 i 是否包含在所提出的团中。然后，

最大团问题可以表述为

$$\text{minimize } Q = -A \sum_{i \in V} x_i + B \sum_{(i,j) \in \overline{E}} x_i x_j, \tag{13}$$

其中，$\overline{E}$ 是 G 补图的边集，正数常量 A 和 B应满足 $A < B$ [12]。在（13）中，第一项对目标函数进行编码，即团大小（乘以 $-A$）；第二项则将约束函数编码为惩罚项：若顶点集 i（其中 $x_i = 1$）不构成团，其取值至少为 $B = B \cdot 1$。在我们的实现中，选择 $A = 1$ 和 $B = 2$。由于问题（13）是一个 QUBO，而算法 3 要求使用伊辛表示，因此我们使用 D-Wave 的 Ocean 函数 `qubo to ising`将（13）转换为伊辛问题。

在实验中，我们使用通过 D-Wave 的 Leap 量子云服务提供的 `Advantage system4.1` 量子退火机。退火设置为：样本数 1000，退火时间 $100\,\mu$秒。增广拉格朗日法和惩罚法实现中的链强度分别通过运行算法 3 和算法 1 确定；对于默认的逻辑量子比特实现，我们使用 D-Wave Ocean 推荐的 `uniform torque compensation` 函数计算出的值作为链强度。该函数确定的链强度通常会产生少量断链，前因子采用默认值 1。414。处理断链时，我们使用默认的 `majority vote` 方法，将逻辑量子比特的值（$+1$或 -1）设为其物理量子比特中最常见的值。

接下来，我们将 ALM 与 PM 以及采用均匀力矩补偿的 D-Wave默认方法进行性能比较。

4.2. 每次迭代的链断裂数

由于所述算法旨在处理逻辑量子比特中的链断裂（CB），我们的首要目标是考察迭代过程中 CB 数量的变化，以及增广拉格朗日法（ALM）与惩罚法（PM）实现的比较。图2左侧显示每次迭代的平均 CB 数量，右侧显示惩罚法的相应数据。红色“X”表示以 MC 数平均值为指标时的最佳迭代。我们观察到，初始时 CB 数量相当多，在所有情况下最终都降为零；对于增广拉格朗日法，该数量在初期下降较快，随后逐渐趋于平缓，而对于惩罚法，下降则更为缓慢，且斜率大致恒定。此外，对于两种方法和所有图规模，最大团的最佳值都出现在 CB 数量降为零前的几次迭代，而不是最后一次迭代。这可以用减少 CB 数量与增大惩罚参数 μ之间的权衡来解释。具体来说，一方面，消除断链可以使伊辛模型更贴合原问题（1）；另一方面，每次迭代都会将 μ 的值提高 1.1 倍，而这种增大会降低伊辛模型（12）解的准确性。

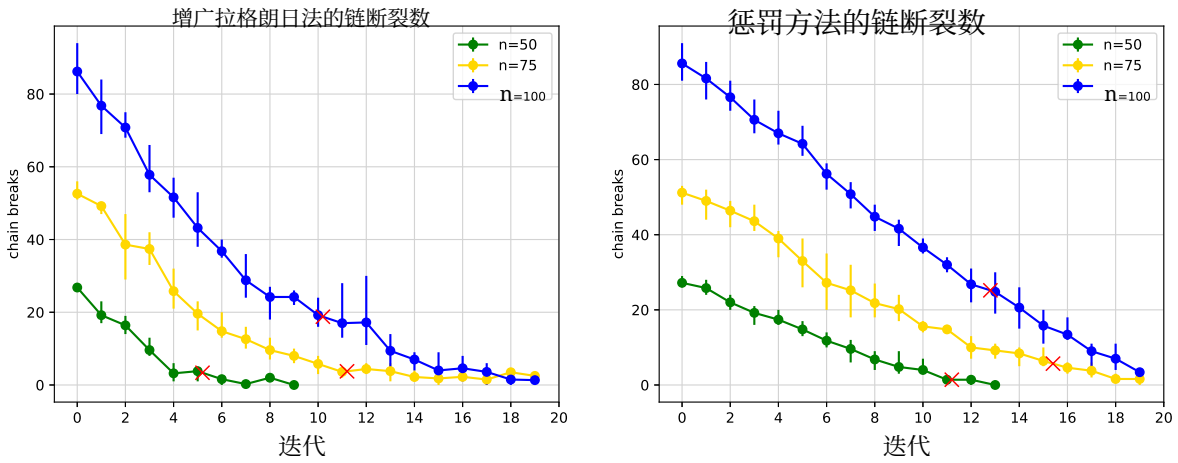

图2：不同规模随机图中，增广拉格朗日法（左）和惩罚法（右）每次迭代的链断裂数量。圆点表示平均值，竖线表示相应迭代中数值的范围，而“×”表示团数达到最高值时的平均迭代次数。

因此，最佳解可能出现在 CB 数量不为零、但 μ 仅适度增大的某次迭代中。

最后，比较增广拉格朗日法和惩罚法达到最佳解所需的迭代次数，可以看到，在所有三种情况下，增广拉格朗日法的迭代次数都少于惩罚法（对于$n = 50$，分别为5.2和11.2次；对于 $n = 75$，分别为11.2和15.4次；对于 $n = 100$，分别为10.2和12.8次）。请注意，此处的“最佳”指特定一次运行中所有迭代所得的最佳解。对于 $n = 100$ 情况，虽然10.2和12.8的对比表明，增广拉格朗日法在迭代次数方面仅略胜惩罚法，但解的质量差异要显著得多，正如我们将在第4.4节中看到的。

4.3. 惩罚因子的取值

接下来，我们比较增广拉格朗日法和惩罚法在算法结束时得到的惩罚因子 μ，以及在达到最佳 MC 数的迭代中得到的惩罚因子。结果如图3所示。可以看出，增广拉格朗日法得到的取值始终更优（更低）：在最后一次迭代中，对于 $n = 50$、75 和 100，较惩罚法分别降低了 41%、13% 和 5%；在达到最佳 MC 数的迭代中，则分别降低了 44%、33% 和 31%。

4.4. 找到的最大团数

最重要的比较标准或许是，新算法能否以及在多大程度上帮助获得比以往更好的解。本小节将比较 ALM、PM 和 D-Wave 软件提供的标准默认方法（SM）。SM 使用的 D-Wave Ocean 软件默认 `uniform torque compensation` (UTC) 方法是一种启发式过程，它通过计算伊辛模型或 QUBO 模型中二次耦合器的

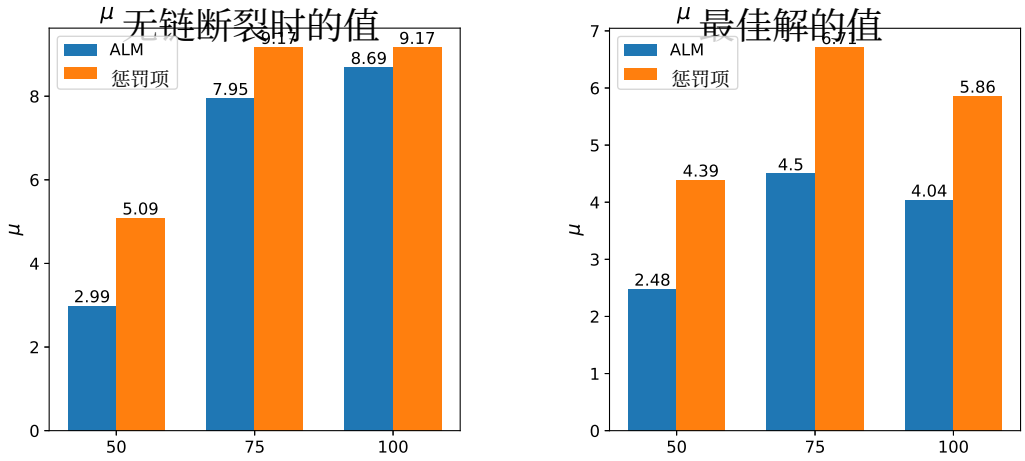

图3：在 ALM 和 PM 完成时（即链断裂数变为零时）的惩罚因子 μ 平均值（左），以及找到 MC 数最佳值时各次迭代对应的值（右）。

均方根（RMS），再乘以伊辛图顶点平均度的平方根以及一个默认值为 1。414 的常数前置因子，来设定链强度（惩罚因子）。

图4展示了在不同规模的随机测试图上比较 SM、PM 和增广拉格朗日法的结果。每个柱形表示相应算法在相应图规模下找到的平均 MC 大小。对于未返回有效团的实例，我们将 MC 大小设为零。可以看出，增广拉格朗日法得到的 MC 数始终优于其他方法。差异最大的是规模最大的实例（$n = 100$），增广拉格朗日法找到的平均团大小是 PM 的两倍，是 SM 的三倍以上。增广拉格朗日法与 PM 在性能上的显著差异，是因为增广拉格朗日法得到的 μ值较小，这有助于提高量子退火的准确性；此外，它还使用拉格朗日系数 λ 来帮助满足链约束，而 PM 仅依赖于 μ。

比较 SM 和 PM 可以发现，SM 使用的 μ 默认值相对较好，但仅限于最小、最简单的情形 $n = 50$。随着问题规模增大、难度提高，SM 相对于 PM 的性能会逐渐下降。这意味着 SM 和 UTC启发式并未充分发挥 PM 的潜力。通过采用更复杂、效果更好的启发式方法，或者直接使用算法1这类迭代算法来估计惩罚因子，或许可以进一步提升性能。

4.5. 增广拉格朗日法在一类问题上的应用

为了在一组问题上使用算法 4，该组中的所有问题都需要具有相同数量的变量；对于最大团问题，这意味着输入图必须具有相同的规模。在我们的实验中，我们选择集合 $\mathcal{S}_n$ 为具有概率参数 $p = 0.5$ 的 Erd˝–R´enyi 随机图 $R(n,\ p)$集合，并且

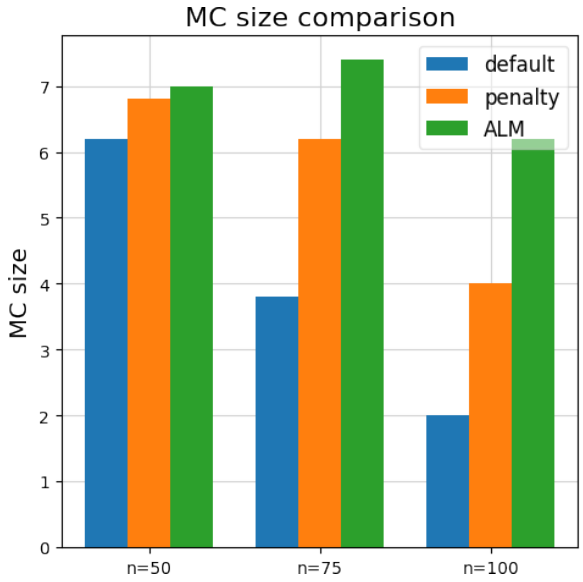

图4：在不同规模的随机测试图上，对默认方法、惩罚项方法和增广拉格朗日法进行比较。

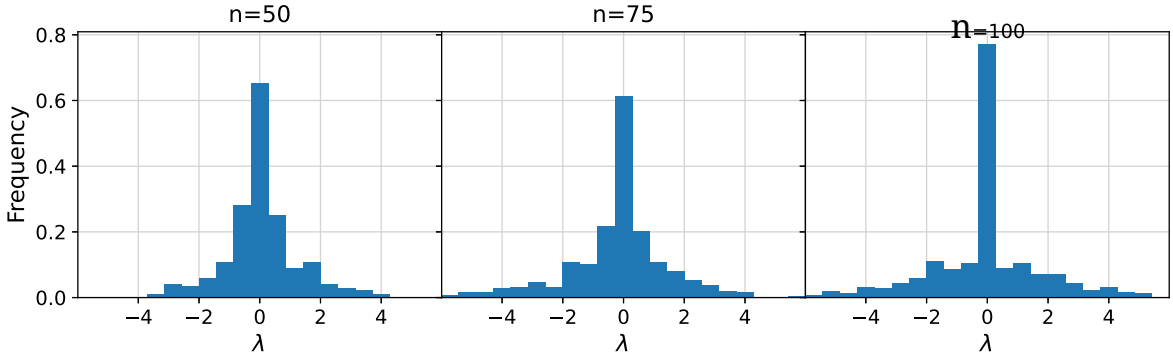

图5：增广拉格朗日集算法的 λ 值分布。使用 `matplotlib.pyplot.hist`方法的 `density`参数对柱形高度进行归一化，使直方图的积分等于 1。

固定 n。与本节中的其他实验一样， n 取值于 $\{50, 75, 100\}$。为了计算 μ 和 $\boldsymbol{\lambda}$的值，对于每个 $n \in \{50, 75, 100\}$，我们在一组从 $\mathcal{S}_n$ 中随机选取的十个图上应用算法 4，并将这些值存储起来以供后续使用。

为了了解拉格朗日系数 $\boldsymbol{\lambda}$的典型取值范围，我们将其取值四舍五入到最接近的整数，并针对三种图规模分别进行分箱。所得直方图如图5所示。可以看到，最常见的取值是零，而且大多数取值都在 $[-4, 4]$之间。

此外，为了展示典型链的边上 λ 值的分布，我们从 $n = 100$ 的嵌入中选取了一条链，并在该链的每条边上绘制相应的 λ 值，如图6所示。边上既有正值，也有

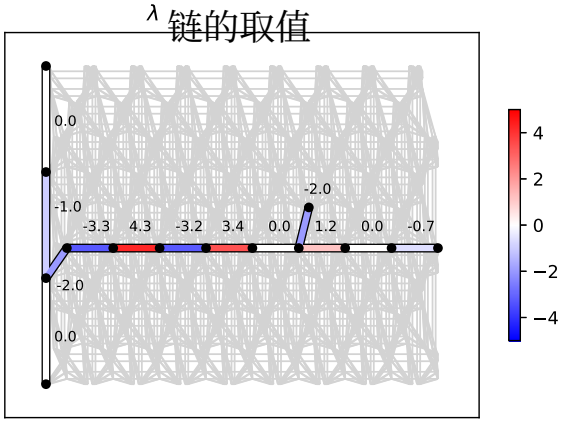

图6：从 $n = 100$的嵌入中随机选取的一条特定链所计算出的 λ 参数值。

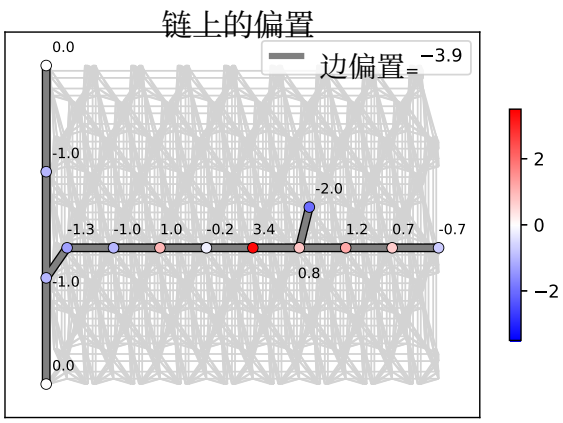

图7：与图6中相同链的线性偏置和二次偏置。

负值，但符号无关紧要，只有数值的大小才重要，因为符号取决于相应边的方向，而边的方向是任意指定的。这些 λ 值以及 μ 值（在此特例中为 -3.9）用于根据方程（12）计算与链约束相对应的量子比特和耦合器上的附加线性偏置和二次偏置。所得的附加偏置如图7所示。正如预期的那样，链的某些部分主要为正偏置，而另一些部分则以负偏置为主。请注意，这些线性偏置未必就是最终发送给量子退火机的伊辛问题中的线性偏置，因为除了链偏置之外，伊辛问题（9）本身也会产生线性偏置，而两者会相加。另一方面，该链的二次链偏置设为 -3.9，就是最终的二次偏置。

为了比较这些算法的准确性，我们在不同的随机图集合 $\mathcal{S}_n$上运行它们，并比较找到的最大团大小。第一种算法是默认的 D-Wave 算法，即上一小节中讨论的单次法（SM）。第二种算法 ALM set 使用由存储的 μ 和 $\boldsymbol{\lambda}$定义的逻辑量子比特表示。上一小节中的增广拉格朗日法与 ALM set 的区别在于，前者需要经过若干次迭代，为特定图确定合适的 μ和 $\boldsymbol{\lambda}$ 值，而后者只需进行一次退火调用。我们比较的第三种算法 $\bar{\text{A}}$LM set$^+$，是在运行 ALM set 后再进行一次增广拉格朗日迭代。这样做的理由是，存储的 μ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 值针对整个类别 $\mathcal{S}_n$ 进行了优化，但未必适用于该类别中的某个特定图。我们推测，以 μ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 作为初始值进行一次迭代，可能有助于调整逻辑量子比特表示，使其更好地适配特定图的特征，从而比 ALM set 得到更好的结果。

图8展示了这项实验的结果。由于 ALM set$^+$ 会取两个最大团值中较好的一个，一个来自 ALM set 运行，另一个来自单次增广拉格朗日迭代，为了确保比较公平，我们也运行 SM 和

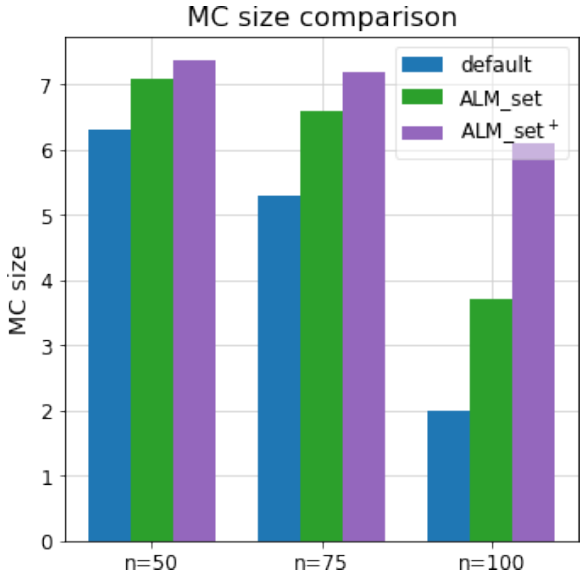

图8：在不同规模的随机图集合上，对比默认方法、ALM set 方法和 ALM set$^+$ 方法。

ALM set 两次，并取两个最大团值中较好的一个。我们观察到，存储μ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 值（ALM set）确实能显著优于 SM。然而，尽管有所改进，$n = 100$的 ALM set 结果仍显著差于 ALM 结果（图4）。不过，增加额外的一次迭代（ALM set$^+$）带来了显著提升，其最大团值大致与 ALM 的结果相当。

5. 结论

本文展示了如何通过迭代优化过程，利用增广拉格朗日方法，根据链耦合器和量子比特上的二次偏置与线性偏置，为给定的伊辛问题确定逻辑量子比特的表示。我们通过不同规模随机图上的最大团问题，对该方法进行了实验分析，并观察到所提出的方法优于基于二次惩罚的方法。随着图规模增大、问题难度提升，性能差距也愈发显著。我们还提出了一种改进方法，可为整类图生成并保存链的偏置值。尽管该方法优于使用默认链权重的方法，但只增加一次增广拉格朗日迭代的方法版本，其性能便与完整的增广拉格朗日版本（迭代5–11次）相当。

本文为未来研究留下了若干开放问题。我们的表述假设，原本带有约束的优化问题，其约束已作为惩罚项纳入目标函数。但由于我们

使用增广拉格朗日法寻找逻辑量子比特的表示，我们也可以利用相同的迭代次数来寻找更好的约束表示。我们在实验中使用的问题——最大团问题——其约束的惩罚因子相对较低，仅为 2；但许多其他优化问题需要大得多的惩罚因子，因此采用增广拉格朗日法可以带来显著差异。另一项可能的改进是，为第 i 个逻辑量子比特使用个体惩罚因子 μ_i，而不是像我们当前实现中那样使用统一的惩罚因子。

致谢

本研究得到保加利亚国家科学基金项目 KP-06-DB-11 的资助，并获得美国能源部通过洛斯阿拉莫斯国家实验室提供的支持。洛斯阿拉莫斯国家实验室由 Triad国家安全有限责任公司代表美国能源部国家核安全管理局运营（合同编号：89233218CNA000001）。

参考文献

[1]Ernesto G Birgin 和 Jos´e Mario Mart´ınez。《约束优化的实用增广拉格朗日方法》。SIAM，2014。[2]Vicky Choi。绝热量子计算中的小子图嵌入：I. 参数设置问题。《量子信息处理》，7(5):193–209，2008。[3]Vicky Choi。绝热量子计算中的小子图嵌入：II. 小子图通用图设计。《量子信息处理》，10(3):343–353，2011。[4] Carleton James Coffrin。链的挑战：测试 D-Wave 量子退火器在离散优化中的极限。技术报告，洛斯阿拉米托斯国家实验室（LANL），洛斯阿拉米托斯，新墨西哥州（美国），2019。[5] Yu. G. Evtushenko、A. I. Golikov 和 N. Mollaverdy。用于大规模线性规划问题的增广拉格朗日方法。《优化方法与软件》，20(4-5):515–524，2005。[6] D. Fern´andez 和 M. V. Solodov。在二阶充分最优性条件下，精确与非精确增广拉格朗日方法的局部收敛性。《SIAM 优化期刊》，22(2):384–407，2012。[7] Erica Grant 和 Travis S Humble。量子退火中嵌入链断裂的基准测试。《量子科学与技术》，7(2):025029，2022。[8] T. Kadowaki 和 H. Nishimori。横场伊辛模型中的量子退火。《物理评论E》，58(5):5355，1998。[9]Richard M. Karp。组合问题之间的可约性。载于 Raymond E. Miller 和 James W. Thatcher 编，《计算复杂性》，IBM 研究研讨会系列，第 85–103 页。Plenum Press，纽约，1972。[10] Andrew D King 和 Catherine C McGeoch。量子退火平台的算法工程。《arXiv 预印本 arXiv:1410.2628》，2014。[11] Hunpyo Lee。确定 D-Wave 量子退火器中嵌入所引发的链强度，2022。[12] A. Lucas。许多 NP 问题的伊辛形式化。《前沿物理学》，2(5)，2014。[13] Elijah Pelofske、Georg Hahn 和 Hristo Djidjev。量子退火器的高级解嵌入技术。载于《2020 年国际重启计算会议（ICRC）》，第 34–41 页。IEEE，2020。

[14]Elijah Pelofske、Georg Hahn 和 Hristo N Djidjev。量子退火器的噪声动力学：利用空闲量子比特估算有效噪声。《arXiv 预印本 arXiv:2209.05648》，2022。[15] Kristen L. Pudenz。量子退火器的参数设置。载于《2016 年 IEEE 高性能极限计算会议（HPEC）》，第 1–6 页，2016。[16] J. Raymond、N. Ndiaye、G. Rayaprolu 和 A. D. King。通过参数调优和拓扑补偿提升逻辑量子比特的性能。载于《2020 年 IEEE 量子计算与工程国际会议（QCE）》，第 295–305 页，美国加利福尼亚州洛斯阿拉米托斯，2020 年 10 月。IEEE 计算机学会。[17] Davide Venturelli、Salvatore Mandr`a、Sergey Knysh、Bryan O’Gorman、Rupak Biswas 和 Vadim Smelyanskiy。全连接自旋玻璃的量子优化。《物理评论X》，5(3):031040，2015。