arXiv:2302.04162v1 [quant-ph] 8 Feb 2023

多项式时间内嵌入式伊辛问题的最优充分条件

Elisabeth Lobe [1]和 Volker Kaibel[2]

[1]德国航空航天中心（DLR）软件技术研究所，Lilienthalplatz 7, 38108 不伦瑞克，德国[2]马格德堡奥托·冯·格里克大学数学优化研究所，Universitätsplatz 2，39106 马格德堡，德国

2023年2月8日

摘要 量子退火器的一项核心应用是求解伊辛问题。然而，合适的伊辛问题必须经过恰当的表述：一方面要符合硬件的特定限制，另一方面要代表实际需要求解的原始问题。我们对这类嵌入式伊辛问题的充分条件进行解析评估，并将其转化为线性优化问题。通过设置旨在最小化问题参数最大绝对值的目标函数，我们处理了退火器的精度问题。由于若干约束存在冗余，我们证明，在嵌入顶点诱导出树的标准嵌入设置下，形式上规模呈指数增长的优化问题可以经过约简，最终在多项式时间内求解。这使得我们能够在实际设置中构造可证明等价的嵌入式伊辛问题。

关键词 伊辛问题、嵌入、量子退火、线性优化

1 引言

1.1 背景

人们对量子退火器的兴趣依然不减，例如 D-Wave Systems Inc. 公司开发的设备，其发展势头持续迅猛。通过在由相互重叠的超导环构成的量子比特上实现伊辛问题的绝热演化，这些设备有望求解 NP 难问题。尽管若干物理效应妨碍了底层绝热定理的理想实现，因此只能以一定概率找到最优解，但实验结果对于某些应用而言颇具前景 [25]。不过，量子退火器相较于经典计算的优势仍有待讨论 [13]。

对这类退火器进行“编程”，意味着提供特定实现的伊辛问题的输入参数，即特定硬件图中顶点上的**权重** 以及边上的**强度** 。目前可用的硬件架构有**Chimera**和**Pegasus** [3] ；最近还公布了一种名为**Zephyr**的新架构，但尚未发布 [2]。

然而，有趣的应用通常无法直接与这些图相匹配，而是需要采用一种称为**嵌入** [6], 的方法：将原始问题中的每个顶点映射到硬件图中的多个顶点，以表示所需的连通性。遗憾的是，寻找这种嵌入本身就是一个NP困难问题 [18]。尽管每次发布新的硬件都会提高连通性，但显而易见，受物理限制影响，所有这些图都存在某种局部性。因此，未来开发出完全连通的硬件图不太可能，嵌入问题在长期内仍将存在。为了绕过这一瓶颈，同时让用户仍能在这些机器上进行实验，预先计算且通用的嵌入模板可作为良好的起点，例如完全图的嵌入模板 [19]。此外，D-Wave API 在 minorminor 软件包中提供了启发式算法 [9], ，这些算法主要基于 [4]的一种实现。

然而，仅有嵌入仍不足以让我们在 D-Wave 机器上进行计算。我们需要将两个不同的问题结合起来：一个是待求解的原始问题，另一个是退火器能够求解的问题。也就是说，我们需要为一个运行在嵌入所诱导的硬件子图上的伊辛问题找到合适的参数，即权重和强度。由此得到的**嵌入式伊辛问题**应当能够表示原始伊辛问题，使得相应的解可以从量子退火器的输出中恢复出来（至少在理论上）。如果嵌入式伊辛问题的表述有误，它可能会得到对原始问题而言并非最优的最优解；更糟的是，这些解甚至可能无法“可反嵌入”，也就是说，它们与任何原始解都没有明确的对应关系。后者的一个例子是这样一条量子比特链：我们得到的解值一半为 -1，另一半为 $+1$ 。对此，可以对属于同一个原始顶点嵌入的顶点施加**“强耦合”**，以确保它们在退火过程中协同行动。我们称它们应当**同步**。这可以通过在顶点之间的边上施加绝对值较大的强度来实现。但多大才算“足够强”？ V. Choi 将这一非平凡问题称为**参数设置** 问题 [5]，即寻找合适的参数，以证明原始伊辛问题与嵌入式伊辛问题等价。

遗憾的是，在实际应用中，我们还需要考虑对参数的进一步限制。首先，参数只能在一定区间内取值，而具体的边界值可能因不同架构甚至不同设备而异。乍看之下，这似乎并不成问题：我们只需将伊辛问题乘以一个常数因子进行缩放即可。然而，这会缩小问题参数之间的绝对差值，而 D-Wave 退火机最关键的限制正是其参数精度。由于参数在模拟控制电路中传输时会受到不同的扰动 [14]，实际求解的问题与用户指定的问题会略有不同。因此，若要使用这些机器求解问题，就必须谨慎选择问题，以确保其对参数精度具有某种“鲁棒性”。

尽管编程接口允许在给定范围内输入任意浮点值，但机器实际上只能实现有限的离散参数范围。在 [26], 中，对实验所用的特定退火器估计其精度约为 $_{1\ 30}$ ，这意味着对于缩放问题，整数值介于 -30和 30 之间。对于精度更高、也就是整数参数更大的问题，由于退火机无法分辨这些参数，成功概率会大幅降低。较新发布的机器可能已经提高了精度。不过，具体数值和界限并不明确，只能通过进一步实验进行估算。

对于用户而言，只有当机器能够在一定次数的运行中找到所提供问题的最优解，也就是说能够达到可接受的**成功概率** 时，为这类退火机编程才值得付出努力。由于内部实现的参数所受的具体限制并未得到准确说明，我们因此只能提出一些目标，尽可能改善编码后伊辛问题的参数分布，并希望以此提高成功概率。由于在存在极大参数时，机器可能无法区分两个过于接近的参数，因此第一步应尽可能减小出现的最大参数（不进行缩放）。这不仅涉及将任意组合问题编码为一般伊辛问题，而且在需要嵌入伊辛问题时尤为重要：这类大值通常出现在嵌入顶点之间的强耦合中。因此，耦合强度不能任意增大。

因此，我们不仅需要找到一个可行的参数设置，以确保嵌入顶点同步，还需要使其达到最优，即耦合强度尽可能小，以符合机器的精度。只有解决了这个问题，我们才能提供合适的嵌入式伊辛问题，从而利用量子退火器开展有意义的实验。此外，只有这样才能分析机器的实际性能，因为此时不会再将参数设置错误的问题与物理效应混为一谈；二者会以不同方式抑制成功概率。

1.2 相关工作

围绕小子图嵌入及相应参数设置的所有工作的基础由 V. Choi 奠定。在 [5], 中，首次给出了耦合边强度关于原始参数的一个上界，并通过对硬件图中的顶点进行显式非均匀加权实现了这一结果。然而在实践中，这些界限似乎过于宽松；它们引入的较大强度会因必要的缩放因子而抑制成功概率。除此之外，对显式参数设置问题的研究不如对嵌入问题深入，尤其是在分析方面，尽管其局限性已得到充分考察和理解，而且早期就已认识到，单个顶点嵌入中的强度选择对 D-Wave 机器的成功概率至关重要 [14]。

目前，量子退火领域普遍认为，**耦合强度**——通常只需一个强度值，并将其应用于所有耦合边——需要大于原始伊辛问题中最大的绝对参数，但不应大出好几个数量级，以免引发退火器的精度问题。通常会采用 2 倍的系数，例如 [23] 中所述。同时，权重通常均匀分布在各个顶点上。

实践中使用的另一种方法是通过实证确定缩放因子，参见例如 [27]。这意味着将同一原始问题的多个实例转换为伊辛问题，通常会得到相同的结构。通过使用特定参数逐一求解这些问题，并在之后检查所找到解的可行性，可以估算出输入参数的特定界限或界函数，并假定它们对同一问题的所有其他实例也成立。在 [22] 中，研究者测试了多种策略来选择权重，以实现不同的耦合强度缩放，但没有一种策略显示出明显优势。无论如何，这种扫描并不能证明嵌入式伊辛问题的任何等价性，只能提供一些指导。

在 dwave-system 软件包中，D-Wave 的编程接口提供了一种设置耦合强度的方法，称为“均匀力矩补偿”[8], ，它很可能基于 [23]。在给定的表述中，该方法仅适用于链，也就是说，单个顶点的嵌入会在硬件图中形成一条路径。该方法源于这样一种想法：链的中心边受到相邻链随机影响而产生的“力矩”，需要通过相应设置权重和强度来补偿。尽管 [23] 中针对某些随机实例的实证研究结果颇有希望，但目前缺少对由此获得的解之等价性的解析研究，因此，这种方法也只能被视为一种用于确定耦合强度的启发式方法。

据我们所知，较新的出版物 [11] 是继 Choi 的研究之后，首篇也是唯一一篇对一般参数设置问题进行分析研究的文献。作者基于任意但给定且固定的权重，推导出耦合强度的界限，并证明这些界限比 Choi 给出的界限更严格，且在某些特殊情形下是紧的。

1.3 贡献

在本研究中，我们聚焦于退火机的具体编程限制；除此之外，我们将退火器视为黑箱，不质疑其实际求解所编程问题的能力。我们的目标是清晰划分问题向机器转换的各个步骤，并在退火器介入之前，围绕嵌入式伊辛问题完成整个流程。因此，我们在此回答一个纯数学问题。这个问题本身就值得研究，同时也有助于改进量子退火器的应用。

我们对嵌入式伊辛问题给出了数学描述，并证明它与原始伊辛问题等价，也就是说，这两个问题会产生等价解。这种描述涵盖了包含任意嵌入子图的嵌入，而不仅限于以往方法中的链。通过聚焦于同步解，我们提出了一般性的充分条件。对单个顶点及其对应嵌入的考察，加上对由此提取的实例所作的某些假设，使我们能够提出有关耦合强度的具体约束。

事实上， [11] 的界限看起来与我们在第 3.3 节推导出的割约束相似。然而，两者有一个重大区别：我们的约束不包含绝对值，而这可能是影响问题复杂度的决定性因素。我们采用自顶向下的方法，详细推导这些界限，从而清楚地说明为何可以省略绝对值。由此，我们也证明了嵌入式伊辛问题中更一般条件的充分性。我们还指出了在哪些地方“失去了必要性”，因而只能推导出我们要求的充分性。因此，可以更容易地识别出界限取紧的实例。

通过选择特定的目标函数，并引入权重的变量设置以及额外的间隙参数，我们向前迈出了重要一步，将问题扩展为一个求解最优耦合强度的线性优化问题。因此，我们首次从数学优化的角度分析参数设置问题。通过减少约束数量，我们证明，与嵌入问题不同，该问题可以轻松求解；也就是说，当嵌入顶点诱导出树时，该问题可在多项式时间内求解 [17]。

1.4 结构

首先，我们在第2节介绍基本术语和概念。在第2.1节回顾本文使用的主要图论术语后，我们在第2.2节和第2.3节分别介绍量子退火中的两个主要概念——伊辛问题和图嵌入，为其提供准确的背景知识。结合这两个概念，我们在第2.4节提出嵌入式伊辛问题。第2.5节介绍同步变量策略。

在第 3 节中，我们将完整的嵌入式伊辛问题分解为更小的问题，并分别求解：通过提取与单个顶点相关的部分，我们在第 3.1 节中推导出关于该顶点参数的充分条件。我们在第 3.2 节和第 3.3 节中建立并简化相应的优化问题。最终得到的问题总结于第 3.4 节。

随后，我们在第 4 节中分析该问题。我们在第 4.1 节中给出其定义域多面体的简化描述。通过在第 4.2 节中利用冗余大幅减少约束数量，我们可以推导出树的多项式时间可解性。最后，我们在第 5 节总结研究结果。

2 基本术语

2.1 一般记号

首先，我们介绍本文中通用的一些记号。对于基本的图定义，我们通常遵循图论与优化领域的标准文献，参见例如 [10] 或 [16], ，并在此简要回顾主要记号： $G = (V, E)$ 始终表示一个有限简单无向图，其有限顶点集为 V，边集为$E \subseteq \{\{v, w\} : v, w \in V\}$。给定图 G，若未专门命名，则 $V(G)$ 和 $E(G)$ 分别表示其顶点集和边集。子图由 G 的边和顶点的任意子集构成；而对于某个顶点集 $S \subset V(G)$， $G[S]$ 表示图 G 的点诱导子图，其中 $V(G[S]) = S$，且 $E(G[S]) = \{\{v, w\} \in E(G) : v, w \in S\}$。为简洁起见，我们用交换乘积 vw 表示一条边 $\{v, w\}$ 。我们用以下记号表示图 G 中顶点 v 的邻居

$$N(v) := \{w \in V(G) : vw \in E(G)\}.$$

关联边为

$$\delta(S) := \{vw \in E(G) : v \in S, w \in V(G) \setminus S\},$$
$$\delta(S, T) := \{vw \in E(G) : v \in S, w \in T\} = \delta(S) \cap \delta(T),$$

其中，我们用 $\delta(v)$ 简写 $\delta(\{v\})$。

对于带指标的参数或变量 $x \in X^I$，其指标集为 I，取值集为 X，我们用 $x_J = (x_i)_{i \in J}$ 表示指标的一个子集 $J \subseteq I$ 对应的这些参数或变量的子集，即相应的向量。反过来，我们通过以下方式“应用” J

$$x(J) = \sum_{i \in J} x_i.$$

我们分别用 $\mathbb{1}$ 和 $\mathbb{0}$表示仅包含 1 或 0 的向量。必要时，我们会为两者添加对应指标集的下标。若集合 S 是不交并，由集合 S_1 和 S_2组成，即 $S_1 \cup S_2 = S$ 和 $S_1 \cap S_2 = \emptyset$，则记作 $S = S_1 \cup S_2$。我们用 2^X 表示集合 X的所有子集构成的集合。

2.2 伊辛问题

在量子退火处理器中，超导环的磁性及其耦合可以通过用户定义的输入参数进行调节。这意味着我们可以编码不同的二次函数。术语“伊辛模型”也指这些目标函数，因为它们与物理模型 [5] 的表述密切相关。本文始终采用以下记号：

定义 1. 图 G 上的一个**伊辛模型**，其**权重**为 $W \in \mathbb{R}^{V(G)}$，**强度**为$S \in \mathbb{R}^{E(G)}_{\neq 0}$，是一个函数 $I_{W,S}\colon \{-1,1\}^{V(G)} \to \mathbb{R}$，满足

$$I_{W,S}(s) := \sum_{v \in V(G)} W_v s_v + \sum_{vw \in E(G)} S_{vw} s_v s_w.$$

我们称 G 为伊辛模型的**相互作用图**。

通常，我们固定相互作用图。为了区分同一图上的两个伊辛模型，我们使用符号 $I_{W,S}$，并将对应的权重和强度写在下标中。如果根据上下文可以明确这些信息，我们就省略下标。根据这个定义，我们可以表述量子退火机能够处理的优化问题的一般形式：

> 伊辛问题。 给定一个图 G、 $W \in \mathbb{R}^{V(G)}$ 和 $S \in \mathbb{R}^{E(G)}$，求解 s，使其满足
>
> $$\min_{s \in \{-1,1\}^{V(G)}} I_{W,S}(s).$$

D-Wave 的量子退火器实际上只能实现取值为浮点值且满足 $W \in [-m,m]^{V(G)}$ 以及$S \in [-n,n]^{E(G)}$ 的系数，其中 m、 $n \in \mathbb{N}$为特定值。例如，对于当前的 Chimera架构，我们有 $m = 2$ 和 $n = 1$。不过，由于可以进行缩放，这并非严格限制。能够更深入地反映系数分布的一个量是最大绝对系数

$$C_{\max} := \max\left\{\|W\|_\infty, \|S\|_\infty\right\} = \max\left\{\max_{v \in V(G)} |W_v|, \max_{vw \in E(G)} |S_{vw}|,\right\},$$

特别是与其对应项相比时，最小绝对系数不为零，或者两个绝对系数之间的最小差值

$$\min\left\{|x-y| : x \neq y \in \{0\} \cup \{W_v : v \in V(G)\} \cup \{S_{vw} : vw \in E(G)\}\right\}.$$

如果根据微分方面的考虑，进一步将权重和强度限制为 $\mathbb{Z}$，也就是说，它们分别取整数范围 $\{-m, -m+1, ..., m\}$ 和 $\{-n, -n+1, ..., n\}$，那么后者经过缩放后变为 1。因此，最大绝对系数 $C_{\max}$ 是评估问题是否满足参数限制、从而是否适合使用退火器求解的关键值。根据 [26],，我们至少需要 $C_{\max} \leq 30$ 才能达到可接受的成功概率。

与伊辛问题对应的判定问题已知是 NP 完全的 [1]。这意味着，多种问题都可以在多项式时间内映射到该问题 [20]。尤其是，它与二次无约束二元优化问题（QUBO）密切相关；后者在组合优化领域更为人熟知，也得到了深入研究。更多详情请参见例如 [15] 。

有一些可直接操作伊辛模型的预处理方法。其中一种方法适用于顶点的权重大于其关联边强度的影响之和的情况。我们在此回顾这一著名结果，因为它意味着在下文的研究中可以排除某种权重-强度组合。尽管 [5]，已经用到了这一结果，但并未在其中给出正式证明。因此，为使论述完整，我们也补充了证明。

引理 2. 对于图 G 上的伊辛模型 $I_{W,\ S}\colon\ \ \{-1,1\}^{V(G)}\to\mathbb{R}$，其中 $W\in\mathbb{R}^{V(G)}$ 且 $S\in\mathbb{R}^{E(G)}$，若满足

$$|W_v|>\sum_{n\in N(v)}|S_{vn}|$$

对于某个顶点 $v\in V(G)$，每个最优解

$$s^*\in\ \operatorname*{arg\,min}_{s\in\{-1,1\}^{V(G)}}\ I_{W,S}(s)$$

满足 $s_v^*=-\mathrm{sign}(W_v)$。

证明。 我们提取 $I_{W,\ S}$ 中包含 s_v^* 的部分，其中

$$I_{W,S}(s^*)=\sum_{w\in V(G)\setminus\{v\}}W_ws_w^*+\sum_{wu\in E(G)\setminus\delta(v)}S_{wu}s_w^*s_u^*+\underbrace{W_vs_v^*+\sum_{n\in N(v)}S_{vn}s_v^*s_n^*}_{=:I^v(s_v^*)},$$

其中我们将除 s_v^* 之外的其他 s 个变量固定。根据顶点 v 的条件，可得

$$|W_v|>\sum_{n\in N(v)}t_nS_{vn}\quad\forall t\in\{-1,1\}^{N(v)}$$

因此可以观察到

$$\begin{aligned}I^v(\mathrm{sign}(W_v))&=|W_v|+\sum_{n\in N(v)}S_{vn}\big(\mathrm{sign}(W_v)s_n^*\big)\\&>0\\&>-|W_v|+\sum_{n\in N(v)}S_{vn}\big(-\mathrm{sign}(W_v)s_n^*\big)=I^v(-\mathrm{sign}(W_v)).\end{aligned}$$

这表明，无论其他 s 变量如何赋值，$s_v^*=\mathrm{sign}(W_v)$ 的贡献始终大于取反后的选择。

□

注：同样很容易看出，如果对于 v，上述条件中的等式成立，则最优解不一定会对 s_v^* 取值 $-\mathrm{sign}(W_v)$。不过，这只有在证明中的最后一个不等式退化为等式时才会发生。因此，两种选择会得到相同的最优值，但我们仍然可以预先将 $s_v^*=-\mathrm{sign}(W_v)$ 设定为固定值。

基于这一结果，我们可以预先从伊辛问题中移除某些变量。因此，以下假设给定的伊辛模型已无法再根据该引理进行预处理，也就是说，我们有

$$|W_v|<\sum_{n\in N(v)}|S_{vn}|\tag{I}$$

对于所有顶点 $v\in V(G)$。

然而，使用 D-Wave 的退火机求解问题时，我们无法任意选择相互作用图 G。它必须与当前运行的硬件图相对应。只有当 G是硬件图的子图时，我们才能通过将多余的参数设为 0，直接使用 D-Wave退火器求解伊辛问题（并以一定概率得到解）。

2.3 图嵌入

D-Wave 的量子退火器并不实现全连接图；全连接图可以用相同或更少数量的顶点求解具有任意相互作用图的伊辛模型。相反，它们提供特定的硬件图，用于表示构成量子比特的相互重叠超导环的连通性。对于当前运行的硬件，这些图是**Chimera**和**Pegasus 图** [7]。

如果所研究的应用没有经过明确定制以适配这些图，那么相应伊辛模型的相互作用图在大多数情况下与它们毫无关系。因此，为了能够在这类退火机上进行计算，我们始终必须处理问题图与实际硬件图之间的差异：这就需要所谓的**嵌入**。这意味着将多个硬件顶点组合起来形成一个逻辑顶点，以模拟任意的问题连通性。由于后续工作以此为基础，为完整起见，我们在此重复并略微扩展 [18] 的定义：

定义 3。 对于两个图 G 和 H，将 G 嵌入 到 H 中的映射为 $\boldsymbol{\varphi}$： $V(G) \to 2^{V(H)}$，并满足以下性质；为简便起见，我们使用 $\boldsymbol{\varphi_v} := \varphi(v)$表示 $v \in V(G)$：

a) 所有 φ_v 对于 $v \in V(G)$，在 H中诱导出互不相交的连通子图，更准确地说
- 对于所有 $v \neq w \in V(G)$，我们有 $\varphi_v \cap \varphi_w = \emptyset$，并且
- $H[\varphi_v]$ 对于所有 $v \in V(G)$ 都是连通的，

b) 对于所有边 $vw \in E(G)$， H 中至少存在一条边连接集合 φ_v 和 φ_w，这意味着我们有 $\delta(\varphi_v, \varphi_w) \neq \emptyset$。

如果存在这样一个针对 G 和 H 的嵌入函数，我们就称其可**嵌入**到 H 中 .

图1 展示了这样一种嵌入示例。嵌入这一概念与图 minor 密切相关，因此也称为 **小 minor 嵌入** [6]。早在量子退火成为热门话题之前，人们就已对一般的图 minor 进行了深入研究，其理论基础由 Robertson 和 Seymore 奠定，参见例如 [24]。在量子退火的语境下， H 指硬件图，例如 Chimera 图，而 G 指由具体应用及其具体伊辛表述推导出的问题图

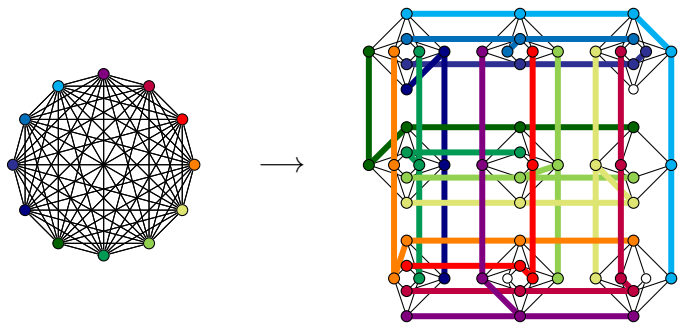

图1：在破损的 Chimera 图中嵌入完全图的示例 [19]

因此，问题图可以完全任意。在下文中，我们假定嵌入已给定。

2.4 嵌入式伊辛问题

定义 1 中给出的伊辛模型定义在任意图上，因此也定义在可能的硬件图上。然而，如前所述，典型应用需要进行嵌入。因此，本节引入伊辛模型的扩展定义，以结合这两个概念。为此，我们首先通过以下图结构扩展定义 3 中的嵌入记号：

定义 4。对于两个图 G 和 H 以及一个嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$，将 G 嵌入到 H中，令**嵌入图**为由该嵌入得到的 H 的子图，记为

$$\boldsymbol{H_\varphi} := H\left[\bigcup_{v\in V(G)} \varphi_v\right] = \left(\bigcup_{v\in V(G)} \varphi_v, E_\varphi \cup E_\delta\right)$$

with

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E_\varphi} &:= \bigcup_{v\in V(G)} E(H[\varphi_v]),\\ \boldsymbol{E_\delta} &:= \bigcup_{vw\in E(G)} \boldsymbol{\delta_{vw}} := \bigcup_{vw\in E(G)} \delta(\varphi_v, \varphi_w),\end{aligned}$$

分别表示 **内连**和 **互连边**。

利用定义 4 中的嵌入对象，我们现在可以在给定的嵌入图上表述伊辛模型。以下概念在量子退火领域中已广为人知，例如参见 [5] 和 [23], ，但我们希望在此将其以更加形式化的方式呈现。

定义 5。对于两个图 G 和 H 以及嵌入$\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$，将 G嵌入 H的一个**嵌入式伊辛模型**是定义在 H_φ上的伊辛模型，其中我们有 $\boldsymbol{\bar{I}_{\overline{W}\,\overline{S}}}(,,s\colon \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \mathbb{R}$，其

$$\begin{aligned}\bar{I}_{\overline{W},\overline{S}}(s) &:= \sum_{v\in V(G)} \left(\sum_{q\in\varphi_v} \overline{W}_q s_q + \sum_{pq\in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} s_p s_q\right) + \sum_{vw\in E(G)} \sum_{pq\in\delta_{vw}} \overline{S}_{pq} s_p s_q\\ &= \sum_{q\in V(H_\varphi)} \overline{W}_q s_q + \sum_{pq\in E_\varphi\cup E_\delta} \overline{S}_{pq} s_p s_q\end{aligned}$$

权重为 $\boldsymbol{\overline{W}} \in \mathbb{R}^{V(H_\varphi)}$，强度为 $\boldsymbol{\overline{S}} \in \mathbb{R}^{E(H_\varphi)}$。

在这种情况下，我们将寻找一个 s 使其满足

$$\min_{s\in\{-1,1\}^{V(H_\varphi)}} \bar{I}_{\overline{W},\overline{S}}(s)$$

上述嵌入式伊辛模型 $\bar{I}_{\overline{W},\ \overline{S}}$ 所对应的伊辛问题称为嵌入式伊辛问题。

采用这种表述方式，并令 $H = C$ for C 表示 D-Wave 当前运行的一张破损的 Chimera 图，我们可以用 D-Wave

退火器（以一定概率）求解相应的嵌入式伊辛问题。然而，对于底层连通图需要进行嵌入的任意伊辛模型，我们需要找到一个合适的对应嵌入式伊辛模型。这需要以特定方式选择权重和强度，从而使新伊辛问题的最优解最终对应于原问题的最优解。

特别是，通常我们不仅想知道最优值，还想知道最优解本身，因此需要一种方法，将嵌入式解转换为原始解。因此，我们需要一个易于计算的"解嵌入"函数，也就是说，该函数能够在多项式时间内计算。以下定义对此作了更正式的说明。为简洁起见，我们省略下标中的权重和强度。

定义 6. 对于两个图 G 和 H 以及嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$，若嵌入式伊辛模型 **等价嵌入式伊辛模型** $\bar{I}\colon \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \mathbb{R}$ 与给定的伊辛模型 $I\colon \{-1,1\}^{V(G)} \to \mathbb{R}$ 满足以下性质，则称其为该模型的等价嵌入式伊辛模型：

a) 相应的伊辛问题在以下意义上等价：

$$\min_{s\in\{-1,1\}^{V(H_\varphi)}} \bar{I}(s) + c = \min_{t\in\{-1,1\}^{V(G)}} I(t)$$

其中 $c \in \mathbb{R}$ 是已知常数，并且

a) 存在一个映射，可将嵌入式伊辛问题的最优解 $s^* \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}$ 转换为（未嵌入）伊辛问题的最优解 $t^* \in \{-1,1\}^{V(G)}$，且该映射可在多项式时间内计算。

如果底层物理系统能够理想地实现相应的物理模型，那么这就足以使用量子退火机。然而，在现实世界中这是不可能的，因此这些机器只能以启发式方式运行，并且只能以某种未知概率提供解。一般而言，我们无法确定找到的是最优解、次优解，还是根本没有找到解。因此，用户不仅需要能够访问前面提到的最优解映射，还需要更多信息来处理机器给出的结果。

在实践中，为了克服这个问题，我们需要对上述定义进行扩展：对于退火器给出的每个解，而不仅仅是最优解，我们都希望知道能否将其反嵌入为一个原始解；如果可以，也希望知道如何操作。我们定义：

定义 7。对于两个图 G 和 H 以及将 G 嵌入到 H 中的嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$，给定伊辛模型$I\colon \{-1,1\}^{V(G)} \to \mathbb{R}$ 的等价嵌入式伊辛模型 $\bar{I}\colon \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \mathbb{R}$ 称为**可反嵌入**，如果存在两个函数

$$\boldsymbol{\psi} : \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \{0,1\}$$

and

$$\boldsymbol{\tau} : \left\{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} : \psi(s) = 1\right\} \to \{-1,1\}^{V(G)}$$

二者均可在多项式时间内计算。尽管

$$\psi(s) = \begin{cases} 1 & \text{if } s \text{ is de-embeddable,} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

用于判断我们能否从嵌入解计算出原始解，函数 τ 则提供相应的去嵌入解，其中我们有

$$\bar{I}(s) + c = I(\tau(s)) \qquad \forall s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \text{ with } \psi(s) = 1$$

对于常数 $c \in \mathbb{R}$。

我们称

$$\psi^{-1}(1) = \left\{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} : \psi(s) = 1\right\}$$

可反嵌入解的集合。

因此，对于

$$s^* \in \underset{s\in\{-1,1\}^{V(H_\varphi)}}{\arg\min} \bar{I}(s),$$

根据定义 6，我们有

$$\tau(s^*) \in \underset{t\in\{-1,1\}^{V(G)}}{\arg\min} I(t).$$

在实践中，最有用的情况是所有原始解都有对应的嵌入解，这意味着 τ 是满射的。反过来，这意味着我们有 $\psi^{-1}(1) \cong \{-1,1\}^{V(G)}$，并且至少有 $2^{|V(G)|}$ 个可反嵌入解。

为了找到这样的函数，我们需要在某个阶段确定嵌入解应遵循何种结构。尽管由于可调参数数量众多，可能存在不同的选择，但最直接的方法是将考察范围限定为这样一类解：对应于单个原始顶点嵌入的所有变量都取相同的值。这一原则称为**同步**，下一节将对此作更详细的说明。

2.5 变量同步

给定问题与嵌入式伊辛问题等价性的核心在于如何从嵌入解中恢复原始解。为此，我们需要能够对嵌入解进行“反嵌入”。这就要求该解具有某种特定结构。通过强制嵌入式伊辛模型中对应于同一个原始变量的所有变量保持**同步**，也就是说，这些变量都取相同的值，我们就得到了一个简单的嵌入式伊辛问题解的判定标准。 [5] 中已引入这一思想，更正式地说

定义 8. 嵌入式伊辛问题 $s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}$ 的一个解称为相对于嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$ 的**同步解**，其中 G 嵌入到 H，对于两个图 G 和 H，若满足

$$s_q = t_v \in \{-1,1\}\ \forall q \in \varphi_v\ \forall v \in V(G).$$

对于这样的 同步解，我们可以轻松提供去嵌入所需的函数

d- 与.....结合

$$\psi(s) = \begin{cases} 1 & \text{if } s_q = s_p\ \forall p,q \in \varphi_v\ \forall v \in V(G), \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

and

$$\tau(s) = s_X$$

对于某个顶点集 $X \subseteq V(H_\varphi)$，对所有 $v \in V(G)$ 都有 $|X \cap \varphi_v| = 1$。顶点集 X 仅作为占位符，因为我们可以简单地从 φ_v 中随机选择一个顶点，以获得其变量的值，因为它们的值都相同。很容易看出，τ 是满射，并且两个函数都可以在多项式时间内计算。

如果嵌入变量的取值不一致，就难以确定应将哪个值赋给相应的原始变量。在这种情况下，通常的做法是对这些未同步解进行后处理。一个常见的例子是**多数投票**启发式方法：将嵌入变量赋值中出现次数最多的值赋给原始变量 [14]。考虑到 D-Wave 机器存在物理上的“不完美”，这种启发式方法或许有助于处理其给出的非最优解。例如，由于单量子比特故障或读出错误，找到的解中只有少数变量相较于最优解发生了翻转。

然而，如果嵌入式伊辛模型定义不当，也就是说，其最优解无法明确对应到某个原始解，那么这些启发式方法就无法提取出最优原始解：将某个嵌入变量的取值改为多数变量所取的值，也会改变一些边对目标值的贡献（其贡献大小由边的权重决定），进而影响相邻顶点。因此，失效嵌入可能会对大量变量的赋值产生全局影响，而这通常无法通过“局部修复”来解决。因此，在这些情况下应用此类方法，通常不会提高找到最优解的概率。另一方面，鉴于可能的分布数量庞大，我们看不出如何构造一种定制的嵌入式伊辛模型，使其在此类“多数解”下能够与原始伊辛问题严格等价。

那么，我们如何确保这种**基于同步的嵌入式伊辛模型**与给定的模型等价，也就是说，它解嵌入后会得到定义 8 中给出的函数？显然，嵌入式伊辛模型的权重和强度取决于原始参数。

如果权重和强度满足

$$W_v = \sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q$$

and

$$S_{vw} = \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq},$$

分别，对于定义 8 中给出的同步解 s，我们有

$$\begin{aligned}
\bar{I}(s) &= \sum_{v \in V(G)} \left(\sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q s_q + \sum_{pq \in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} s_p s_q \right) + \sum_{vw \in E(G)} \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} s_p s_q \\
&= \sum_{v \in V(G)} \left(\sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q t_v + \sum_{pq \in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} t_v t_v \right) + \sum_{vw \in E(G)} \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} t_v t_w \\
&= \sum_{v \in V(G)} t_v \left(\sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q \right) + \sum_{v \in V(G)} \sum_{pq \in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} + \sum_{vw \in E(G)} t_v t_w \left(\sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} \right) \\
&= \sum_{v \in V(G)} W_v t_v + \sum_{vw \in E(G)} S_{vw} t_v t_w + \sum_{pq \in E_\delta} \overline{S}_{pq} \\
&= I(t) + \sum_{pq \in E_\delta} \overline{S}_{pq}.
\end{aligned} \tag{II}$$

这意味着，对于所有此类同步解，我们有 $\bar{I}(s) + c = I(t)$，且

$$c = -\sum_{pq \in E_\varphi} \overline{S}_{pq}.$$

因此，强度 $\overline{S}_{E_\varphi}$ 仅会为这些解的整体目标值引入偏移量。此外，我们确保对于一个最优解

$$t^* \in \underset{t \in \{-1,1\}^{V(G)}}{\arg\min} \; I(t)$$

我们有 $\bar{I}(s^*) + c = I(t^*)$，对于 $s^* = (t^*_{v\,\mathbb{I}\,\varphi_v})_{v \in V(G)}$，因此 s^* 也是所有同步解中的最小值，这意味着

$$s^* \in \arg\min \left\{ \bar{I}(s) : s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}, s_{\varphi_v} \in \{-_{\mathbb{I}}, {}_{\mathbb{I}}\} \forall v \in V \right\}.$$

然而，对于给定的 s^*，我们不一定有

$$s^* \in \underset{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}}{\arg\min} \; \bar{I}(s),$$

这意味着它也将是嵌入式伊辛问题所有解中的最优值。可能存在一些非同步变量赋值，使得目标值更低。当互连边的贡献不足时，就会出现这种情况。

如（II）所示，如果变量 s_q 和 s_p 对于 $pq \in E(H[\varphi_v])$ 同步，则它们的乘积为 1，相应的强度 $\overline{S}_{pq}$ 将加到目标值中。反之，如果变量被赋予不同的值，则乘积为 -1，并减去 $\overline{S}_{pq}$。由于要进行最小化，因此最好将 $\overline{S}_{pq}$ 设为负值。然而，其贡献还必须超过目标函数其余部分中打破同步所带来的收益。

为了确保同步，理论上我们可以将所有 $pq \in E_\varphi$ 对应的 $\overline{S}_{pq} = -\infty$ 设为负无穷大，或者至少设为一个非常大的负值，例如其绝对值超过嵌入式伊辛模型中所有系数绝对值之和。在这种情况下，我们也可以在总和界限内任意选择 $\overline{W}$ 和 $\overline{S}_{E_\delta}$。然而，由于物理限制，退火机的参数精度和取值范围有限，因此实际上无法实现如此大的强度值。那么，我们需要如何选择参数 $\overline{S}_{E_\varphi}$，才能确保同步？它们的选择会如何影响 $\overline{W}$ 和 $\overline{S}_{E_\delta}$ 的可能取值，反之亦然？

3 优化问题提取

对于在 D-Wave 机器上进行计算，用户必须确保编码后的问题确实代表其想要解决的原始问题。本节将提取并简化参数的充分条件：只有满足这些条件，才能保证所得的嵌入式伊辛问题与给定问题具有等价解；其依据是嵌入问题中对应于原始问题某个变量的所有变量均实现同步。通过考察单个原始顶点，并添加一个旨在最小化参数绝对值的目标函数，我们可以提取出一个符合机器物理限制的特定优化问题。

假设给定并固定以下对象：两个图 G 和 H、嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$ of G in H，以及定义 4 中相应的图结构；还有一个伊辛模型 $I_{W,,,S}\colon \{-1,1\}^{V(G)} \to \mathbb{R}$，其权重为 $W \in \mathbb{R}^{V(G)}$、强度为 $S \in \mathbb{R}^{E(G)}_{\neq 0}$。给定这些数据，我们如何找到一个与 $I_{W,S}$等价的嵌入式伊辛模型 $\overline{I}_{\overline{W},\overline{S}}\colon \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \mathbb{R}$，其权重为 $\overline{W} \in \mathbb{R}^{V(H_\varphi)}$、强度为 $\overline{S} \in \mathbb{R}^{E(H_\varphi)}$？请注意，为简洁起见，大多数情况下我们省略伊辛模型的下标。

3.1 单顶点评估

为回答第2.5节末尾提出的问题，我们提取嵌入式伊辛模型中涉及单个原始顶点 $v \in V(G)$ 的部分：

$$\bar{I}(s) = \sum_{w \in V(G)\setminus\{v\}} \left(\sum_{q \in \varphi_w} \overline{W}_q s_q + \sum_{pq \in E(H[\varphi_w])} \overline{S}_{pq} s_p s_q \right) + \sum_{wu \in E(G)\setminus\delta(v)} \sum_{pq \in \delta_{wu}} \overline{S}_{pq} s_p s_q + \underbrace{\sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q s_q + \sum_{pq \in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} s_p s_q + \sum_{w \in N(v)} \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} s_p s_q}_{=:\bar{I}^v(s)}.$$

这样，剩余部分 $\bar{I}(s) - \bar{I}^v(s)$ 只依赖于 $s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v}$。将 $s \in \{-1,1\}^{\varphi_v \cup N(\varphi_v)}$ 替换为 $(r,s) \in \{-1,1\}^{\varphi_v} \times \{-1,1\}^{N(\varphi_v)}$，代入 $\bar{I}^v(s)$ 后，我们得到

$$\bar{I}^v(r,s) := \sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q r_q + \sum_{pq \in E(H[\varphi_v])} \overline{S}_{pq} r_p r_q + \sum_{w \in N(v)} \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} r_p s_q$$

这样便能清楚地指出不同的影响部分。对应于顶点 v 嵌入的所有变量，即 r-变量，现在只出现在 $\bar{I}^v$ 中，而 s-变量则构成与剩余部分的连接，因此同时出现在 $\bar{I} - \bar{I}^v$ 和 $\bar{I}^v$ 中。

接下来，我们希望不受「外部」影响地强制实现 r 的同步，这意味着对任意 s 均成立。由于伊辛模型的最小化，这意味着部分伊辛问题的最小值应始终为 $\mathbb{I}$ 或 $-\mathbb{I}$，更形式化地说

$$\operatorname*{arg\,min}_{r \in \{-1,1\}^{\varphi_v}} \bar{I}^v(r,s) \subseteq \{-\mathbb{I}, \mathbb{I}\} \quad \forall s \in \{-1,1\}^{N(\varphi_v)}.$$

换句话说，我们有

$$\min_{r \in \{-1,1\}^{\varphi_v}} \bar{I}^v(r,s) = \min\left\{\bar{I}^v(-\mathbb{I}, s), \bar{I}^v(\mathbb{I}, s)\right\}$$

但其中

$$\bar{I}^v(r,s) > \min\left\{\bar{I}^v(-\mathbb{I}, s), \bar{I}^v(\mathbb{I}, s)\right\} \quad \forall s \in \{-1,1\}^{N(\varphi_v)}\ \forall r \in \{-1,1\}^{\varphi_v} \setminus \{-\mathbb{I}, \mathbb{I}\}.$$

将这些条件应用于所有顶点 $v \in V(G)$，是否能确保嵌入问题与原问题可证明地等价？我们确实可以证明这些条件的充分性：

引理 9。对于

$$\bar{I}^v(r,s) > \min\left\{\bar{I}^v(-\mathbb{I}, s), \bar{I}^v(\mathbb{I}, s)\right\} \quad \forall s \in \{-1,1\}^{N(\varphi_v)}\ \forall r \in \{-1,1\}^{\varphi_v} \setminus \{-\mathbb{I}, \mathbb{I}\}$$

对所有 $v \in V(G)$，我们对所有

$$s^* \in \operatorname*{arg\,min}_{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}} \bar{I}(s)$$

即 $s^* = \left(t^*_{v\,\mathbb{I}\,\varphi_v}\right)_{v \in V(G)}$，其中 $t^* \in \{-1,1\}^V$。

证明。假设存在

$$s^* \in \operatorname*{arg\,min}_{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}} \bar{I}(s)$$

对于某个顶点 $v \in V(G)$，有 $s^*_{\varphi_v} \notin \{-_{\mathbb{I}}, {}_{\mathbb{I}}\}$。于是我们得到

$$\begin{aligned}\bar{I}(s^*) &= \bar{I}^v\left(s^*_{\varphi_v}, s^*_{N(\varphi_v)}\right) + \bar{I}^{V(G)\setminus\{v\}}\left(s^*_{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v}\right) \\ &> \min\left\{\bar{I}^v\left(-_{\mathbb{I}}, s^*_{N(\varphi_v)}\right), \bar{I}^v\left({}_{\mathbb{I}}, s^*_{N(\varphi_v)}\right)\right\} + \bar{I}^{V(G)\setminus\{v\}}\left(s^*_{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v}\right)\end{aligned}$$

根据给定条件，我们还可以进一步推导出

$$\begin{aligned}\bar{I}(s^*) &= \bar{I}^v\left(r^*_{\mathbb{I}}, s^*_{N(\varphi_v)}\right) + \bar{I}^{V(G)\setminus\{v\}}\left(s^*_{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v}\right) \\ &= \bar{I}\left(\tilde{s}^*\right)\end{aligned}$$

对于 $\tilde{s} \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}$，其中 $\tilde{s}_{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v} = s^*_{V(H_\varphi)\setminus\varphi_v}$，以及 $\tilde{s}_{\varphi_v} = r^*_{\mathbb{I}}$ 对于

$$r^* = \begin{cases} 1 & \text{if } \bar{I}^v\left(-_{\mathbb{I}}, s^*_{N(\varphi_v)}\right) \geq \bar{I}^v\left({}_{\mathbb{I}}, s^*_{N(\varphi_v)}\right), \\ -1 & \text{otherwise.}\end{cases}$$

这与 s^* 为最优解相矛盾。 □

有了这一结果，我们现在可以明确地表述对嵌入式伊辛模型的要求：

定理 *10.* 对于两个图 G 和 H、一个将 G 嵌入到 H 中的嵌入 $\varphi\colon V(G) \to 2^{V(H)}$，以及一个权重为 $W \in \mathbb{R}^{V(G)}$、强度为 $S \in \mathbb{R}^{E(G)}$ 的伊辛模型 $I_{W,S}\colon \{-1,1\}^{V(G)} \to \mathbb{R}$，若伊辛模型 $\bar{I}_{\overline{W},\overline{S}}\colon \{-1,1\}^{V(H_\varphi)} \to \mathbb{R}$ 的权重为 $\overline{W} \in \mathbb{R}^{V(H_\varphi)}$、强度为 $\overline{S} \in \mathbb{R}^{E(H_\varphi)}$，则当满足以下条件时，它与 $I_{W,S}$ 构成等价嵌入式伊辛模型

$$\begin{aligned}
W_v &= \sum_{q \in \varphi_v} \overline{W}_q && \forall v \in V(G), \\
S_{vw} &= \sum_{pq \in \delta_{vw}} \overline{S}_{pq} && \forall vw \in E(G), \\
\bar{I}^v_{\overline{W},\overline{S}}(r,s) &> \min\left\{\bar{I}^v_{\overline{W},\overline{S}}(-_{\mathbb{I}}, s), \bar{I}^v_{\overline{W},\overline{S}}({}_{\mathbb{I}}, s)\right\} && \forall s \in \{-1,1\}^{N(\varphi_v)} \\
& && \forall r \in \{-1,1\}^{\varphi_v} \setminus \{-_{\mathbb{I}}, {}_{\mathbb{I}}\} \\
& && \forall v \in V(G).
\end{aligned}$$

证明。根据本节开头的推论和引理 9，最优性显而易见。此外，根据一个最优解

$$s^* \in \operatorname*{arg\,min}_{s \in \{-1,1\}^{V(H_\varphi)}} \bar{I}(s),$$

由于强制同步，我们可以轻松地获得原始伊辛问题的一个解，其中 $t^*_v = s^*_q$ 对任意选定的 $p \in \varphi_v$，适用于所有 $v \in V$。 □

请注意，该定理仅证明了我们推导出的条件的充分性，并未说明其必要性。在针对特定顶点 v 的约束中，我们假设 s 变量完全任意。如果考虑到其中一些变量并非彼此独立，因为它们属于 v 的某个邻居的嵌入，而该邻居对应的嵌入顶点应当同步，那么我们或许可以得到一组更强的约束。不过，这会引入另一层复杂度，我们将其留待未来研究。

3.2 问题实例定义

接下来，我们只关注一个固定的顶点 $\boldsymbol{v} \in V(G)$。根据嵌入式伊辛模型 $\bar{I}^v$ 的相应部分：$\{-1,1\}^{\varphi_v} \times \{-1,1\}^{N(\varphi_v)} \to \mathbb{R}$ 以及涉及 v 的权重和强度约束，我们推导出一个特定的优化问题。求解该问题即可获得相应的参数值，从而确保 φ_v 中的嵌入顶点能够表示原始顶点 v。

输入

这部 分处理嵌入图 $\bar{I}^v$ 的**嵌入子图结构** $\mathbf{e}$

$$H\left[\varphi_v \cup N(\varphi_v)\right] = (\varphi_v \cup N(\varphi_v), E(H[\varphi_v]) \cup \delta(\varphi_v) \cup E(H[N(\varphi_v)])),$$

其中我们有

- 连通内部图 $H[\varphi_v] =: \left(\overline{V}, \overline{E}\right)$，顶点为 $\overline{\boldsymbol{V}} := \varphi_v$，边为 $\overline{\boldsymbol{E}} := E(H[\varphi_v])$
- 外部邻居 $\overline{\boldsymbol{N}} := N(\varphi_v) \subseteq \bigcup\{p \in \varphi_w : \ w \in N(v)\}$,
- 连接到外部邻居的边集 $\overline{\boldsymbol{D}} := \delta(\varphi_v)$ 以及
- 外部邻居之间的边 $E(H[N(\varphi_v)])$。

图 2 给出了一个示例。请注意，最后一个点的外部邻居之间的边对应的二次项不包含与 $\overline{V}$ 中顶点相对应的变量。因此，在 $\bar{I}^v$ 的定义中不考虑这些边。尽管如此，我们仍会在下一节说明为什么可以省略这些边。

不过，除了约束之外

$$S_{vw} = \sum_{pq \in \delta_{vw}} \bar{S}_{pq} \qquad \forall w \in N(v)$$

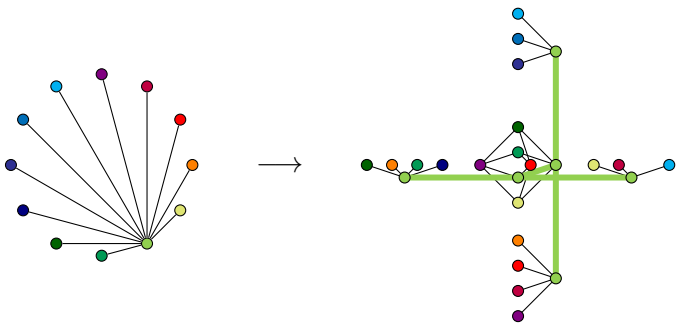

图 2：从图1的破损的 Chimera 图中的完全图嵌入提取的示例：单个顶点及其所有外部邻居的嵌入子图结构

如第2.5节所述，我们可以自由选择所有 $pq \in \overline{D}$ 对应的外边强度值 $\overline{S}_{pq}$，这为整体问题增添了另一层复杂度。选择这些值不仅涉及被评估顶点 v，还涉及其在 G 中的邻居。我们将这一额外层面留待未来研究，并在下文假设 $\overline{S}_{pq}$ 已提前有效选定，因此视为给定且固定。尽管如此，我们会在下一节讨论有助于简化问题的可能选择，并指出我们的方法在任何情况下都适用。

为了区分具有给定强度的外边和强度待求的内边，我们将它们分别重新记为 $\boldsymbol{\alpha} := \overline{S}_{\overline{D}} \in \mathbb{R}^{\overline{D}}$ and $\boldsymbol{\beta} := -\overline{S}_{\overline{E}} \in \mathbb{R}^{\overline{E}}$。注意，定义 β 时提取了负号。为简化记号，我们也将变量权重记为 $\boldsymbol{\omega}$: $= \overline{W}_{\varphi_v} \in \mathbb{R}^{\overline{V}}$。采用这些记号并结合上一节的简化，对于 $r \in \{-1,1\}^{\overline{V}}$and $s \in \{-1,1\}^{\overline{N}}$，我们有

$$\begin{aligned}\bar{I}^v(r,s) &= \sum_{q\in\overline{V}} \overline{W}_q r_q + \sum_{pq\in\overline{E}} \overline{S}_{pq} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \overline{S}_{qn} r_q s_n \\ &= \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q r_q - \sum_{pq\in\overline{E}} \beta_{pq} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \alpha_{qn} r_q s_n \\ &=: \boldsymbol{I^{\alpha}_{\omega,\beta}(r,s)},\end{aligned}$$

伊辛模型 $I^{\alpha}_{\omega,\beta}\colon \{-1,1\}^{\overline{V}} \times \{-1,1\}^{\overline{N}} \to \mathbb{R}$，为简便起见，我们省略上划线和上标 v。总而言之，假设给定

- 外边上的强度 $\alpha \in \mathbb{R}^{\overline{D}}$ and
- 总权重 $\boldsymbol{\lambda}\coloneqq W_v \in \mathbb{R}$

并寻找

- 权重 $\omega \in \mathbb{R}^{\overline{V}}$ and
- 内边上的强度 $\beta \in \mathbb{R}^{\overline{E}}$。

请注意，对于嵌入图中没有外边与之相连，或与之相连的所有外边强度均为零的顶点，我们可以将其“剪除”，这意味着这些顶点不受“外部影响”。因此，我们假设始终至少存在一条强度非零的外边，即，对于 $H[\varphi_v]$的所有叶节点 ℓ，均有： $\{n \in \overline{N}\colon\ \ell n \in \overline{D}, \alpha_{\ell n} \neq 0\} \neq \emptyset$。

输出与目标

β_{pq}取值越大，由于 $I^{\alpha}_{\omega,\beta}$ 中的负号，顶点 p和 q 之间的耦合就越强。正如第 2.2 节所述，由于机器限制，我们不能简单地将这些强度设为远大于其余参数的值。文献中提到，耦合强度对成功概率起决定性作用，但通常也会同时达到最大绝对系数 $C_{\max}$。因此，问题是：这些强度可以设得多小，同时仍能实现等价嵌入式伊辛模型？这意味着，按照当前实践，第一步就是简单地最小化 $\|\beta\|_\infty$。

然而，仅通过最小化强度，得到的相应适当权重分配可能会在某些顶点处超过相应的界限。因此，在假设外边上的强度固定的情况下，更有意义的目标是最小化伊辛模型观测部分其余所有参数的最大绝对值 $\max\{\|\omega\|_\infty, \|\beta\|_\infty\}$。

此外，排除可能存在的额外内边后， $H[\varphi_v]$ 可以简化为一棵树。我们将在后文利用这一事实，因为许多问题在树上要容易得多。不过，在最初的几个步骤中，我们将 $H[\varphi_v]$ 视为任意图。

约束

根据上一节，我们已经可以推导出关于所引入参数 ω 和 β 的以下约束：权重之和应等于总权重，即

$$\lambda = \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q =: \boldsymbol{\omega(\overline{V})}$$

此外，根据引理 9 的条件，我们需要

$$I^{\alpha}_{\omega,\beta}(r,s) > \min\left\{I^{\alpha}_{\omega,\beta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\alpha}_{\omega,\beta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} \quad \forall s\in\{-1,1\}^{\overline{N}}\ \forall r\in\{-1,1\}^{\overline{V}}\setminus\{-_{\mathbb{I}},{}_{\mathbb{I}}\}, \tag{III}$$

以确保最终完整的嵌入问题能够被证明与原问题等价。

请注意，后一个条件包含数量呈指数级增长的约束，更确切地说，有 $2^{|\overline{N}|}\left(2^{|\overline{V}|}-2\right)$ 个。尽管这些都是线性不等式，但因此无法通过直接方式在多项式时间内求解整个优化问题。因此，实际上它只能用于较小的嵌入子图实例 $H[\varphi_v]$ 。

通过引入一个**间隙**值 $\boldsymbol{\gamma}\in\mathbb{R}_{>0}$，我们可以进一步控制无效变量赋值与有效赋值之间的“距离”有多远，这里的距离指它们目标值之间的差距。对于 D-Wave 机器的用户而言，在尝试提高找到最优解的成功概率时，这个值可能会变得很重要。借此，我们还可以将序关系放宽为大于或等于：

$$I^{\alpha}_{\omega,\beta}(r,s) \geq \min\left\{I^{\alpha}_{\omega,\beta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\alpha}_{\omega,\beta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} + \gamma \quad \forall s\in\{-1,1\}^{\overline{N}}\ \forall r\in\{-1,1\}^{\overline{V}}\setminus\{-_{\mathbb{I}},{}_{\mathbb{I}}\}.$$

下文中，我们假设该值已作为输入给定且固定。未来研究中，我们或许还会探讨在间隙与强度之间进行权衡的不同方法。不过，这不属于本文的研究范围。

简而言之

根据前面的记号和重新表述，我们现在可以总结这个问题。虽然在 [17]中，问题被拆分为两个具有不同目标函数的问题，但这与本文的困难性结果无关。因此，我们着重研究完整的问题，其

带间隔参数设置问题．给定嵌入子图结构（$\overline{V}\cup\overline{N},\overline{E}\cup\overline{D}$）、$\alpha\in\mathbb{R}^{\overline{D}}$、 $\lambda\in\mathbb{R}$ 和 $\gamma\in\mathbb{R}_{>0}$，求解 ω 和 β

$$\begin{aligned}
&\min\ \max\left\{\|\omega\|_\infty, \|\beta\|_\infty\right\}\\
&\text{s.t. } \omega\in\mathbb{R}^{\overline{V}},\ \beta\in\mathbb{R}^{\overline{E}},\\
&\quad \omega(\overline{V}) = \lambda,\\
&\quad I^{\alpha}_{\omega,\beta}(r,s) \geq \min\left\{I^{\alpha}_{\omega,\beta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\alpha}_{\omega,\beta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} + \gamma \qquad \forall s\in\{-1,1\}^{\overline{N}}\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \forall r\in\{-1,1\}^{\overline{V}}\setminus\{-_{\mathbb{I}},{}_{\mathbb{I}}\}.
\end{aligned}$$

3.3 简化

由于伊辛模型的一些性质，上一节定义的实例可以简化。我们可以应用以下几个步骤，下面将对此进行讨论。

共同强度

β变量仅会为同步变量赋值引入一个偏移量。由于该偏移量的总大小无关紧要，我们可以选择将所有强度设为相同的最大值。因此，根据 $\vartheta := \|\beta\|_\infty$，我们可以对所有 $pq \in \overline{E}$ 设定 β_{pq} 为 ϑ，从而得到

$$I^\alpha_{\omega,\vartheta}(r,s) = \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq\in\overline{E}} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \alpha_{qn} r_q s_n. \tag{IV}$$

描述其与原始伊辛模型之间差异的常数 c现在仅为 $\vartheta|\overline{E}|$。
这也使问题表述能够进一步简化：无需将 $\max\left\{\|\omega\|_\infty, \vartheta\right\}$ 作为待最小化的目标函数，只需通过引入附加约束 $\vartheta \geq \|\omega\|_\infty$，将其简化为 ϑ 即可。这意味着最小耦合强度也可作为我们所赋权重的上界。

由对称性导致的非负输入参数

此外，我们可以利用伊辛模型定义在 $\{-1,1\}$ 中的变量上的对称性。通过将 s 替换为 $\bar{s} = -s$，我们可以改变内部耦合边上强度的符号：

$$\begin{aligned} I^\alpha_{\omega,\vartheta}(r,s) &= \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq\in\overline{E}} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \alpha_{qn} r_q s_n \\ &= \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq\in\overline{E}} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} (-\alpha_{qn}) r_q \bar{s}_n \\ &= I^{-\alpha}_{\omega,\vartheta}(r,\bar{s}). \end{aligned}$$

我们可以看到，(III) 中 s-变量的不同赋值涵盖了强度 α 的所有可能符号组合。因此，在以下计算中，我们可以将 α 限制为 $\mathbb{R}^{\overline{D}}_{\geq 0}$。
此外，通过将 (r,s) 替换为 $(\bar{r},\bar{s})$，我们可以观察到 ω 的一种对称性：有

$$\begin{aligned} I^\alpha_{\omega,\vartheta}(r,s) &= \sum_{q\in\overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq\in\overline{E}} r_p r_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \alpha_{qn} r_q s_n \\ &= \sum_{q\in\overline{V}} (-\omega_q) \bar{r}_q - \vartheta \sum_{pq\in\overline{E}} \bar{r}_p \bar{r}_q + \sum_{q\in\overline{V}} \sum_{qn\in\overline{D}} \alpha_{qn} \bar{r}_q \bar{s}_n \\ &= I^\alpha_{-\omega,\vartheta}(\bar{r},\bar{s}) \end{aligned}$$

with

$$\sum_{q\in\overline{V}} (-\omega_q) = -\lambda.$$

这意味着我们可以类似地将总权重限制为 $\lambda \in \mathbb{R}_{\geq 0}$。

独立外邻居

根据嵌入定义，只需一条边连接不同顶点的嵌入即可。在实际应用中，由于 Chimera 的对称结构，对于至少几对原始顶点 vw，我们通常会有 $|\delta_{vw}| > 1$ 。这也可以从图 2 中看出。这里，我们讨论一些选项，以及后续工作所依据的假设。

如果两个顶点的嵌入之间存在多条边，一种做法是选定其中一条边 $\bar{e} \in \delta_{vw}$ ，并“忽略”其余边。这意味着，对于嵌入式伊辛模型，我们可以设定

$$\begin{aligned} \alpha_{\bar{e}} = \overline{S}_{\bar{e}} &:= S_{vw}, \\ \alpha_e = \overline{S}_e &:= 0 \qquad \forall e \in \delta_{vw} \setminus \{\bar{e}\} \end{aligned}$$

并且之后只处理 $\delta_{vw} = \{\bar{e}\}$。这会从两个方面影响原有的图结构：

1. $\overline{V}$ 中任意两个顶点都没有共同的外邻居，这意味着我们有 $|\{q : qn \in \delta(\varphi_v)\}| = 1$（对所有 $n \in \overline{N}$ 均成立），因此 $\overline{D} = \delta(\varphi_v) \cong \overline{N}$。2. 我们有 $E(H[N(\varphi_v)]) = \emptyset$，这意味着任意两个外邻居之间都没有边相连。

这样一来，我们一方面已经简化了问题，另一方面也确保了所有外邻居彼此独立，因为它们分别属于 v 的不同原始邻居。

然而，另一种可能性也有其优势：按照 [23] with 中的建议，将强度平均分配到所有可用的边上

$$\alpha_{pq} = \overline{S}_{pq} := \frac{S_{vw}}{|\delta_{vw}|} \qquad \forall pq \in \delta_{vw},$$

这样可以尽可能降低系数。这似乎有助于满足机器的参数范围。由于与其他顶点的嵌入相对应的变量也必须同步，因此在这种情况下，某些内部顶点的外邻居彼此并不独立。虽然 Chimera 图中不存在三角形，但其他硬件图（例如 Pegasus 图）中可能存在三角形，这可能导致一些内部顶点共享同一个外邻居。

无论强度如何分配，我们都希望兼顾这两种策略。因此，我们通过拆分可能存在的共享顶点来简化嵌入图结构，并简单地假设所有外部顶点两两独立，就像它们分别属于原始顶点的不同邻居一样。因此，在本文接下来的讨论中，我们假设给定了 $\overline{D} \cong \overline{N}$ 和 $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{\overline{D}}_{\geq 0} = \mathbb{R}^{\overline{N}}_{\geq 0}$ ，且它们是固定的强度，分别对应上文中的第 1 点和第 2 点。

这些假设会在下一节中发挥作用。我们将在该节估计“外部影响”的最坏情况，即外邻居上的边强度乘以 s-变量所产生的贡献，以进一步简化 $\bar{I}^v$。如果存在两个变量 s_n 和 s_m，分别对应于同一嵌入 φ_w 中属于某个原始邻接顶点 w的两个外邻居 n、$m \in \overline{N}$ ，那么在整体问题的同步解中，这两个变量会取相同的值。然而，由于我们假设它们可以任意且独立地选取，因此最坏情况可能被高估。这意味着我们推导出的界限仍然成立，但在这种情况下，得到的强度可能大于实际所需。此外，同步解与非同步解之间的实际最小间隙可能大于用户所设定的

值。这是另一个只能证明我们条件充分性、而无法证明其必要性的地方。

单个外邻居

最后，我们进一步约化该问题，使得给定的图实例中，每个顶点 $q \in \overline{V}$ 都只有一个外邻居。这意味着我们有 $\overline{N} \cong \overline{V}$。如果情况并非如此，也就是说，某个内顶点至少有两个外邻居，那么下面的引理表明，只需对这些外邻居上的变量进行同步，就足以涵盖外边上的强度符号不同的情况。

引理 11. 对于 $_{,\vartheta}:\{-1,1\}^{\overline{V}} \times \{-1,1\}^{\overline{N}}$，如 (IV) 中所给，若 $\alpha \in R^{\overline{D}}_{\geq 0}$，间隔值为$\gamma \in \mathbb{R}_{\geq 0}$，顶点 $q \in \overline{V}$及其邻居 $n, m \in \overline{N}$满足 $qn, qm \in \overline{D}$，则有

$$\begin{aligned} &I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(r,s) \geq \min\left\{I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} + \gamma \quad \textit{for } s_n = s_m \in \{-1,1\} \\ \Rightarrow\ &I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(r,s) \geq \min\left\{I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} + \gamma \quad \textit{for } s_n, s_m \in \{-1,1\} \end{aligned}$$

for all $r \in \{-1,1\}^{\overline{V}}$ *and all* $s_{\overline{N}\setminus\{m,n\}} \in \{-1,1\}^{\overline{N}\setminus\{m,n\}}$.

证明。 在下面的证明中，为简洁起见，我们省略 I 的下标和上标。令

$$\begin{aligned} I(r,s) = \alpha_{qn}s_n r_q + \alpha_{qm}s_m r_q - \vartheta|\overline{E}| + \gamma + r_q\underbrace{\left(\omega_q - \vartheta\sum_{pq\in\overline{E}} r_p + \sum_{\substack{q\ell\in\overline{D}\\ \ell\neq n,m}} \alpha_{q\ell}s_\ell\right)}_{=:A(r,s)} \\ \underbrace{+\,\vartheta|\overline{E}| - \gamma + \sum_{p\in\overline{V}\setminus\{q\}} \omega_p r_p - \vartheta\sum_{\substack{pu\in\overline{E}\\ p,u\neq q}} r_p r_u + \sum_{p\in\overline{V}\setminus\{q\}}\sum_{p\ell\in\overline{D}} \alpha_{p\ell}s_\ell r_p}_{=:B(r,s)} \end{aligned}$$

and

$$I(\pm_{\mathbb{I}},s) = \pm\left(\alpha_{qn}s_n + \alpha_{qm}s_m + \underbrace{\sum_{\substack{p\ell\in\overline{D}\\ \ell\neq n,m}} \alpha_{p\ell}s_\ell + \lambda}_{=:C(r,s)}\right) - \vartheta|\overline{E}| + \gamma,$$

函数 A、B 和 C 与 r_q、s_n 和 s_m 相互独立。根据引理的条件，我们知道

$$\begin{aligned} &\alpha_{qn}s_n r_q + \alpha_{qm}s_m r_q + A(r,s)r_q + B(r,s) \geq -\left|\alpha_{qn}s_n + \alpha_{qm}s_m + C(r,s)\right| \\ &\qquad \forall s_n = s_m \in \{-1,1\}\ \forall r_q \in \{-1,1\}\ \forall s \in \{-1,1\}^{\overline{N}\setminus\{n,m\}}\ \forall r \in \{-1,1\}^{\overline{V}\setminus\{q\}} \setminus \{-_{\mathbb{I}}, _{\mathbb{I}}\} \end{aligned}$$

还需证明由此可以推出

$$\begin{aligned} &\alpha_{qn}s_n r_q + \alpha_{qm}s_m r_q + A(r,s)r_q + B(r,s) \geq -\left|\alpha_{qn}s_n + \alpha_{qm}s_m + C(r,s)\right| \\ &\qquad \forall s_n \neq s_m \in \{-1,1\}\ \forall r_q \in \{-1,1\}\ \forall s \in \{-1,1\}^{\overline{N}\setminus\{n,m\}}\ \forall r \in \{-1,1\}^{\overline{V}\setminus\{q\}} \setminus \{-_{\mathbb{I}}, _{\mathbb{I}}\}. \end{aligned}$$

更简单地说，这意味着要证明，对于任意固定的 A、B、$C \in \mathbb{R}$ 和 X、$Y \in \mathbb{R}_{\geq 0}$，满足

$$(X+Y)sr + Ar + B \geq -|(X+Y)s + C| \qquad \forall r, s \in \{-1,1\}, \tag{i}$$

由此可得

$$(X-Y)sr + Ar + B \geq -|(X-Y)s + C| \qquad \forall r, s \in \{-1, 1\}. \tag{ii}$$

这可以通过以下两种情况分类来实现。将 $s = -1$ 和 $r = 1$ 代入不等式 (i)，由 X、$Y \geq 0$可得

- for $C \leq X + Y$

$$\begin{aligned} & -X - Y + A + B \geq -|-(X+Y) + C| = -X - Y + C \\ \Leftrightarrow \quad & A + B \geq C \\ \Leftrightarrow \quad & (X-Y)s + A + B \geq (X-Y)s + C \\ & \geq -|(X-Y)s + C| \qquad \forall s \in \{-1, 1\} \end{aligned}$$

- 且对于 $C > X + Y$

$$\begin{aligned} & -X - Y + A + B \geq -|-(X+Y) + C| = X + Y - C \\ \Rightarrow \quad & (X-Y)s + A + B \geq -X - Y + A + B \\ & \geq X + Y - C \\ & \geq -(X-Y)s - C \\ & \geq -|(X-Y)s + C| \qquad \forall s \in \{-1, 1\}. \end{aligned}$$

因此，我们已经证明了当 r $= 1$ 且 s 为任意值时，不等式 (ii) 的推论。将$s = 1$ 和 $r = -1$ 代入不等式 (i)，进而得到

- 对于 $C \geq -X - Y$

$$\begin{aligned} & -X - Y - A + B \geq -|X + Y + C| = -X - Y - C \\ \Leftrightarrow \quad & -A + B \geq -C \\ \Leftrightarrow \quad & -(X-Y)s - A + B > -(X-Y)s - C \\ & \geq -|-(X-Y)s - C| \\ & = -|(X-Y)s + C| \qquad \forall s \in \{-1, 1\} \end{aligned}$$

- 且对于 $C < -X - Y$

$$\begin{aligned} & -X - Y - A + B > -|X + Y + C| = X + Y + C \\ \Rightarrow \quad & -(X-Y)s - A + B \geq -X - Y - A + B \\ & \geq X + Y + C \\ & \geq (X-Y)s + C \\ & \geq -|(X-Y)s + C| \qquad \forall s \in \{-1, 1\}. \end{aligned}$$

这意味着我们也已证明了当 $r = -1$ 且 s 为任意值时，不等式 (ii) 的推论，从而完成了证明。□

满足引理的条件时，我们可以在 $I^{\alpha}_{\omega,\vartheta}(r, s)$ 中将 s_m 的唯一一次出现替换为 s_n。这样， s_n 的系数就变为 $\alpha_{qn} + \alpha_{qm}$，并且通过移除 m，外部邻居的数量减少了 1。我们可以对所有共享同一个内顶点的外部邻居迭代应用此引理。因此，根据该引理，我们可以说，对应于外部邻居的变量的同步

就外部影响而言构成了“最坏情况”。通过将加权 $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{R}^{\overline{V}}_{\geq 0}$ 定义为

$$\boldsymbol{\sigma_q} := \sum_{qn \in \overline{D}} \alpha_{qn} \quad \forall q \in \overline{V},$$

因此，我们可以将伊辛模型归约为

$$\boldsymbol{I^{\sigma}_{\omega,\vartheta}(r,s)} = \sum_{q \in \overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq \in \overline{E}} r_p r_q + \sum_{p \in \overline{V}} \sigma_q r_q s_q,$$

在相应地重新索引了 s 变量后，也就是说 $s \in \{-1,1\}^{\overline{V}}$。因此，以下仅将 $\sigma \in \mathbb{R}^{\overline{V}}_{\geq 0}$ 视为权重分布问题的输入，不再需要外部邻居 $\overline{N}$ 及其与这些邻居相连的边 $\overline{D}$。

图割

经过前述简化后，我们现在可以进一步评估条件

$$I^{\sigma}_{\omega,\vartheta}(r,s) \geq \min\left\{I^{\sigma}_{\omega,\vartheta}(-_{\mathbb{I}},s), I^{\sigma}_{\omega,\vartheta}(_{\mathbb{I}},s)\right\} + \gamma \quad \forall s \in \{-1,1\}^{\overline{V}} \; \forall r \in \{-1,1\}^{\overline{V}} \setminus \{-_{\mathbb{I}},{}_{\mathbb{I}}\}$$

对于固定参数，并使用图割对其进行重新表述。代入 $I^{\sigma}_{\omega,\ \vartheta}$ 的完整表述后，对于所有 $s \in \{-1,1\}^{\overline{V}}$ 以及所有 $r \in \{-1,1\}^{\overline{V}} \setminus \{-_{\mathbb{I}},{}_{\mathbb{I}}\}$，有：

$$\begin{aligned}
&\sum_{q \in \overline{V}} \omega_q r_q - \vartheta \sum_{pq \in \overline{E}} r_p r_q + \sum_{q \in \overline{V}} \sigma_q r_q s_q \\
\geq\ & \min\left\{\sum_{q \in \overline{V}} \omega_q(-1) - \vartheta \sum_{pq \in \overline{E}} (-1)(-1) + \sum_{q \in \overline{V}} \sigma_q s_q(-1), \sum_{q \in \overline{V}} \omega_q - \vartheta \sum_{pq \in \overline{E}} 1 + \sum_{q \in \overline{V}} \sigma_q s_q\right\} + \gamma \\
=\ & \min\left\{-\sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q), \sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q)\right\} - \vartheta|\overline{E}| + \gamma,
\end{aligned}$$

这等价于

$$\begin{aligned}
\vartheta|\overline{E}| - \vartheta \sum_{pq \in \overline{E}} r_p r_q &= \vartheta\left(|\overline{E}| - \sum_{pq \in \overline{E}} r_p r_q\right) \\
&= \vartheta\big(|\overline{E}| - |\{pq \in \overline{E} : r_p = r_q\}| + |\{pq \in \overline{E} : r_p = -r_q\}|\big) \\
&= 2\vartheta|\{pq \in \overline{E} : r_p = -r_q\}| \\
&\geq \min\left\{\sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q), -\sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q)\right\} - \sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q) r_q + \gamma \\
&= \min\left\{\sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q)(1 - r_q), \sum_{q \in \overline{V}} (\sigma_q s_q + \omega_q)(-1 - r_q)\right\} + \gamma \\
&= 2\min\left\{\sum_{\substack{q \in \overline{V} \\ r_q = -1}} (\sigma_q s_q + \omega_q), -\sum_{\substack{q \in \overline{V} \\ r_q = 1}} (\sigma_q s_q + \omega_q)\right\} + \gamma.
\end{aligned}$$

结合所有下界，我们可以进一步推导出更强的条件，对所有 $r \in \{-1,1\}^{\overline{V}} \setminus \{-\mathbb{1}, \mathbb{1}\}$，有：

$$\begin{aligned}\vartheta|\{pq \in \overline{E} : r_p = -r_q\}| &\geq \max_{s\in\{-1,1\}^{\overline{V}}} \min\left\{ \sum_{\substack{q\in\overline{V}\\ r_q=-1}} (\sigma_q s_q + \omega_q), -\sum_{\substack{q\in\overline{V}\\ r_q=1}} (\sigma_q s_q + \omega_q) \right\} + \tfrac{1}{2}\gamma \\ &= \min\left\{ \sum_{\substack{q\in\overline{V}\\ r_q=-1}} (\sigma_q + \omega_q), \sum_{\substack{q\in\overline{V}\\ r_q=1}} (\sigma_q - \omega_q) \right\} + \tfrac{1}{2}\gamma.\end{aligned}$$

容易看出，在前一个关系中，当对所有 $q \in \overline{V}$ 将 s_q 设置为 $-r_q$ 时，最大值可以达到，从而得到最后一个等式。注意，通过这一步，我们已经将约束的数量减少到 $2^{|\overline{V}|} - 2$。

根据 $S = \{q \in \overline{V}$ 的顶点集定义：对于 r-变量的特定赋值，$r_q = -1\}$，以及

$$\boldsymbol{\sigma(S)} := \sum_{q\in S} \sigma_q,$$

我们可以等价地对所有 $\emptyset \neq S \subsetneq \overline{V}$ 表述为：

$$\begin{aligned}\vartheta|\{pq \in \overline{E} : p \in S, q \in \overline{V} \setminus S\}| = \vartheta|\delta(S)| &\geq \min\left\{ \sum_{q\in S} (\sigma_q + \omega_q), \sum_{q\in\overline{V}\setminus S} (\sigma_q - \omega_q) \right\} + \tfrac{1}{2}\gamma \\ &= \min\left\{\sigma(S) + \omega(S), \sigma(\overline{V} \setminus S) - \omega(\overline{V} \setminus S)\right\} + \tfrac{1}{2}\gamma.\end{aligned}$$

注意，空集和完整顶点集被排除在外，因为 r-变量不可能全部取值为 1 或全部取值为 -1。此外，由于根据嵌入定义，图 $H[\varphi_v]$ 是连通的，对于所有非平凡割 S，都有 $|\delta(S)| > 0$。由于 ϑ 是目标函数，我们可以将这些条件重新表述为最优值的下界：

$$\vartheta \geq \frac{\min\{\sigma(S) + \omega(S), \sigma(\overline{V} \setminus S) - \omega(\overline{V} \setminus S)\} + \frac{1}{2}\gamma}{|\delta(S)|} \quad \forall \emptyset \neq S \subsetneq \overline{V}.$$

下文将其称为 **割不等式**。等价地，它们可以合并为一个不等式：

$$\vartheta \geq \max_{\emptyset\neq S\subsetneq\overline{V}} \left\{ \frac{\min\{\sigma(S) + \omega(S), \sigma(\overline{V} \setminus S) - \omega(\overline{V} \setminus S)\} + \frac{1}{2}\gamma}{|\delta(S)|} \right\}.$$

请注意，根据第 2.2 节中基于引理 2 的预处理步骤，对于某些实例，原始顶点的权重会超过其关联边所造成的所有外部影响。无论如何，都可以在嵌入之前预处理与此类顶点对应的变量，方法是根据权重的符号为其赋值。当我们有$\lambda \geq \sigma(\overline{V})$时，就会出现这种情况。因此，以下我们也只考虑满足 $\sigma(\overline{V}) > \lambda$ 的实例。我们将在下一节总结由此得到的问题。

3.4 问题

本节简要总结由间隙参数设定问题推导出的、结合了嵌入式伊辛问题充分条件的问题。此前，我们考虑了一个更复杂的目标函数；现在，该问题已简化为仅需优化 ϑ，同时分配权重 ω。因此，我们有

间隙权重分布问题。给定图 $G=(V,E)$、$\sigma \in \mathbb{R}^V_{\geq 0}$、$\lambda \in \mathbb{R}_{\geq 0}$，其中 $\lambda < \sigma(V)$ 和 $\gamma \in \mathbb{R}_{>0}$，求解 ϑ 和 ω，使其满足

$$
\begin{aligned}
&\min \vartheta \\
&\text{s.t. } \vartheta \in \mathbb{R},\, \omega \in \mathbb{R}^V, \\
&\qquad \vartheta \geq \frac{\min\left\{\sigma(S)+\omega(S), \sigma(V\setminus S)-\omega(V\setminus S)\right\}+\gamma}{|\delta(S)|} \quad \forall \emptyset \neq S \subsetneq V, \\
&\qquad \omega(V) = \lambda, \\
&\qquad \vartheta \geq \|\omega\|_\infty .
\end{aligned}
$$

请注意，为了简化，我们现在改用图 $G=(V,E)$ 的标准记法，作为间隙权重分布问题的输入。不过，图 G并不对应于原始伊辛问题的相互作用图；我们在本文开篇介绍过该图。通过求解上述问题并使用 $G = H[\varphi_v]$，

$$\sigma_q = \sum_{pq \in \delta(\varphi_v)} \left|\overline{S}_{pq}\right| \quad \forall q \in \varphi_v,$$

以及 $\lambda = |W_v|$，我们可以找到嵌入问题中顶点 v 对应的最优强度和权重。因此，要得到完整的嵌入式伊辛问题，我们需要对所有顶点及其对应的子图结构重复进行优化，并将结果合并。

此外，为了简化，我们还在问题中将 $\frac{1}{2}\gamma$ 替换为 γ。这意味着同步解与非同步解之间的实际距离最终为 2γ。此外，请注意限制条件 $\lambda < \sigma(V)$；该条件由引理 2 得出，是用新记法对 (I) 的重新表述。它在下一节中很重要。

仅考虑割约束时，我们可以看出它与图 [12] 的一个性质有关，该性质称为**边扩张**。在我们的情形中，顶点还带有权重 σ，而不仅仅是对顶点数量进行计数。这又与 [21] 中提出的**最小割密度**密切相关。该文作者证明，对于树，只需评估通过每条边进行切割所得到的划分，即可求出最小割密度。因此，如果所考察的图是一棵树，该问题可以在顶点数量的二次时间内求解。尽管我们的问题表述与上述两种问题略有不同，但我们仍能为自己的问题建立类似的结果。

4 分析

由于对于每个集合 S，As $\delta(S)$ 都是常数，因此我们只有线性函数，故有间隙权重分布问题属于线性优化问题（线性规划问题）这一类。尽管我们已经对嵌入式伊辛问题的要求进行了化简和简化，但仍必须考虑外部影响作用于嵌入顶点时所有可能的符号组合。这会为 $H[\varphi_v]$ 的每个非平凡顶点子集产生一个约束。其数量呈指数级增长，因此线性规划问题的规模也呈指数级增长，无法通过直接方法在多项式时间内求解。我们需要更深入地分析这个问题。

4.1 多面体描述

接下来，设图 $\boldsymbol{G=(V,E)}$、强度 $\boldsymbol{\sigma}\in\mathbb{R}^V_{\geq 0}$、总权重 $\boldsymbol{\lambda}\in\mathbb{R}_{\geq 0}$（其中 $\lambda<\sigma(V)$）以及间隙 $\boldsymbol{\gamma}\in\mathbb{R}_{>0}$ 均已给定且固定。对于 $\emptyset\neq S_1\subseteq S_2\subseteq V$，我们看到 σ 和在子集关系的偏序下是单调的，且

$$0\leq\sigma(S_1)\leq\sigma(S_2)\leq\sigma(V)$$

由于 $\sigma\geq\mathbb{O}$。此外，我们有

$$\omega(S)+\omega(V\setminus S)=\omega(V)=\lambda$$

对于任意 $\emptyset\neq S\subseteq V$。取

$$\begin{aligned}\sigma(S)+\omega(S)&\lesseqgtr\sigma(V\setminus S)-\omega(V\setminus S)\\ \Leftrightarrow\qquad\sigma(S)&\lesseqgtr\tfrac{1}{2}\left(\sigma(V)-\lambda\right)\\ \Leftrightarrow\qquad\sigma(V\setminus S)&\gtreqless\tfrac{1}{2}\left(\sigma(V)+\lambda\right)\end{aligned}$$

and

$$\sigma(V)+\lambda\geq\sigma(V)\geq\sigma(V)-\lambda$$

对于 $\lambda\geq 0$，通过求解最小值，我们得到约束

$$\vartheta\geq\begin{cases}\frac{\sigma(S)+\omega(S)+\gamma}{|\delta(S)|} & \text{if } \sigma(S)<\frac{1}{2}\left(\sigma(V)-\lambda\right),\\ \frac{\sigma(V\setminus S)-\omega(V\setminus S)+\gamma}{|\delta(S)|} & \text{otherwise}\end{cases}$$

对于所有 $\emptyset\neq S\subsetneq V$。这可用于以下多面体以及其他有用的定义 s:

定义 12. 令

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\vartheta_{\frac{1}{2}}}&:=\tfrac{1}{2}\left(\sigma(V)-\lambda\right),\\ \boldsymbol{\Theta(S)}&:=\left\{(\vartheta,\omega)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^V:\vartheta|\delta(S)|\geq\min\{\sigma(S)+\omega(S),\sigma(V\setminus S)-\omega(V\setminus S)\}+\gamma\right\},\\ \boldsymbol{\Theta_\lambda}&:=\left\{(\vartheta,\omega)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^V:\omega(V)=\lambda\right\},\\ \boldsymbol{\Theta}&:=\bigcap_{\emptyset\neq S\subsetneq V}\Theta(S)\cap\Theta_\lambda,\\ \boldsymbol{\Phi}&:=\left\{(\vartheta,\omega)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^V:\vartheta\geq\|\omega\|_\infty\right\}.\end{aligned}$$

我们有

$$\boldsymbol{\Theta(S)}:=\begin{cases}\left\{(\vartheta,\omega)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^V:\vartheta|\delta(S)|\geq\sigma(S)+\omega(S)+\gamma\right\} & \text{if } \sigma(S)<\vartheta_{\frac{1}{2}},\\ \left\{(\vartheta,\omega)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^V:\vartheta|\delta(S)|\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}}-\sigma(S)+\omega(S)+\gamma\right\} & \text{otherwise}\end{cases}$$

根据给定的关系，并由于

$$\begin{aligned}\sigma(V\setminus S)-\omega(V\setminus S)&=\sigma(V)-\sigma(S)-\omega(V)+\omega(S)\\ &=\sigma(V)-\lambda-\sigma(S)+\omega(S)\\ &=\tfrac{1}{2}\vartheta_{\frac{1}{2}}-\sigma(S)+\omega(S).\end{aligned}$$

注意，借助 $\lambda<\sigma(V)$，我们总有 $\vartheta_{\frac{1}{2}}>0$。

现在我们可以重新表述这个问题：

推论 13. 该间隙权重分布问题可以写成如下线性规划

$$\min\{\vartheta : (\vartheta, \omega) \in \Theta \cap \Phi\}.$$

根据这些定义，我们很容易看出， Θ 是一个无界的、 $|V|$维多面体，由指数数量的不等式描述。于是，间隙权重分布问题的定义域是 Θ 与锥 Φ的交集；由于 $\vartheta \geq \|\omega\|_\infty$ 等价于下式，因此只需 $2|V|$ 个约束即可定义该交集：

$$\vartheta \geq |\omega_v| \quad \forall v \in V,$$

或者，也可以不使用绝对值，写成：

$$\begin{aligned} \vartheta &\geq \omega_v \quad \forall v \in V, \\ \vartheta &\geq -\omega_v \quad \forall v \in V. \end{aligned}$$

4.2 连通顶点集

请注意，我们将考察范围限制在 $0 \leq \lambda < \sigma(V)$，以聚焦于根据引理 2 无法通过预处理处理的情形。这意味着 $\vartheta_{\frac{1}{2}} > 0$，而这确实是构造所必需的。我们还假设 $\boldsymbol{G}$ 和$\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{R}^V_{\geq 0}$ 已再次给定并固定。
为了简化定义 12 中 Θ 的描述，我们需要减少不等式的数量。根据以下结果，我们确实可以证明，由于 σ和的单调性，描述 Θ的一些不等式是冗余的：

理论 em 14. 对于 $\mathfrak{C} := \{\emptyset \neq S \subsetneq V\colon\ G[S]$ 连通且 $G[V \setminus S]$ 连通$\}$，我们有

$$\Theta = \bigcap_{S \in \mathfrak{C}} \Theta(S) \cap \Theta_\lambda.$$

证明。 由于约束数量减少，左侧包含于右侧。下面，我们通过证明与 $2^V \setminus \{\emptyset, V\}$ 中未包含于 $\mathfrak{C}$ 的集合相关联的约束具有冗余性，来证明反向包含关系。为此，我们引入顶点集 $\emptyset \neq S \subsetneq V$的类型 $t(S)$，表示相应诱导子图 $G[S]$的连通分支数量。注意，每个非空顶点集的类型至少为 1，且仅当 $G[S]$ 连通时，我们才有 $t(S) = 1$ 。由于等式 $\omega(V) = \lambda$ 对下面的推导很重要，我们还在超平面 Θ_λ 上进行研究，但为简洁起见不明确提及这一点。

第一 步是证明将范围限制在诱导连通 d
子图 ，这意味着

$$\bigcap_{\emptyset \neq S \subsetneq V} \Theta(S) \supseteq \bigcap_{S \in \mathfrak{C}'} \Theta(S)$$

满足 $\mathfrak{C}' = \{\emptyset \neq S \subsetneq V\colon\ G[S]$ 连通$\} = \{\emptyset \neq S \subsetneq V\colon\ t(S) = 1\}$。假设这不成立。令 $S^* \in 2^V \setminus (\mathfrak{C}' \cup \{\emptyset, V\}) = \{\emptyset \neq S \subsetneq V\colon\ t(S) > 1\}$ 为一个顶点集，满足

$$\Theta(S^*) \not\supseteq \bigcap_{S \in \mathfrak{C}'} \Theta(S) \tag{i}$$

具有极小类型。于是存在两个非空顶点集 S_1 和 S_2，满足 $S^* = S_1 \cup S_2$和 $\delta(S_1, S_2) = \delta(S_1) \cap \delta(S_2) = \emptyset$。由于 $t(S_1) + t(S_2) = t(S^*)$，且 S^* 具有极小性，我们有 $t(S_1) = t(S_2) = 1$，因此存在 S_1, $S_2 \in \mathfrak{C}'$，满足

$$\Theta(S_1) \cap \Theta(S_2) \supseteq \bigcap_{S \in \mathfrak{C}'} \Theta(S). \tag{ii}$$

接下来，我们证明，定义 $\Theta(S^*)$ 的不等式可通过求和，从定义 $\Theta(S_1)$ 和 $\Theta(S_2)$ 的不等式推导得出。因为

$$\{x \in X : f(x) + g(x) \leq 0\} \supseteq \{x \in X : f(x) \leq 0, g(x) \leq 0\}$$

对于任意定义域 X 和函数 $f, g\colon\ X \to \mathbb{R}$，该式均成立，因此可得

$$\Theta(S^*) \supseteq \Theta(S_1) \cap \Theta(S_2),$$

结合 (ii)，这与 (i) 矛盾。由 σ 和 ω 的可加性可知，

$$\begin{aligned}\sigma(S^*) &= \sigma(S_1) + \sigma(S_2),\\ \omega(S^*) &= \omega(S_1) + \omega(S_2)\end{aligned}$$

and

$$|\delta(S^*)| = |\delta(V \setminus S^*)| = |\delta(S_1)| + |\delta(S_2)| - 2|\delta(S_1, S_2)| = |\delta(S_1)| + |\delta(S_2)|.$$

关于 S^*，我们分两种情况讨论:

A) $\sigma(S^*) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$: 根据 σ 的单调性，我们还有 $\sigma(S_1)$ $\sigma(S_2) \leq \sigma(S^*) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$。由定义 $\Theta(S_i)$ 的不等式，

$$\vartheta|\delta(S_i)| \geq \sigma(S_i) + \omega(S_i) + \gamma$$

对于 $i = 1, 2$，可得

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(S_1)| + \vartheta|\delta(S_2)|\\ &\geq \sigma(S_1) + \omega(S_1) + \sigma(S_2) + \omega(S_2) + 2\gamma\\ &= \sigma(S^*) + \omega(S^*) + 2\gamma\\ &\geq \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\end{aligned}$$

通过 $\gamma > 0$，得到定义 $\Theta(S^*)$ 的约束。

B) $\sigma(S^*) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$: 在这种情况下，我们无法推导出关于 $\sigma(S_1)$ 和 $\sigma(S_2)$ 的条件。因此，有三种可能性，它们采用与情况 A) 相同的构造:

a) $\sigma(S_1), \sigma(S_2) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$: From

$$\vartheta|\delta(S_i)| \geq \sigma(S_i) + \omega(S_i) + \gamma$$

对于 $i = 1$，取 2，可得

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(S_1)| + \vartheta|\delta(S_2)|\\ &\geq \sigma(S_1) + \omega(S_1) + \sigma(S_2) + \omega(S_2) + 2\gamma\\ &\geq \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\end{aligned}$$

类似于 A)，并进一步通过“添加 0”

$$\begin{aligned}&= 2\sigma(S^*) - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma.\end{aligned}$$

因此，在这种情况下，我们得到了 $\Theta(S^*)$ 的不等式。

b) $\sigma(S_1)\ \sigma(S_2)\ \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$：由

$$\vartheta|\delta(S_i)| \geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S_i) + \omega(S_i) + \gamma$$

对于 $i = 1$、2 和 $\vartheta_{\frac{1}{2}} > 0$ 对于 $\lambda < \sigma(V)$，我们得到

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(S_1)| + \vartheta|\delta(S_2)| \\ &\geq 4\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S_1) + \omega(S_1) - \sigma(S_2) + \omega(S_2) + 2\gamma \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma.\end{aligned}$$

c) $\sigma(S_1) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 和 $\sigma(S_2)\ \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 不失一般性：从

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S_1)| &\geq \sigma(S_1) + \omega(S_1) + \gamma, \\ \vartheta|\delta(S_2)| &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S_2) + \omega(S_2) + \gamma,\end{aligned}$$

我们得到

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(S_1)| + \vartheta|\delta(S_2)| \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} + \sigma(S_1) + \omega(S_1) - \sigma(S_2) + \omega(S_2) + 2\gamma \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S_1) + \omega(S_1) - \sigma(S_2) + \omega(S_2) + 2\gamma \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\end{aligned}$$

由于 $\sigma(S_1) \geq 0 \geq -\sigma(S_1)$。

因此，如果 S^* 不诱导连通子图，则与 S^* 相关联的约束是冗余的。

接下来我们将证明，其补集也不诱导连通子图的顶点集同样是不必要的，因此

$$\bigcap_{S\in\mathfrak{C}'} \Theta(S) \supseteq \bigcap_{S\in\mathfrak{C}} \Theta(S).$$

注意，按照 $\mathfrak{C}'$ 的前一个定义，我们有 $\mathfrak{C} = \{S \in \mathfrak{C}' :\ t(V \setminus S)\ = 1\}$。我们可以推导出与之前类似的矛盾，因此假设上述关系不成立。令$S^* \in \mathfrak{C}' \setminus \mathfrak{C} = \{\emptyset \neq S \subsetneq V :\ t(S)\ = 1, t(V \setminus S)\ > 1\}$ 为一个顶点集，其中

$$\Theta(S^*) \not\supseteq \bigcap_{S\in\mathfrak{C}} \Theta(S), \tag{iii}$$

其补集 $V \setminus S^*$ 具有极小类型。类似于第一部分，我们可以推导出$G[V\setminus S^*]$ 必须仅由 $\mathfrak{C}$ 中由顶点集诱导的两个连通分支组成。然而，我们还需要一个小的补充步骤：令

$$V \setminus S^* = \dot{\bigcup_{i=1}^{k}} X_i,$$

令 $t(X_i)\ = 1$ 对所有 $i = 1, ..., k$ 以及 $|\delta(X_i, X_j)| = \emptyset$ 对所有 $i \neq j \in \{1, ..., k\}$，构成$V \setminus S^*$的划分，划分为诱导出 $G[V \setminus S^*]$ 在 $t(V \setminus S^*)\ = k > 1$ 中的连通分支的顶点集。由于图 G 是连通的，以上两个顶点集的补集（不失一般性地设为 X_1和 X_2）诱导出的图 $G[V \setminus (X_1 \cup X_2)]$，也必须是连通的。因此我们有$t(V \setminus (X_1 \cup X_2))\ = 2$；若有 $k > 2$，这就会与 S^* 的选取相矛盾。这意味着我们有 $V \setminus S^* = X_1 \cup X_2$，其中 $X_1, X_2 \in \mathfrak{C}$，对称地也有 $V \setminus X_1, V \setminus X_2 \in \mathfrak{C}$。这在图3中有所说明。

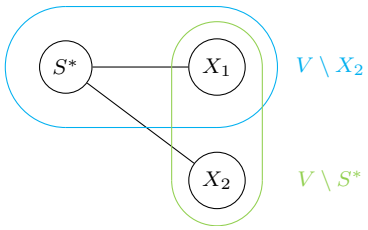

图3：非连通 $G[V \setminus S^*]$ 的连通分支

该构造遵循与第一部分相同的结构，仅略有不同，因为我们在以下关系中使用补集：

$$\Theta(S^*) \supseteq \Theta(V \setminus X_1) \cap \Theta(V \setminus X_2) \supseteq \bigcap_{S \in \mathfrak{C}} \Theta(S).$$

为了得出与 (iii) 矛盾的结论，还需要证明第一个关系。请记住，由于可加性，我们有

$$\begin{aligned} \lambda &= \omega(S^*) + \omega(X_1) + \omega(X_2), \\ \sigma(V) &= \sigma(S^*) + \sigma(X_1) + \sigma(X_2), \\ |\delta(S^*)| &= |\delta(V \setminus S^*)| = |\delta(X_1)| + |\delta(X_2)|. \end{aligned}$$

与前面类似，我们需要区分不同的情况。不过， S^* 的不同可能性是“自然产生的”，因此我们只考虑集合 X_1 和 X_2：

a) $\sigma(V \setminus X_1)$ $\sigma(V \setminus X_2) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$：由定义 $\Theta(V \setminus X_1)$ 和 $\Theta(V \setminus X_2)$ 的不等式可得，

$$\vartheta|\delta(X_i)| = \vartheta|\delta(V \setminus X_i)| \geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(V \setminus X_i) + \omega(V \setminus X_i) + \gamma$$

对于 $i = 1, 2$，我们得到

$$\begin{aligned} \vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(X_1)| + \vartheta|\delta(X_2)| \\ &\geq 4\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(V \setminus X_1) + \omega(V \setminus X_1) - \sigma(V \setminus X_2) + \omega(V \setminus X_2) + 2\gamma \\ &= 4\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(V \setminus X_1) + \omega(V \setminus X_1) - \sigma(S^* \cup X_1) + \omega(S^* \cup X_1) + 2\gamma \\ &= 4\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(V) + \sigma(X_1) + \lambda - \omega(X_1) - \sigma(S^*) - \sigma(X_1) + \omega(S^*) + \omega(X_1) + 2\gamma \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma, \end{aligned}$$

这就是在 $\sigma(S^*) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 的情况下定义 $\Theta(S^*)$ 的不等式。对于 $\sigma(S^*) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$，我们可以通过以下关系链继续推导：

$$\begin{aligned} &> 2\sigma(S^*) - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma \\ &= \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma, \end{aligned}$$

这给出了在此情况下定义 $\Theta(S^*)$ 的不等式。

b) $\sigma(V \setminus X_1)$ $\sigma(V \setminus X_2) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$：这些条件相互矛盾，因为

$$\sigma(X_1) = \sigma(V) - \sigma(V \setminus X_1) > \sigma(V) - \tfrac{1}{2}\big(\sigma(V) - \lambda\big) = \tfrac{1}{2}\big(\sigma(V) + \lambda\big) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}},$$

同时，我们要求 $\sigma(V \setminus X_2) = \sigma(X_1) + \sigma(S^*) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$。

c) $\sigma(V \setminus X_1) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 和 $\sigma(V \setminus X_2) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$，不失一般性：由

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(X_1)| &= \vartheta|\delta(V \setminus X_1)| \geq \sigma(V \setminus X_1) + \omega(V \setminus X_1) + \gamma \\ \vartheta|\delta(X_2)| &= \vartheta|\delta(V \setminus X_2)| \geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(V \setminus X_2) + \omega(V \setminus X_2) + \gamma\end{aligned}$$

对于 $i = 1$，2，我们得到

$$\begin{aligned}\vartheta|\delta(S^*)| &= \vartheta|\delta(X_1)| + \vartheta|\delta(X_2)| \\ &= 2\vartheta_{\frac{1}{2}} + \sigma(V \setminus X_1) + \omega(V \setminus X_1) - \sigma(V \setminus X_2) + \omega(V \setminus X_2) + 2\gamma \\ &= 2\vartheta_{\frac{1}{2}} + \sigma(S^* \cup X_2) + \omega(S^* \cup X_2) - \sigma(V \setminus X_2) + \omega(V \setminus X_2) + 2\gamma \\ &= 2\vartheta_{\frac{1}{2}} + \sigma(S^*) + \sigma(X_2) + \omega(S^*) + \omega(X_2) - \sigma(V) + \sigma(X_2) + \lambda - \omega(X_2) + 2\gamma \\ &= \sigma(S^*) + 2\sigma(X_2) + \omega(S^*) + 2\gamma \\ &\geq \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\end{aligned}$$

在 $\sigma(S^*) < \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 的情况下定义 $\Theta(S^*)$ 的不等式，或通过扩展

$$\begin{aligned}&= 2\sigma(S^*) - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma \\ &\geq 2\vartheta_{\frac{1}{2}} - \sigma(S^*) + \omega(S^*) + \gamma\end{aligned}$$

在另一种 $\sigma(S^*) \geq \vartheta_{\frac{1}{2}}$ 的情况下定义 $\Theta(S^*)$ 的不等式。

因此，如果 $V \setminus S^*$ 不连通， S^* 的约束也是冗余的。 □

尽管现在可以用更少的不等式描述 Θ-多面体，但对于任意图而言，其数量仍可能是指数级的。然而，根据嵌入的要求，我们总可以通过简单地忽略图中的多余边，将研究对象限制为树。对于许多问题，已知树因其结构简单得多而具有更好的可解性。在我们的情况下也是如此，因此最终可以表述为：

定理15。 如果 G 是一棵树，则间隙权重分布问题 可以在多项式时间内求解。

证明。由于 G 是一棵树，很容易看出，定理 14 中的割集合 $\mathfrak{C}$ 仅由沿树的单条边进行切割所构成。更形式化地说，这意味着

$$\mathfrak{C} = \bigcup_{e \in E(G)} \{S_e, V \setminus S_e\},$$

其中，$(S_e, V \setminus S_e)$ 表示沿边 e 切割该树所得到的划分。因此，我们有$|\mathfrak{C}| = 2|E| = 2|V| - 2$。再加上针对 Θ_λ 的单个不等式，以及完整问题版本中描述 Φ 的 $2|V|$ 个附加不等式，间隙权重分布问题的线性规划规模关于顶点数呈线性增长。因此，利用多项式时间线性规划问题的一般可解性，我们可以得到所述结果。 □

这意味着，我们可以使用标准线性规划求解器，获得适当的权重分配及相应的强度，从而将给定问题表述为一个可证明等价的嵌入式伊辛问题。尤其是，额外的权重界不会增加问题的复杂度。此外，按此方法求得的权重针对伊辛问题最终系数的大小进行了优化，因此有望提升量子退火机的性能。

5 结论

量子退火器，尤其是 D-Wave 制造的退火器，是否优于经典计算机，目前仍有争议，只有随着此类机器的进一步发展才能见分晓。不过，要评估这项技术的巨大潜力，我们需要谨慎设计实验。如果其架构没有发生剧烈变化，那么小子图嵌入和参数设置这两个编程步骤在长期内仍将发挥作用。对于为退火机提供有意义的输入而言，这两个步骤至关重要。必要的小子图嵌入可能导致根本无法在机器上进行计算，也就是说，如果找不到嵌入，就无法计算；而具体的参数设置则会直接影响实际问题能否成功求解。

我们首次以严谨的多项式时间方法给出了求解给定问题及其相应嵌入的嵌入式伊辛问题参数的描述，使得两个问题可以被证明等价。由于嵌入的结构，求解性证明所要求的树结构限制始终可以满足，例如，可以忽略嵌入子图中多余的边。此外，尽管嵌入问题与 D-Wave 的特定硬件图密切相关，我们的权重分布方法适用于所有在图上实现伊辛问题、但无法提供全连接、因而需要嵌入的硬件。虽然我们的表述对问题结构作出了若干假设，但第 3.3 节清楚地说明了这些假设的由来，以及在哪些情况下它们可能与实际界限有所偏差。由此我们可以推断，对于若干实例，我们得到的界限是紧的。

展望未来，参数精度问题支持这样一种假设：伊辛问题的参数最好尽可能少取不同的值，同时这些值之间的两两绝对差应尽可能大，以获得可接受的成功概率。如果原始伊辛问题的参数本来就全是整数，那么一种可行的做法是，嵌入式伊辛问题也只允许使用整数参数，而不采用有理数参数。这样可以确保参数之间的距离至少为 1，从而可能提高成功概率。然而，最小化最大绝对整数参数会显著增加问题的复杂度，因为这相当于从线性规划转为整数线性规划。对此问题的评估将是我们下一步的研究工作。

另一个有趣的研究方向或许是拓展 [23] 的方法：在本论文中，我们评估的是最坏情况，即嵌入顶点必须针对所有可能的邻接构型保持同步；而在实践中，平均情况或许也已足够，即它们“只需”在大多数情况下保持同步，同时还能实现更小的耦合强度。

此外，凭借我们的研究结果，现在可以将所构造的伊辛问题直接传输到 D-Wave 机器上。这意味着，我们可以进一步研究这些机器的计算属性：理论上的最优耦合强度在机器受到扰动时是否仍然成立？也就是说，它们在实践中是否足以确保变量同步？理论上，任何正间隙都足以保证问题等价；因此，理想的量子退火器在经过足够长的退火时间后确实应当返回最优解，但对于任何物理退火机而言，很可能都需要增大间隙。这个间隙参数是一种工具，可为同一个问题提供不同但最重要的是彼此等价的编码，从而能够研究理论耦合强度与**有效**耦合强度之间的差异；后者指真实机器以可接受的成功概率返回最优值所必需的耦合强度。借此，我们将

更深入地理解此类机器与具体问题无关的行为，从而推动它们的进一步发展。

参考文献

[1] F. Barahona. 关于伊辛自旋玻璃模型的计算复杂度。《物理学杂志 A：数学与一般物理》, 15(10):3241–3253, 1982. doi: 10.1088/0305 -4470/15/10/028.[2] K. Boothby, A. King, and J. Raymond. D-Wave 量子处理器的 Zephyr 拓扑结构。技术报告，D-Wave Systems Inc., 2021. url: https://www.dwavesys.com/media/2 uznec4s/14-1056a-a_zephyr_topology_of_d-wave_quantum_processors.pdf.[3] K. Boothby, P. Bunyk, J. Raymond, and A. Roy. D-Wave 量子处理器的下一代拓扑结构。预印本，2020. arXiv: 2003.00133 [quant-ph].[4] J. Cai, W. G. Macready, and A. Roy. 一种寻找图 minor 的实用启发式方法。预印本，2014. arXiv: 1406.2741 [quant-ph].[5] V. Choi. 绝热量子计算中的 minor 嵌入：I. 参数设置问题。《量子信息处理》, 7(5):193–209, 2008. doi: 10.1007/s1112 8-008-0082-9.[6] V. Choi. 绝热量子计算中的 minor 嵌入：II. minor 通用图设计。《量子信息处理》, 10(3):343–353, 2011. doi: 10.1007/s1112 8-010-0200-3.[7] D-Wave Systems Inc. D-Wave 系统文档。url: https://docs.dwavesys.com /docs/latest/index.html. 访问日期：2022-09-14.[8] D-Wave Systems Inc. dwave-system。GitHub 代码库，2022. url: https://github.com/dwavesystems/dwave-system/blob/1.15.0/dwave/embedding/chain_strength.py. 版本 1.15.0.[9] D-Wave Systems Inc. minorminor。GitHub 代码库，2022. url: https://github.co m/dwavesystems/minorminer/releases/tag/0.2.9. 版本 0.2.9.[10] R. Diestel. 图论，数学研究生教材第 173 卷。Springer，第 5 版，2017. doi: 10.1007/978-3-662-53622-3.[11] Y.-L. Fang and P. Warburton. 最小化 minor 嵌入能量：量子退火中的一项应用。《量子信息处理》, 19(7):1–29, 2020. doi: 10.1007/s11128-020-02681-x.[12] S. Hoory, N. Linial, and A. Wigderson. 扩展图及其应用。《美国数学会通报》, 43(4):439–561, 2006. doi: 10.1090/S0273-0 979-06-01126-8.[13] M. Jünger, E. Lobe, P. Mutzel, G. Reinelt, F.Rendl, G. Rinaldi, and T. Stollenwerk. 量子退火与数字计算：实验比较。《ACM 实验算法学杂志》, 26(1.9):1–30, 2021. doi: 10.1145/3459606.[14] A. D. King and C. C. McGeoch. 量子退火平台的算法工程。预印本, 2014. arXiv: 1410.2628 [cs.DS].[15] G. Kochenberger, J.-K. Hao, F. Glover, M. Lewis, Z. Lü, H. Wang, and Y. Wang. 无约束二进制二次规划问题：综述。《组合优化杂志》, 28(1):58–81, 2014. doi: 10.1007/s10878-014-9734-0.

[16] B. Korte and J. Vygen. **组合优化：理论与算法**，算法与组合第 21 卷。Springer，第 6 版，2018. doi: 10.1007/9 78-3-662-56039-6.[17] E. Lobe. **量子退火器编程中的组合问题**。博士论文，马格德堡奥托·冯·格里克大学，数学学院，2022. doi: 10.2567 3/89443.[18] E. Lobe and A. Lutz. 破损的 Chimera 和 Pegasus 图中的 minor 嵌入是 NP 完全的。**预印本**，2021. arXiv: 2110.08325 [quant-ph].[19] E. Lobe, L. Schürmann, and T. Stollenwerk. 在破损的 Chimera 图中嵌入完全图。《量子信息处理》, 20(7):1–27, 2021. doi: 10.1007/s11 128-021-03168-z.[20] A. Lucas. 许多 NP 问题的伊辛表述。《**物理学前沿**》, 2:5, 2014. doi: 10.3389/fphy.2014.00005.[21] D. W. Matula and F. Shahrokhi. 图中的最稀疏割与瓶颈。《**离散应用数学**》, 27(1-2):113–123, 1990. doi: 10.1016/0166-218X(90)90133-W.[22] K. L. Pudenz. 量子退火器的参数设置。载于**2016 IEEE 高性能极限计算会议（HPEC）**，第 1–6 页。IEEE，2016 年 9 月。doi: 10.1109/HPEC.2016.7761619.[23] J. Raymond, N. Ndiaye, G. Rayaprolu, and 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 IEEE 量子计算与工程国际会议（QCE）**，第 295–305 页。IEEE，2020 年 10 月。doi: 10.1109/QCE49297.2020.00044.[24] N. Robertson and P. D. Seymour. 图 minor. XIII. 不相交路径问题。《**组合理论杂志 B辑**》, 63(1):65–110, 1995. doi: 10.1006/jctb.1995.10 06.[25] T. Stollenwerk, V. Michaud, E. Lobe, M. Picard, A. Basermann, and T. Botter. 使用量子退火器灵活调度地球观测卫星。《**IEEE 航空航天与电子系统汇刊**》, 57(5):3520–3528, 2021. doi: 10.1109/TAES.2021 .3088490.[26] T. Stollenwerk, B. O'Gorman, D. Venturelli, S. Mandrà, O. Rodionova, H. Ng, B. Sridhar, E. G. Rieffel, and R. Biswas. 将量子退火应用于空中交通管理中的最优航迹冲突消解。《**IEEE 智能交通系统汇刊**》, 21(1):285–297, 2019. doi: 10.1109/TITS.2019.2891235.[27] D. Venturelli, D. J. Marchand, and G. Rojo. 量子退火在作业车间调度中的应用。**预印本**，2015. arXiv: 1506.08479 [quant-ph].