arXiv:2303.01183v1 [quant-ph] 2 Mar 2023

受振幅放大启发的 QAOA：提高求解 3SAT 的成功概率

Alexander Mandl、Johanna Barzen、Marvin Bechtold、Frank Leymann、Karoline Wild
应用系统架构研究所，斯图加特大学，Universit¨atsstraße 38，
70569 斯图加特，德国
电子邮件： [firstname.lastname]@iaas.uni-stuttgart.de

摘要。 布尔可满足性问题（SAT），尤其是子句大小有限的 3SAT，是一个经过充分研究的问题，因为许多判定问题都可以归约为它。鉴于其复杂度很高，研究量子算法能否更高效地求解 3SAT，是一个重要课题。由于 3SAT 可以表述为对满足赋值的无结构搜索，因此可以应用振幅放大算法。然而，振幅放大的电路复杂度很高，这限制了它在近期量子系统中的应用。另一方面，由于量子试探态简单，量子近似优化算法（QAOA）是近期利用含噪中等规模量子设备求解 3SAT 的一个有前景的候选方案。然而，尽管 QAOA 通常具有较高的近似比，但在某些 3SAT 问题实例中，采用当前实现时其成功概率会下降。为解决这一问题，本文提出受振幅放大启发的 QAOA 变体，以提高求解 3SAT 的成功概率。为此，本文（i）提出并实现三种受振幅放大启发的 QAOA 变体；（ii）通过实验将这些变体与标准 QAOA 实现进行比较；以及（iii）分析其对成功概率和试探态复杂度的影响。实验结果表明，只需适度增加电路复杂度，即可提高成功概率。

关键词： 3SAT、量子近似优化算法、振幅放大、格罗弗混合器、成功概率 y

1. 引言

布尔可满足性问题（SAT）是计算机科学中经过广泛研究的判定问题 [1–3]。从硬件形式化验证 [4]到规划问题 [1, 5] ，各种应用场景都可以编码为 SAT 实例。由于其严格的形式以及子句大小限制为三个文字，人们通常会考虑 3SAT，因为所有 SAT 实例都可以归约为 3SAT [6]。经典计算机上存在多种 3SAT 求解器。然而，由于 3SAT 是 NP 完全问题 [7], ，这些求解器在最坏情况下的运行时间复杂度很高，因此目前有多项研究正在探索使用量子算法求解 3SAT 的可能性 [8, 9]。

量子计算有望加速各种应用。为实现 3SAT 求解器，人们采用了不同的量子算法，例如振幅放大 [10, 11]，或量子近似优化算法（QAOA）等变分方法 [12], 。然而，当前的含噪中等规模量子（NISQ）设备具有量子比特数量有限、门错误率高等特点 [13]。这限制了当前量子硬件能够执行的量子算法的电路规模。尽管对于一般的无结构搜索问题，振幅放大在复杂度方面是最优的 [14], ，但求解较大规模 3SAT 实例所需的量子电路仍超出了当前 NISQ 设备的能力范围。

由于 QAOA 等变分量子算法通常需要较浅的电路，因此有望用于 NISQ 设备上的 3SAT。尽管 QAOA 最初是作为最大割问题的算法提出的 [12], ，但它采用的代价函数可以根据具体问题进行调整。因此，QAOA 被应用于广泛的优化问题 [12, 15–17]。然而，虽然实验已表明，在某些应用中，QAOA 能够获得近似比稳健的一组解 [9], ，但优化过程往往会放大次优解 [18]。因此，QAOA 的原始实现可能会为 3SAT 问题等判定问题找到错误的解。

对于一般的优化问题，实验已证明，通过对算法进行各种调整，可以提高量子近似优化算法的近似比。这些调整包括重新表述代价函数 [17, 19], 、调整所使用的混合算子 [16], ，或采用不同的参数初始化策略 [20–22]。其中一些改进 [16, 23] 还进一步运用了振幅放大算法（如格罗弗搜索算法）中引入的概念 [10, 11, 24, 25] ，以及由此衍生的变分改进 [8, 26]。由于 3SAT 也可以表述为对满足赋值的无结构搜索，因此，运用振幅放大相关概念的改进也可能提升量子近似优化算法求解 3SAT 的性能。然而，迄今为止，尚未研究经过改进的量子近似优化算法能否克服此前所述的求解 3SAT 时面临的问题。

在本文中，我们通过实验研究使用振幅放大的概念对量子近似优化算法进行调整，是否能够提高求解 3SAT 的成功概率（第 6.1 节）

并评估此类调整如何影响试探态的计算复杂度（第 6.2 节）。为此，我们实现了三种不同的 QAOA 变体，并使用随机生成的公式对其进行比较。

本文其余部分的组织结构如下：第 2 节介绍 3SAT 问题所需的背景知识，并介绍量子近似优化算法和振幅放大。第 3 节介绍如何应用量子近似优化算法求解 3SAT，并指出该算法的不足之处，这些不足构成了本文的研究动机。第 4 节介绍三种不同的量子近似优化算法变体，第 5 节所述实验将对这些变体进行评估。第 6 节重点介绍实验结果，第 7 节总结量子近似优化算法的相关方法和优化方案。第 8 节将讨论这些结果对于在量子计算机上构建 3SAT 求解器的适用性，最后在第 9 节总结本文工作并介绍未来的研究机会。

2. 背景

本节首先介绍 SAT 和 3SAT 问题，随后简要介绍量子近似优化算法。由于第 4 节介绍的量子近似优化算法变体使用了振幅放大的相关概念，因此本节最后将介绍该算法。

2.1. 布尔可满足性

如上所述，判定布尔公式的可满足性（SAT）是一个研究充分的问题，因为许多判定问题都可以归约为 SAT 的实例。尤其是，由于结构简单且便于映射到量子电路，3SAT 这一问题变体在量子算法领域受到广泛研究。

3SAT 问题涉及合取范式的命题公式 $\phi = \bigwedge_{j=1}^{m} c_j$ 。这些公式由 m 个子句组成，每个子句都包含三个文字的析取：$c_j = \bigvee_{i=1}^{3} l_{i,\ j}$。每个文字 $l_{i,\ j}$ 要么是布尔变量集合 $\{a_1, \dots a_n\}$ 中的一个原子变量 a_k，要么是它的否定 $\neg a_k$。如果文字中的原子变量被否定，则称其为负 文字；否则称其为正 文字。为了定义 3SAT 公式的解，需要以下定义：

定义 （3SAT 解释）。 解释 v 是一个函数，它根据以下规则为 3SAT 公式赋值 1 或 0：

- 对于原子命题 a_k： $v(a_k) = 0$ 或 $v(a_k) = 1$。
- 对于包含原子命题 a_k 的文字 $l_{i,\ j}$：若该文字为正，则为 $v(l_{i,\ j}) = v(a_k)$；若为负，则为$v(l_{i,\ j}) = 1 - v(a_k)$。
- 对于子句 c_j：当且仅当其中某个文字 $v(l_{i,\ j}) = 1$ 成立时， $v(c_j) = 1$ 成立；否则， $v(c_j) = 0$。
- 对于 3SAT 公式 ϕ： $v(\phi) = \prod_{j=1}^{m} v(c_j)$。

解释表示对公式进行求值，得出真值真和假。由于将真值赋给原子变量可以表示

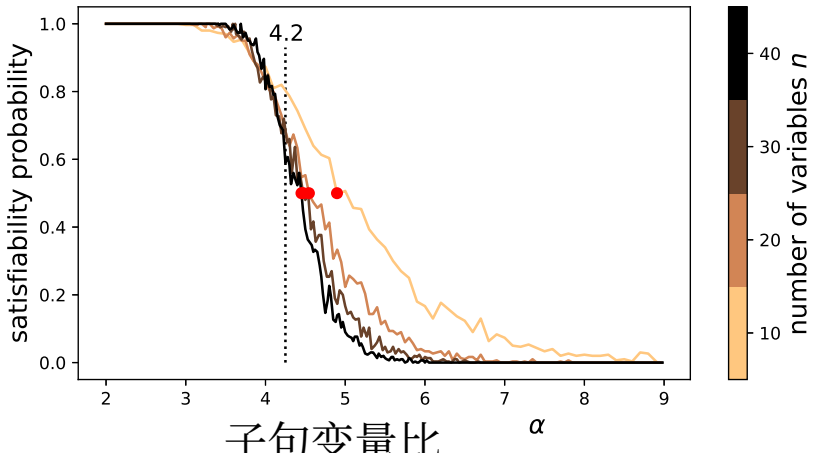


图1：随机生成的 3SAT 实例中可满足公式所占的比例，该比例可作为可满足概率发生相变的 ಽ示。每条线上的点标记了经插值确定的比例达到 50% 的位置。随着变量数量 n 增加，这些点逐渐趋近于 $\alpha' \approx 4.2$ 所示的子句变量比，该比值由虚线标出。

为一个二进制向量，因此我们通常用变量赋值 v 来表示解释$\vec{x} = (x_1, \ldots, x_n) = (v(a_1) \ldots, v(a_n))$。根据该变量赋值对公式求值，记作

$$\phi(\vec{x}) = \prod_{j=1}^{m} c_j(\vec{x}) = 1. \tag{1}$$

通过这一评估，3SAT 问题可表述为：

定义 （3SAT 问题）**：** 输入为一个 3SAT 公式 ϕ。目标是判断是否存在一个变量赋值 $\vec{x}$ ，使得 $\phi(\vec{x}) = 1$。这样的满足解释称为一个模型。

尽管对于这一判定问题而言，我们只关心给定公式的可满足性，但通常可以通过 3SAT 求解器从可满足实例中获得满足变量赋值 $\vec{x}$ 。

3SAT 问题是 NP完全问题的典型代表之一。许多研究根据输入公式的特定属性 [2, 3, 27]，对求解 3SAT 问题实例所需的计算资源进行了分类。其中一项属性是可满足概率，即随机3SAT公式存在满足赋值的概率。该可满足概率与随机生成的 3SAT 公式的子句变量比 密切相关 [27,28]。图1展示了变量数量固定 n 、子句变量比不断变化 $\alpha = m/n$时随机生成公式的可满足概率。图中显示，当子句变量比达到 $\alpha' \approx 4.2$ [28–30] 左右时，可满足概率会急剧下降。在这个所谓的相变 区域，问题实例会从子句数量较少、很可能可满足的公式，

转变为约束非常严格、几乎肯定不可满足的公式。可满足概率的这种变化会影响 SAT 求解器的运行时间复杂度。对于接近相变的公式，求解所需时间通常会增加。通过考察基于回溯搜索的求解器 [27],、戴维斯-普特南过程 [29], 及类似算法 [30]所需的计算时间，实验验证了这一现象。此外，研究还发现，相变会影响用于求解 3SAT 的量子算法。对于处于相变区域的公式，得到满足赋值的概率会降低 [9, 31]。由于 3SAT 问题最难的实例集中在相变区域附近，这种分类有助于找到合适的问题实例，用于测试和验证新设计的 3SAT 求解算法。因此，子句变量比也用于对第 5 节所示实验的输入进行分类。

衡量用于求解 3SAT 的量子算法质量的一个常见指标，是针对随机生成的公式的成功概率。它描述了算法对于具有特定子句变量比的公式所得出的决策（可满足或不可满足）正确的概率。在本文中，还将使用该值来考察所提出变体的性能。

SAT 问题的另一种变体是 MAX-3SAT 问题，它将 3SAT 表述为一个优化问题。该问题并不专门寻求找到一个能够满足整个公式 ϕ 的变量赋值 $\vec{x}$ ，而是旨在给出使满足的 3SAT 子句数量最大化的赋值。例如，这些赋值可以作为规划问题 [5] 的启发式方法。

使用公式 1 中的记号，MAX-3SAT 的目标是最小化代价函数

$$C_\phi(\vec{x}) = \sum_{j=1}^{m}(1 - c_j(\vec{x})), \tag{2}$$

它计算给定公式中未满足子句的数量，该公式包含 m 个子句。与用于评估求解 3SAT 的算法的成功概率不同，对于 MAX-3SAT 等优化算法，需要评估近似比。该比率是通过优化算法获得的变量赋值所满足的子句数量与最优赋值所满足的子句数量之比。对于给定的 3SAT 公式 ϕ，任何 MAX-3SAT 问题的最优赋值都满足 $m_{opt} \leq m$ 个子句。如果 ϕ 不可满足，则 $m_{opt} < m$ 成立。对于满足 $m_{\vec{x}}$ 个子句的任意变量赋值 $\vec{x}$ ，近似比为 $m_{\vec{x}}/m_{opt}$。目前，量子算法领域的许多研究都聚焦于使用量子计算机提高 MAX-3SAT 等优化问题的近似比。量子近似优化算法（ QAOA）是为实现这一目标而采用的算法之一。

2.2. 量子近似优化算法

量子近似优化算法（QAOA）是一种用于求解组合优化问题的变分量子算法，最初被提出作为求解最大割问题的量子方案 [12]。该算法采用针对具体问题建模的试探态，因此也可以扩展到其他问题，包括一些广为人知的 NP 完全问题 [32]。

QAOA 的核心目标是找到给定哈密顿量 H_C 的最小特征值对应的状态，该哈密顿量编码了组合优化问题的代价函数 $C: \{0,1\}^n \to \mathbb{R}$。对于由二进制向量 $\vec{x} \in \{0,1\}^n$ 表示的候选解， H_C 通过其特征值编码该解的代价，具体如下

$$H_C |\vec{x}\rangle = C(\vec{x}) |\vec{x}\rangle . \tag{3}$$

因此，相对于 $C(\vec{x})$，最优解对应的特征值最小。试探态由一个制备初始状态的电路构成，随后交替应用 相位分离算符 $U(H_C, \gamma_i) = e^{-i\gamma_i H_C}$和混合器电路 $U(H_B, \beta_i) = e^{-i\beta_i H_B}$，重复 p 次。相位分离电路引入一个不可测量的相位，该相位编码了解的代价。混合器电路用于将这一相位转换为候选解测量概率的调整。幺正操作 $U(H_C, \gamma_i)$ 和 $U(H_B, \beta_i)$ 由实值向量 $\vec{\gamma} = (\gamma_1, ..., \gamma_p)$ 和 $\beta = (\beta_1, ..., \beta_p)$ 参数化。将此过程应用于初始状态 $|+\rangle^{\otimes n}$ ，可使量子系统进入参数化状态

$$|\vec{\gamma}, \vec{\beta}\rangle = \left(\prod_{i=1}^{p} U(H_B, \beta_i) U(H_C, \gamma_i) \right) |+\rangle^{\otimes n} , \tag{4}$$

其中混合器哈密顿量定义为 $H_B = \sum_{i=1}^{n} X_i$，通常称为横向场混合器 [19]。

通过执行上述量子电路，可以对表示优化问题候选解的一组二进制向量进行采样，并计算其平均代价。在变分循环中，使用经典优化器来寻找最优参数 $\vec{\gamma}^*, \beta^*$ ，使测量所得解的期望代价最小化。换句话说，该算法计算

$$\min_{\vec{\gamma}, \vec{\beta}} \langle \vec{\gamma}, \vec{\beta} | H_C | \vec{\gamma}, \vec{\beta} \rangle . \tag{5}$$

使用由经典优化器找到的最优参数 $\vec{\gamma}^*$， β^* ，即可测得一组近似最小化问题代价函数 $C(\vec{x})$ 的解。假设重复次数 p，即 $U(H_B, \beta_i)$ 和 $U(H_C, \gamma_i)$ 的次数足够大，则应能找到这样一组解 [12]。然而，对所需 p 进行估计仍是一个正在积极研究的问题。该值也被称为试探态的*QAOA* 深度，因为它直接影响所执行量子电路的电路深度。

2.3. 振幅放大

Grover 算法 [11], 是首个利用振幅放大概念的算法，它在量子计算机上针对由预言机识别的唯一解态执行无结构搜索。与经典无结构搜索相比，该算法通过仅需对预言机进行 $O(\sqrt{N})$ 次评估，而非在包含 N 个元素 [11]的搜索空间中经典计算机所需的 $O(N)$ 次评估，从而加速了这一过程。进一步研究表明，对于无结构搜索问题 [14], 该算法的运行时间复杂度在常数因子意义下是最优的。该过程背后的思想在振幅放大算法 [10]中被推广到具有多个解态的问题。

与量子近似优化算法中的相位分离算子类似，振幅放大需要一个预言机，根据某个状态是否属于解集来操控其相位。给定某个布尔指示函数 $f:\ \{0,1\}^n \to \{0,1\}$, Grover 预言机（有时也称为相位翻转预言机）会将每个候选态 $|\vec{x}\rangle$ 映射为 $(-1)^{f(\vec{x})}|\vec{x}\rangle$。为将这种相位变化转化为对解态振幅可测量的放大，需要使用*Grover* 扩散算子 $2|+\rangle\langle+|^{\otimes n}-I^{\otimes n}$ [33]。这一过程会对初始态 $|+\rangle^{\otimes n}$反复执行，该初始态表示无约束搜索空间中所有候选解的叠加态。根据解集大小和搜索空间大小，可以设定预言机和扩散算子的应用次数上限，随后便能确定无误地测量出所需的解态 [10, 33]。

NP 中问题的解候选（例如 3SAT）可以在经典计算中于多项式时间内得到验证，因此也可以使用多项式规模的量子电路进行验证 [33]。因此，振幅放大这类通用的无结构搜索算法非常适合用于解决可满足性问题。对于 3SAT 问题，解候选是由位串表示的变量赋值 $\vec{x} \in \{0,1\}^n$。因此，相位预言机的作用是在变量赋值的叠加态中标记那些满足给定公式的赋值，当且仅当它们满足该公式时才进行标记。

3. 动机与研究问题

振幅放大算法对当前 NISQ 设备的缺点是需要深层量子电路。由于量子近似优化算法的量子电路较浅，将其应用于 3SAT 问题的潜力正受到积极研究。然而，由于量子近似优化算法是一种优化算法，目前仅考虑 3SAT 的优化变体 MAX-3SAT [8, 9]。要将量子近似优化算法应用于 MAX-3SAT，公式（2）中的代价函数被编码为一个代价哈密顿量 H_ϕ。该哈密顿量有多种表述方式 [32,34–37], ，其中一些着重于减少在相位分离算子中实现该代价函数所需的操作次数。这些表述通常将代价哈密顿量描述为子句

算子

$$H_\phi = \sum_{j=1}^{m} H_{C_j}. \tag{6}$$

每个 H_{C_j} 都会增大不满足第j个子句的变量赋值所对应的特征值。这些子句算子表示为

$$H_{C_j} = \frac{1}{8}\prod_{i=1}^{3}(I + p_{i,j}Z_{a_{i,j}}). \tag{7}$$

在此公式中，$p_{i,j}$ 描述第 j个子句中文字$l_{i,j}$ 的极性，其中$p_{i,j} = 1$表示正文字，$p_{i,j} = -1$ 表示负文字。此外，表达式$Z_{a_{i,j}}$表示泡利算子 Z 作用于表示文字$l_{i,j}$的原子命题的量子比特上。根据文字$l_{i,j}$的极性，如果变量赋值满足该文字，公式（7）中的各个因子特征值为 0；如果不满足该文字，这些因子的特征值则为 2。因此，只要析取中的至少一个文字得到满足，子句算子 H_{C_j} 在该变量赋值下的特征值就为 0。通过使用量子近似优化算法寻找代价哈密顿量 H_ϕ的最小特征值对应的状态，该算法将找到能使尽可能多的子句算子 H_{C_j} 的特征值为 0 的变量赋值。因此，这种变量赋值能使满足的子句数量最大化，从而解决 MAX-3SAT 问题。有关如何将此代价算子实现为量子电路的详细信息，请参见附录 A。

为了将这一用于 MAX-3SAT 的算法扩展到求解 3SAT 判定问题，近期研究着重于利用针对 MAX-3SAT 获得的变量赋值，推断它们是否满足给定的输入 [8, 9]。具体做法是使用采样解经典地评估公式。

通过实验评估发现，量子近似优化算法在 MAX-3SAT 中表现出良好的近似比 [9]。然而，根据 MAX-3SAT 问题的近似解进行推断时，往往会为 3SAT 判定问题得到错误的解。对于一个采用合取范式的可满足 3SAT 公式而言，若测得的变量赋值满足给定子句中的 99%，对于近似求解 MAX-3SAT 问题的算法来说已是相当不错的结果。然而，对于判定问题的变体，这将被判定为错误结果，即 不可满足。Bennett 和 Wang [18] 也得出了类似的观察结果。在他们的工作中，他们发现量子游走优化算法（QWOA）作为量子近似优化算法的一种推广，由于次优解的数量多于最优解，因此倾向于放大次优解以提高近似比。因此，标准 QAOA 实现在应用于 3SAT 时仍有改进空间。

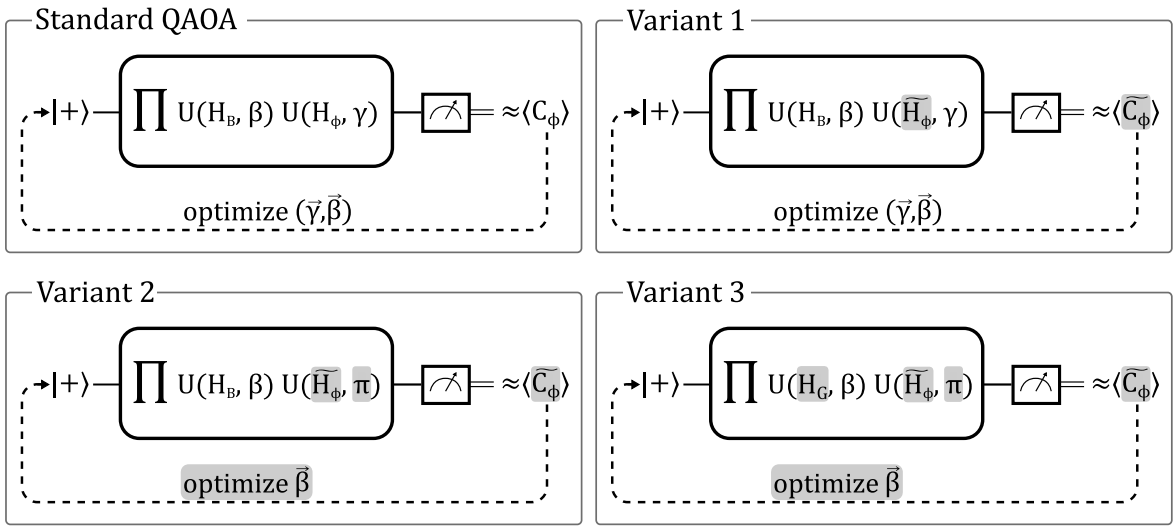


图 2：本研究实现的三种不同 QAOA 变体以及用于 MAX-3SAT 的标准 QAOA 实现的示意图。针对 MAX-3SAT 问题对标准 QAOA 实现所做的调整已特别标出。

因此，本工作的目标是利用振幅放大的优势，提高量子近似优化算法用于 3SAT 时的成功概率。为此，我们提出以下研究问题：

- 研究问题 1：能否将振幅放大中的机制用于提高 QAOA 求解 3SAT 问题的成功概率?
- 研究问题 2：借鉴振幅放大的概念调整 QAOA 试探态，会如何影响试探态的计算复杂度?

4. 受振幅放大启发的 QAOA 变体

为回答这些研究问题，我们考察并通过实验比较了三种不同的 QAOA 变体；这些变体运用了振幅放大中的思路，以提高求解 3SAT 问题的成功概率。我们将这些调整呈现为对 QAOA 的渐进式改写，使其最终几乎与振幅放大算法一致。图 2 概述了标准 QAOA，以及我们为第 5 节中的实验实现的改进方案：

- 变体 *1*：一种采用二元代价函数进行优化的量子近似优化算法改型。
- 变体 *2*：变体 *1*的扩展，其中参数 $\vec{\gamma}$ 固定为 $\gamma_i = \pi$。经典优化步骤将仅优化混合器参数 β。
- 变体 *3*：变体 *2*的扩展，采用格罗弗混合器。

下面将详细解释这些 QAOA 变体。

4.1. 变体 1：代价函数与相位分离算子

变体 *1* 采用一种经过调整的二元代价函数。为了引导近似算法避免放大次优解，该函数对除$\widetilde{\ }$最优解之外的所有解施加相同的惩罚。给定某个 3SAT 公式 ϕ，其目标函数 $C_\phi(\vec{x})$ 定义为

$$\widetilde{C_\phi}(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \phi(\vec{x}) = 1 \\ 1 & \text{if } \phi(\vec{x}) = 0 \end{cases}, \tag{8}$$

其中，$\phi(\vec{x}) = 1$ 表示给定变量赋值 $\vec{x}$ 时，公式 ϕ 的计算结果为真；而 $\phi(\vec{x}) = 0$ 表示公式的计算结果为假。同样，$\widetilde{\ }$对应的代价哈密顿量 H_ϕ 对于表示不满足赋值的量子态 $|\vec{x}\rangle$ 具有特征值 1，对于满足赋值则具有特征值 0。因此，QAOA 使用该算子得到的期望代价$\tilde{\ }$ $\langle\vec{\gamma},\beta|H_\phi|\vec{\gamma},\beta\rangle$ 可以视为电路末端测得的不满足赋值所占的比例。

我们基于该代价函数实现 QAOA 的相位分离算子，方法是复用现有的预言机综合技术 [38]。我们首先介绍一种通用方法，用于将比特翻转预言机扩展为相位分离算子；我们的实验采用了这种方法。给定函数f：$\{0,1\}^n \to \{0,1\}$，其通用比特翻转预言机定义为

$$U\,|\vec{x}, y\rangle = |\vec{x}, y \oplus f(\vec{x})\rangle\,. \tag{9}$$

因此，通过对辅助量子比特取反，它编码了结果 $f(\vec{x})$。随后可以利用该量子比特操纵所考察量子态的相位，这正是量子近似优化算法中所需要的。

我们通过注意到所需的相位分离算子$U(H_C,\ \gamma)$会将 $|\vec{x}\rangle$ 变为 $e^{-i\gamma C(\vec{x})}\,|\vec{x}\rangle$ 来实现这一扩展，其中给定了组合变量的赋值 $\vec{x}$以及任意目标函数。假设代价函数为二进制函数，并表示为 $C(\vec{x}) \in \{0,1\}$，则还可以使用比特翻转预言机执行这一精确操作：在反计算之前应用相位门 $P(-\gamma)$：

$$\begin{aligned} |\vec{x}, 0 \oplus C(\vec{x})\rangle &= |\vec{x}, C(\vec{x})\rangle \\ &\xrightarrow{P(-\gamma)} e^{-i\gamma C(\vec{x})}\,|\vec{x}, C(\vec{x})\rangle \\ &\xrightarrow{U^\dagger} e^{-i\gamma C(\vec{x})}\,|\vec{x}, 0\rangle\,. \end{aligned} \tag{10}$$

$\widetilde{\ }$对于 3SAT 问题，公式（8）中的代价函数 $C_\phi(\vec{x})$ 是二进制的。因此，我们使用一个预言机电路执行公式（10）中的过程：如果给定公式得到满足，则翻转辅助量子比特。为了获得与$\sim$$U(H_\phi,\ \gamma)$相匹配且仅在公式不满足时引入相位的相位分离算子，需要在应用预言机之前将辅助量子比特取反。

4.2. 变体 2：相位翻转预言机

通过采用变体 *1*，振幅放大的初步思想被融入量子近似优化算法：如上所述，基于比特翻转预言机的相位分离算子

可以看作一个相位翻转预言机，其中额外的自由度由参数 γ 表示。将 $\gamma = \pi$ 固定后，即可得到相位翻转预言机，因为 $e^{-i\pi C(\vec{x})}|\vec{x}\rangle = (-1)^{C(\vec{x})}|\vec{x}\rangle$。此外，固定该参数可以简化优化循环，因为此时只需对混合器参数 β 进行优化。因此，我们在实验中将参数 γ 固定为 $\gamma = \pi$，并评估该变体，称为变体 *2* 。

4.3. 变体 3：混合器与 *Grover* 扩散

与量子近似优化算法类似，振幅放大可以描述为重复应用一种门：该门由编码代价函数的门（相位翻转预言机）和混合门组成（在振幅放大的语境中称为扩散算子）。相位翻转预言机与 QAOA 的相位分离算子之间的相似性已在第 4.2 节中进行了概述。在 变体 *3* 中，我们进一步调整 QAOA，采用格罗弗混合器（GM-QAOA [16]），它与振幅放大中的扩散算子非常相似。

不同于第 2.2 节所介绍的通常混合哈密顿量，一般的格罗弗混合器使用哈密顿量 $H_F = |F\rangle\langle F|$, 其中 F是可行解状态的集合，而 $|F\rangle$ 是这些状态的等权叠加态 [16]。由于对于 3SAT，目标函数决定一个解是否可行，因此集合 F 被假定为表示 n 个布尔变量赋值的所有可能的 n 量子比特二进制字符串。这意味着 $|F\rangle = |+\rangle^{\otimes n}$，并得到混合哈密顿量 $H_G = |+\rangle\langle+|^{\otimes n}$。

通过应用 [16],中所展示的对所得混合幺正算子的改写，可以说明如何将该门实现为量子电路。为便于阅读，以下方程中省略了寄存器大小 n 。利用矩阵指数的无穷级数，混合幺正算子可改写为

$$U(H_G, \beta) = e^{-i\beta|+\rangle\langle+|} \tag{11a}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(-i\beta)^k \left(|+\rangle\langle+|\right)^k. \tag{11b}$$

对于 $k = 0$，右侧的矩阵可化简为 $(|+\rangle\langle+|)^0 = I$。此外，由于 $(|+\rangle\langle+|)^2 = |+\rangle\langle+|+\rangle\langle+| = |+\rangle\langle+|,$，该矩阵是幂等的。因此，在方程 (11*b*) 中，用 $(|+\rangle\langle+|)^k = |+\rangle\langle+|$ 代替 $k > 1$，得到

$$U(H_G, \beta) = I + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}(-i\beta)^k |+\rangle\langle+| \tag{12a}$$

$$= I + \left(e^{-i\beta} - 1\right)|+\rangle\langle+| \tag{12b}$$

$$= H\left(I + \left(e^{-i\beta} - 1\right)|0\rangle\langle 0|\right)H \tag{12c}$$

$$= HX\left(I + \left(e^{-i\beta} - 1\right)|1\rangle\langle 1|\right)XH \tag{12d}$$

$$= HX\ CP_n(-\beta)\ XH, \tag{12e}$$

其中，$CP_n(-\beta)$ 是作用于第 n 个量子比特的相移门，由其他$n-1$ 个量子比特控制。因此，格罗弗混合器可以通过两层 Hadamard 门和X 门以及一个受控相移门构成，从而得到图 3 所示的量子电路。

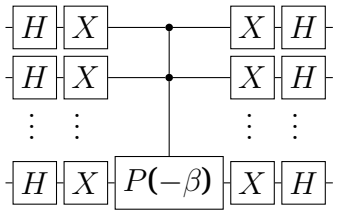


图 3：格罗弗混合器的量子电路 [16]，其混合哈密顿量为$H_G = |+\rangle\langle+|^{\otimes n}$。

公式（12b）进一步突出了格罗弗混合器与扩散算子之间的关系。该公式表明，通过设置 $\beta = \pi$，格罗弗混合器等于扩散算子 $2|+\rangle\langle+| - I$（相差一个全局相位），这也解释了其名称的由来。

5. 实验设置

为回答研究问题 1，我们使用 Qiskit 实现所介绍的 QAOA 变体，并评估它们求解 3SAT 时的成功概率。为进行评估，我们使用 Qiskit 模拟器获取无噪声结果。本节详细介绍这些实验的输入以及结果评估。我们还按照第 3 节中的描述，为 MAX-3SAT 问题实现并运行一个未经修改、基于 QAOA 的 3SAT 求解器，作为基线。为进一步评估 QAOA 深度对各变体成功概率的影响，所有实验均针对 $p \in \{2, 4, 6, 8, 10\}$执行。对于每个变体和选定的每种 QAOA 深度，都会生成一组 3SAT 公式，并计算各变体在这些输入上的成功执行比例。实例规模与模拟所需的计算时间之间存在权衡。因此，我们将变量数保持为 $n = 10$。为研究 3SAT 相变对成功概率的影响，我们评估子句变量比为 $1.5 \leq \alpha \leq 8$的公式。这样便纳入了相变区域 $\alpha \approx 4.2$ 两侧的公式。因此，对于介于 $m = 15$ 和 $m = 80$之间的每个子句数 m，我们通过执行图4所示的流程来评估 400 个 3SAT 实例。

在实验的步骤 *1* 中，随机生成一个 3SAT 公式。其子句通过从 $n = 10$个可用原子变量中有放回地选取三个来构成。以相同的概率将这些变量作为正文字或负文字加入整体析取中。在步骤 *2* 和步骤 *3*中，执行量子算法。先初始化参数，然后在变分循环中对其进行优化。我们选择 SciPy [39]提供的基于线性近似的优化器 COBYLA 实现，作为本实验的经典优化器。研究发现，该优化器在低噪声场景 [40], 下表现更佳；由于我们模拟的量子电路不含噪声，因此这种选择更为合适。

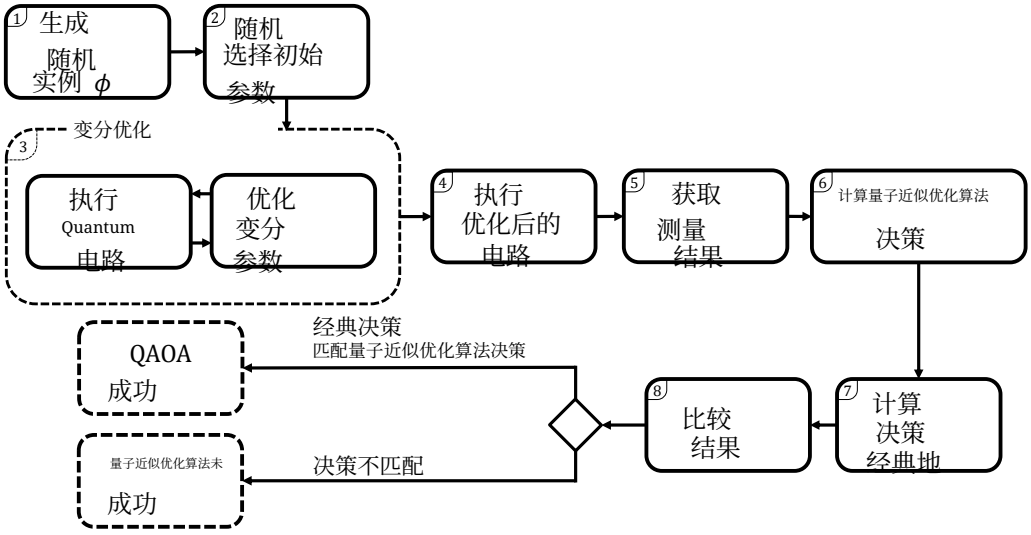


图4：用于近似成功概率的实验设置。该实验针对 变体*1-3* 以及基线实现进行。

对于变体*1-3*，变分循环会找到使公式（8）中的代价函数 $C_\phi(\vec{x})$的期望值$\widetilde{\ }$最小化的参数 $\vec{\gamma}^*$ 和 $\vec{\beta}^*$ 的取值（或者分别仅寻找 $\vec{\beta}^*$ 的取值，以用于变体 *2* 和变体 *3* ）。对于基线实现，步骤 *3* 会将公式（2）中的 $C_\phi(\vec{x})$最小化。随后，在步骤 *4* 中，使用这些优化后的参数再次运行试探态，并在步骤 *5*中测量一组变量赋值。根据这些测量结果，在步骤 *6*中得出该 3SAT 问题实例的决策（可满足 或不可满足）。当且仅当输入公式可满足时，

$$\langle \vec{\gamma}^*, \vec{\beta}^* | \widetilde{H_\phi} | \vec{\gamma}^*, \vec{\beta}^* \rangle < 1. \tag{13}$$

换句话说，如果使用最优参数进行测量后得到至少一个满足赋值，那么该公式就是可满足的。如果没有找到这样的解，则判定其不可满足。最后，在步骤 *7* 中，使用经典方法计算给定输入的精确判定结果。我们使用经典求解器 PySAT [41]来完成此任务。根据这一结果，如果所研究变体的判定结果与经典 3SAT 求解器得出的判定结果一致，则在步骤 *8* 中将该算法的一次执行视为成功。

所提出的量子近似优化算法变体采用了计算开销相当大的预言机和混合器。对于 $n = 10$，量子电路中的操作数量过多，无法在当前设备上执行。因此，我们利用 Qiskit 内置的模拟功能开展实验。为简便起见，我们使用 Qiskit 中的经典函数编译器，该编译器利用 tweedledum [38] 为变体*1-3*生成所需的比特翻转预言机。为了获得基线实现的测量结果，我们使用 Qiskit内置的QAOA实现 [42]。尽管基线实现针对函数 C_ϕ进行优化，但第 *6* 步 中的最终决策仍使用 C_ϕ 计算$\widetilde{\ }$，与变体*1-3*相同。这样一来，尽管优化的是不同的算子，我们仍能使用相同的指标比较结果。

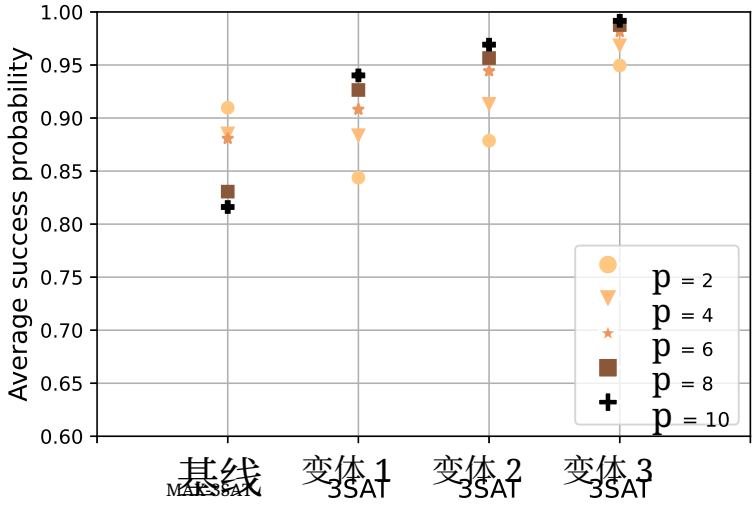
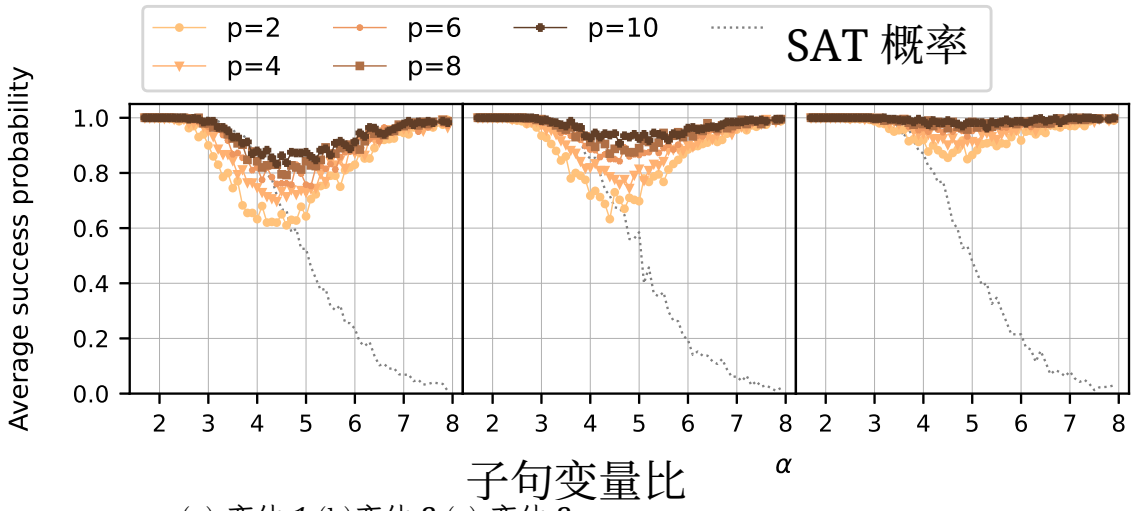


图 5：所考察的 3SAT 求解器变体在所考察的 QAOA 深度 p 下，于 $[1.5, 8.0]$ 子句变量比范围内的成功概率。

为了进一步探究所用优化器对成功概率的影响，我们通过比较不同的优化过程来扩展这项评估。我们将本文使用的优化器（COBYLA）与变分量子算法相关研究中采用的其他优化器进行比较 [9,43,44]：有限内存 BFGS 方法 [45] 以及同时扰动随机近似（SPSA）算法 [46]。在这项比较中，我们使用子句变量比为$\alpha = 4.5$的公式，考察基线实现和变体*1-3* 的成功概率。之所以选择这个数值，是因为我们的初步实验发现，对于 $n = 10$，具有该子句变量比的公式成功概率最低。最后，所选用于优化的初始参数集（见第 *2* 步）可能会影响所考察变体的成功概率。因此，我们还研究了重复执行优化过程五次、每次使用不同初始参数集，并选取代价最低结果的情况。

6. 实验结果

我们分析了所开展实验的结果，以回答本文的研究问题。实验表明，本文提出的量子近似优化算法改进方案提高了成功概率（研究问题 1），但也增加了量子电路的复杂度（研究问题 2）。以下将详细介绍实验结果。



(a) 变体 *1* (b)变体 *2* (c) 变体 *3*

图6：对于 $n = 10$ 变量，所研究变体的成功概率。图中展示了不同子句变量比 α 和各种深度 p下的概率。

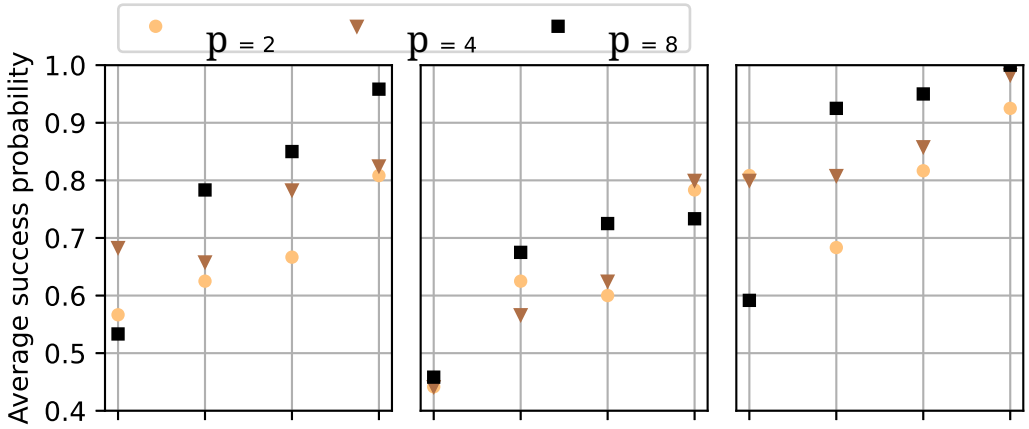
6.1. 对成功概率的影响

我们首先介绍实验中不同 QAOA 变体的成功概率。这些实验所使用的实现以及获得的实验数据可在线获取‡。

6.1.1. QAOA 变体的比较图 5 展示了变体*1-3*以及基线实现的平均成功概率。这些数值是通过计算图4所示流程在所考察的子句变量比范围 $[1.5, 8.0]$ 内成功执行的比例得出的。图 5 显示，仅将代价函数改写为在相位分离算子中编码判定问题（变体 *1* ），在使用更高深度的 ans¨atze $p = 8$ 和 $p = 10$ 时，只能略微提高 3SAT 的成功概率。我们的实验甚至表明，不必对参数 $\vec{\gamma}$ 进行变分优化：变体 *2*在 p=8 和 p =10 时的成功概率均高于变体 *1*和基线实现。最后，在变体 *3*中引入格罗弗混合器，对成功概率的提升效果最为显著；即使在所研究的最小深度 $p = 2$下，也能将成功概率提高到至少 0.94。

为突出结果对可满足概率及其相变的依赖关系，图6展示了所考察输入中每种子句变量比对应的各个变体的成功概率。上述输入的可满足概率通过经典方法计算，并以虚线显示在每个子图中。对于所有变体，图中均显示，量子近似优化算法最难处理的问题实例

‡ https://github.com/UST-QuAntiL/aa_启发式_量子近似优化算法



(a) COBYLA (b) BFGS (c) SPSA

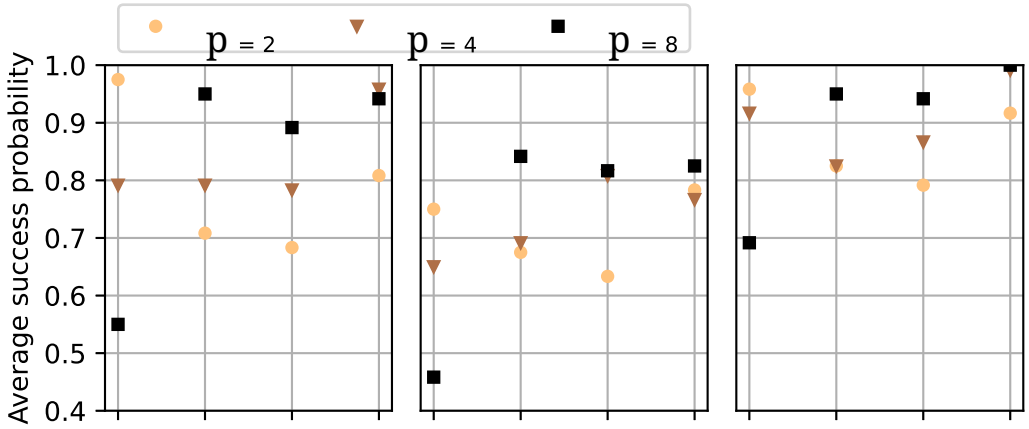
图 7：在不同 QAOA 深度 p 以及满足 $\alpha = 4.5$ 的 3SAT 公式下，使用 COBYLA、BFGS 和 SPSA 优化器时所考察变体的成功概率。

集中在相变区域附近。对于介于 $\alpha = 4$ 和 $\alpha = 5$之间的问题实例，成功概率会降低。不过，图6c显示，变体 *3*受这一现象的影响最小。即使对于相变区域中最难的问题实例，在 QAOA 深度为 $p = 2$的最浅电路中，成功概率也仅降至 0。8。

6.1.2. 优化器比较 变体 *2* 所带来的改进表明，优化过程是限制算法性能的一个因素。由于变体 *2* 使用振幅放大中的相位翻转预言机，省去了半数变分参数，因此在一定程度上克服了这一限制。使用变体 *2*的试探态时，优化器需要优化的参数更少，从而提高了成功概率。

我们进一步通过比较不同优化器，评估这些发现是否可能取决于优化过程。图 7 展示了在子句与变量比率为 $\alpha = 4.5$ 的公式上，COBYLA、BFGS 和 SPSA 优化器所取得的平均成功概率。图 7b 和图 7c 表明，这些发现对不同优化器同样成立：对于 $p > 2$，变体*1-3* 的成功概率高于基线实现。此外，图 7 显示，在这项实验中，SPSA 获得的成功概率高于 COBYLA 和 BFGS。

最后，图 8 比较了在使用不同随机生成的初始参数集重复优化循环时，各种变体与基线实现的成功概率。对于 $p = 2$ 和 COBYLA 优化器，基线实现甚至优于所考察的变体（见图 8a）。然而，



(a) COBYLA (b) BFGS (c) SPSA

图 8：使用五个随机初始点进行优化并选择最佳结果时，所考察的变体在 $\alpha = 4.5$ 下求解 3SAT 公式的成功概率。

对于 $p = 4$，其成功概率就已开始下降。这表明，基线实现所使用的试探态具有足够的表达能力，能够以较高的成功概率求解 3SAT。然而，对于基线实现，能否找到使代价函数最小化的参数，取决于初始参数集。像图 8 中那样重复五次，便能提高选取到可简化优化步骤的初始参数的概率。

尽管使用多轮优化时，变体*1-3* 的成功概率也会提高（图 8），但变体*1-3* 的成功概率受初始参数集的影响较小。即使只进行一轮优化（图 7a），使用 COBYLA 优化器时，其成功概率也已超过 0.75，且 $p = 8$ 。

6.2. 对试探态复杂度的影响

尽管对量子近似优化算法所做的改动提高了求解 3SAT 问题的成功概率，但其中一些改进也增加了电路复杂度。与变体 *1-3*中用于求解 3SAT 问题的比特翻转预言机相比，基线 MAX-3SAT 试探态所需的相位分离算子可以通过旋转门构造，其深度为线性，且最多涉及三量子比特相互作用（详情参见附录 A）。

为 3SAT 问题构造比特翻转预言机，最直接的方法是使用辅助量子比特存储每个子句的求值结果。求值时使用单量子比特取反门和由三个量子比特控制的受控取反门。随后，使用另一个由所有 m辅助量子比特控制的 CNOT 门，得到整个公式的求值结果。Nielsen 和 Chuang [33] 展示了如何通常使用线性数量的托福利门和辅助量子比特构造这样的门

。此外，还有一些实现这种受控取反的方法，虽然总操作数更多，却不需要辅助量子比特，且渐近复杂度相同 [47]。此外，构造可满足性问题比特翻转预言机还有更复杂的方法 [48–50], ，但它们仍需要非常数数量的辅助量子比特。最后，变体 *3* 中使用的格罗弗混合器也会使试探态复杂度高于横场混合器 H_B。然而，方程（12e）表明，这种复杂度的增加不像代价算子带来的增加那么大：除了一个由 $n-1$ 个量子比特控制、深度为线性的相位门外，只需使用两层H 门和两层 X 门。

总而言之，变体 *3* 中的适配混合器使用的量子门数量随规模线性增长，而变体 *1* 和变体 *2*中的量子门数量则为常数。试探电路的渐近复杂度由深度为线性的相位分离算子主导。因此，与 MAX-3SAT 问题的 QAOA 实现相比，整体试探电路的渐近复杂度并未增加。但由于针对所研究实例的电路规模较小，这仍会导致量子门操作数量大幅增加。因此，尽管结果表明成功概率可以得到提升，但这种提升是以增加电路复杂度为代价的。不过，实验结果表明，所提出的变体仍然具有实用价值。尤其是变体 *1* 和变体 *2* 仅通过对相位分离算子进行成本相对较低的调整，就提高了成功概率。

7. 相关工作

Zhang 等人 [9] 对用于 MAX-3SAT、并应用于 3SAT 问题的 QAOA 基线实现进行了深入研究。他们的研究表明，可满足概率的相变会影响 MAX-3SAT 问题以及其他相关问题的成功概率。他们所采用的实现与本文开展的实验有所不同，因为他们使用增量初始化策略来设置变分参数，并在多次运行优化器后选取最佳结果。

变体 *1* 中的修改版相位分离算子也被 Jiang 等人以类似方式采用了 [19]。他们同样使用了仅区分满足态与不满足态的代价哈密顿量。与我们的工作不同，他们使用该方法解决了一个与格罗弗的原始表述更为接近的问题，其中只有一个可能的解态需要被放大。此外，他们还采用了横场混合器，并将其参数 β 固定为 π。

为解决变分量子算法会放大次优解这一问题，Bennett 和 Wang [18] 将类似于变体 *1* 的调整应用于更为通用的量子游走优化算法（QWOA）框架。他们提出了最大振幅优化算法（MAOA），并将其应用于组合优化问题。他们以类似的方式区分优和

劣解，将可行解集合中的元素分为满足代价函数某一阈值的解和不满足该阈值的解。他们进一步表明，由于解状态的最大振幅可通过一组已知参数获得，因此可以消除变分优化过程。

在变体 *3*中，引入了格罗弗混合器，其与振幅放大中使用的扩散算子非常相似。这一操作对格罗弗搜索算法的变分重构至关重要 [8,26] ，并进一步被用于 [16], ，他们研究了在一系列优化问题中使用该混合器的量子近似优化算法应用。然而，他们关注的是将该混合器用于受约束的 优化问题；在这类问题中，可行状态集只是我们实验所考察的所有可能状态集的一个子集。

另一种与变体 *3* 密切相关的方法是阈值 QAOA（Th-QAOA） [17]。在此方法中，目标函数被一个基于阈值的类似算子所取代。该方法应用于优化问题，并将代价大于给定阈值的状态与代价小于或等于该阈值的状态区分开来。他们进一步将这一相位分离算子与格罗弗混合器结合 [16]（GM-Th-QAOA），并评估其在不同优化任务上的近似比。他们表明，与使用格罗弗混合器的标准量子近似优化算法相比，他们的方法始终表现更优。

这里列出的各种方法通常都是孤立地加以介绍，并给出其复杂度证明或分析其行为特性。此外，其中许多算法都是针对优化问题提出的。这与我们的工作形成对比：我们的目标是以实验方式研究将这些方法应用于诸如 3SAT 这样的判定问题时，这些调整所产生的影响，从而在这些方法的基础上进一步发展。

最后，我们在本文中考察的 QAOA 变体与格罗弗自适应搜索的过程密切相关 [24, 25]。该算法会反复执行 Grover 搜索，仅放大相对于当前已找到的最优解能够改善代价的状态，同时改变量子电路的迭代次数。因此，它是对 Grover 算法的调整，用于求解优化问题。

8. 讨论

与现有方法不同，现有方法仅使用 QAOA 求解 MAX- 3SAT 优化问题，并利用近似解推断 3SAT 的判定结果；我们对 QAOA 进行了调整，使其直接求解判定问题，以提高成功概率。

图 5 总结的结果表明，与基线实现相比，所有受考察的量子近似优化算法变体的成功概率都有所提高。除了在较大的p下，变体 *1* 通过调整代价函数取得了小幅改进外，将所需参数的一半预先设定（如变体 *2* 所做的那样）也是一种值得采用的调整。变体 *2* 不仅比变体 *1* 提高了成功概率，还因所需参数数量减少而降低了变分优化的复杂度。还需要进一步研究，以评估将这些

参数用作该求解器暖启动版本的初始值，而非固定点，是否有益。

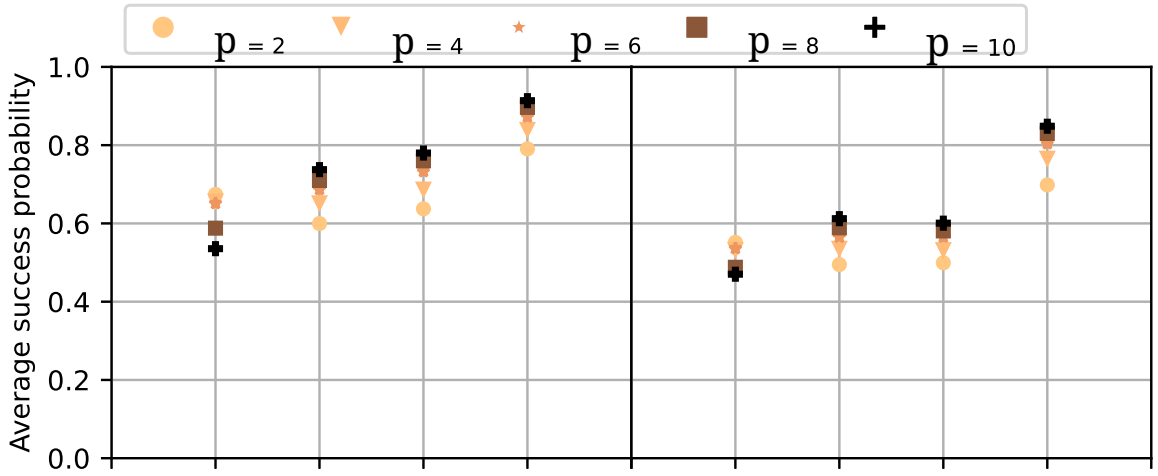
最能提高成功概率的改动是变体 *3*，它使用格罗弗混合器。这表明，标准版量子近似优化算法会放大次优解，原因可能是横场混合器更容易到达这些解 H_B。实验表明，使用适配混合器 H_G 可以在一定程度上缓解这一误差来源。不过，根据本研究开展的实验，目前尚不清楚这种改进能否推广到其他判定问题，因为这些问题的代价函数差异可能会影响这一现象。

总体而言，限制算法性能的一个因素是经典优化程序。图 5 中基线实现的结果尤其明显。随着 QAOA 深度增加，基于 MAX-3SAT 的求解器的成功概率会下降。这与 Truger 等人 [21] 的观察一致：参数空间维度的增加会对优化器的性能产生负面影响。为了提高基线实现所获得解的质量，可以采用参数增量优化等技术 [21]，也可以使用不同的经典优化器。

我们在第 6.1.2 节中的比较表明，尽管使用其他优化器时成功概率会有所变化，但变体 *3* 在所有优化器下仍能取得最高的成功概率。对于每个公式进行多次运行时对成功概率的考察，也说明了所提出的变体为何优于基于 MAX-3SAT 的求解器：变体 *1-3* 对优化过程中随机选择的初始参数集不那么敏感。对于基于 MAX-3SAT 的求解器，多次重新启动优化过程会增加找到能使代价函数最小化的初始参数的机会。这会提高 $n = 10$ 的成功概率。然而，随着实例规模增大，所需的变分参数数量也随之增加 [8]，而获得这类有利初始参数的机会则会降低。因此，变体*1-3* 对初始参数质量较低的敏感度较低，这一点很有优势。

对于算法的实际应用而言，如本文所展示的实验那样，只测量一个满足赋值就足以证明给定公式是可满足的。鉴于 $n = 10$ 的实例规模较小，由于变分优化中进行了相对大量的量子电路测量，这可能导致仅凭偶然就找到解。为了解我们实验中的结果是否同样适用于更大的问题实例，我们还考察了满足赋值的放大率。为此，我们引入一个阈值$0 < T \leq 1$，用于规定在将公式判定为可满足之前，测得的满足赋值所占的比例。我们重新评估实验结果，并假设当且仅当

$$\langle \vec{\gamma}^*, \vec{\beta}^* | \widetilde{H_\phi} | \vec{\gamma}^*, \vec{\beta}^* \rangle < (1 - T). \tag{14}$$



(a) $T = 0.10$ (b) $T = 0.25$

图 9：当可满足性阈值为 (a) $T = 0.10$ 和 (b) $T = 0.25$ 时，所考察的变体与基线实现的成功概率。

图 9 展示了在$T = 0.10$ 和 $T = 0.25$ 条件下，采用该阈值标准对不同变体进行的比较。随着阈值升高，变体 *1* 到变体 *2* 带来的改进不再那么明显。不过，这表明本文提出的调整仍能提高求解 3SAT 问题的成功概率。尤其是，变体 *3* 仍然表现出最大的成功概率提升，即使 T 不断增加也是如此。这说明观察到的改进并非仅仅源于大量的电路执行次数。这项评估支持了以下发现：即使对于更大的问题实例，本文提出的量子近似优化算法调整也能改进算法。

图6中的结果表明，其对 clause-to-variable ratio 的依赖关系与此前针对其他经典算法 $[2, 3, 27]$ 以及其他 3SAT 问题量子算法 $[8, 9]$所展示的情况类似。在经典计算领域，研究通常关注解决 3SAT 实例所需的计算资源，例如所需步数。然而，本研究所展示的量子算法成功概率下降，也可以视为同一种现象：由于成功概率降低直接意味着需要使用更深的 QAOA 试探态，因此所需资源也会随之增加。对于变量数量更多的情况，成功概率最低点的确切位置可能会偏离本文所示结果。如图1所示，随着变量数量增加，随机生成的输入在相变区域内的可满足概率变化会越来越明显。因此，可满足概率达到 50% 时对应的 clause-to-variable ratio 会更低。由此我们推测，对于所研究的 QAOA 变体，实例规模增大时，成功概率最低点也可能出现在更低的 clause-to-variable ratio 处

所研究的 QAOA 变体的实例规模增大。

总而言之，所呈现的实验表明，对于随机 3SAT 实例，采用振幅放大算法中的改进方法（如变体*1-3*所示）可以提高 QAOA 的成功概率。这些改进的代价是电路深度增加。不过，正如变体 *1* 和变体 *2*所示，即使电路深度仅适度增加，也能提高成功概率。此外，即使采用更严格的阈值，结果依然成立，这凸显了这些改进方法对 QAOA 的实用价值。

9. 总结与未来工作

使用 QAOA 求解 3SAT 问题会受到算法倾向于放大次优解这一问题的阻碍，而这会降低其成功概率。本文提出了三种 QAOA 变体，利用振幅放大的相关概念来缓解这一问题。我们通过实验考察了这些变体提高 QAOA 求解 3SAT 问题的成功概率的潜力。结果表明，对于随机生成的 3SAT 实例，采用二元代价函数作为相位分离算子，以及应用格罗弗混合器，都能改善结果。比较不同优化器时也观察到了这一改进。此外，采用这些方法后，需要优化的参数数量减半，从而降低了经典优化器的复杂度，进而进一步提高成功概率。

为了探究这些发现是否同样适用于规模更大的问题实例，我们通过对试探态生成的样本设置可满足性阈值，考察了满足赋值的放大率。成功概率的提升依然显著。不过，重构代价函数所引起的参数景观变化，仍可能影响规模更大实例的结果。这一影响仍有待在未来工作中进一步研究。

本文探讨的调整会增加试探电路的深度。在为特定问题选择采用哪种 QAOA 试探态调整方案时，必须仔细权衡这一取舍。此外，也需要考虑所选经典优化过程对结果的影响；这些结果在存在噪声的情况下是否仍然成立，也有待未来工作研究。可以通过在真实量子设备上开展实验来检验，前提是实例规模足够小，能够进行此类实验；也可以在模拟过程中引入噪声模型。

在未来的工作中，我们计划考察 QAOA 的其他常见优化方法（如热启动）是否能进一步提高求解 3SAT 的成功概率。此外，其他各种判定问题，例如寻找单色三角形或精确集合覆盖，也可能受益于本工作提出的改进，因此也应在未来的工作中予以考虑。

致谢

本研究部分由 BMWK 项目$PlanQK$ (01MK20005N) 和$EniQmA$ (01MQ22007B) 资助。

附录 A. MAX-3SAT 相位分离电路

MAX-3SAT 的代价哈密顿量（另见 [9] 的补充材料）定义为

$$H_\phi = \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{8} \prod_{i=1}^{3} (I_{a_{i,j}} + p_{i,j} Z_{a_{i,j}}). \tag{A.1}$$

在以下方程中，我们省略文字的极性，并假设 $p_{i,\ j} = 1$，因为这不会影响每个子句所需执行的量子门操作数量的上界。一个子句对应的乘积可展开为

$$(I_1 + Z_1)(I_2 + Z_2)(I_3 + Z_3) \tag{A.2}$$

$$= I + Z_1 + Z_2 + Z_3 + Z_1Z_2 + Z_1Z_3 + Z_2Z_3 + Z_1Z_2Z_3 \tag{A.3}$$

为简单起见，我们假设原子变量 a_1、a_2 和 a_3 参与该子句。因此，一个子句可实现为

$$e^{-i\gamma H_{C_j}} = \prod_{k=1}^{3} \left[e^{-i\gamma Z_k} \cdot \prod_{0<l<k} e^{-i\gamma Z_l Z_k} \right] \cdot e^{-i\gamma Z_1 Z_2 Z_3}, \tag{A.4}$$

这会产生三个 RZ旋转、三个 RZZ旋转和一次三量子比特相互作用，从而得到一个 RZZZ 门 [9]。总体而言，这表明单个子句对应的子电路具有常数深度，因此相位分离算子具有线性深度。

参考文献

[1] Henry A Kautz 和 Bart Selman。作为可满足性的规划。载于$ECAI$，第 92 卷，第 359–363 页，1992 年。[2] Ian P Gent 和 Toby Walsh。SAT相变。载于$ECAI$，第 94 卷，第 105–109 页。PITMAN，1994 年。[3]Philip Kilby、John Slaney、Sylvie Thi´ebaux 和 Toby Walsh。可满足性中的骨架与后门。载于$AAAI$，第 5 卷，第 1368–1373 页，2005 年。[4] Mukul R Prasad、Armin Biere 和 Aarti Gupta。基于SAT的形式验证最新进展综述。《软件工具与技术转移国际期刊》，7(2):156–173，2005 年。[5] Lei Zhang 和 Fahiem Bacchus。用于代价最优规划的 MaxSAT启发式方法。载于*AAAI*人工智能会议论文集，第 26 卷，第 1846–1852 页，2012 年。[6] Sanjeev Arora 和 Boaz Barak。《计算复杂度：现代方法》。剑桥大学出版社，2009 年。[7] Stephen A Cook。定理证明过程的复杂性。载于第三届 *ACM* 计算理论研讨会论文集，第 151–158 页，1971 年。[8] Vishwanathan Akshay、Hariphan Philathong、Mauro ES Morales 和 Jacob D Biamonte。量子近似优化中的可达性缺口。《物理评论快报》，124(9):090504，2020 年。

[9] Bingzhi Zhang、Akira Sone 和 Quntao Zhuang。组合问题中的量子计算相变。npj Quantum Information，8(1):1–11，2022 年。[10] Gilles Brassard、Peter Hoyer、Michele Mosca 和 Alain Tapp。量子振幅放大与估计。Contemporary Mathematics，305:53–74，2002 年。[11] Lov K Grover。一种用于数据库搜索的快速量子力学算法。载于第二十八届 ACM 计算理论研讨会论文集，第 212–219 页，1996 年。[12] Edward Farhi、Jeffrey Goldstone 和 Sam Gutmann。一种量子近似优化算法。arXiv:1411.4028，2014 年。[13] Frank Leymann 和 Johanna Barzen。NISQ 时代基于量子门的量子算法的残酷现实。Quantum Science and Technology，5(4):044007，2020 年。[14] Michel Boyer、Gilles Brassard、Peter Høyer 和 Alain Tapp。量子搜索的紧确界。Fortschritte der Physik: Progress of Physics，46(4-5):493–505，1998 年。[15]Jonathan Wurtz 和 Peter Love。 $p > 1$的最大割量子近似优化算法性能保证。Physical Review A，103(4):042612，2021 年。[16] Andreas B¨artschi 和 Stephan Eidenbenz。QAOA 的 Grover 混合器：将复杂度从混合器设计转移到态制备。载于 2020 年 IEEE 量子计算与工程国际会议（QCE），第 72–82 页。IEEE，2020 年。[17]John Golden、Andreas B¨artschi、Daniel O'Malley 和 Stephan Eidenbenz。基于阈值的量子优化。载于 2021 年 IEEE 量子计算与工程国际会议（QCE），第 137–147 页。IEEE，2021 年。[18]Tavis Bennett 和 Jingbo B Wang。利用最大放大态进行量子优化。arXiv:2111.00796，2021 年。[19] Zhang Jiang、Eleanor G Rieffel 和 Zhihui Wang。利用横向场实现 Grover 无结构搜索的近最优量子电路。Physical Review A，95(6):062317，2017 年。[20] Daniel J Egger、Jakub Mareˇcek 和 Stefan Woerner。热启动量子优化。Quantum，5:479，2021 年。[21] Felix Truger、Martin Beisel、Johanna Barzen、Frank Leymann 和 Vladimir Yussupov。最大割问题热启动量子优化中的超参数选择与优化。Electronics，11(7):1033，2022 年。[22] Xinwei Lee、Yoshiyuki Saito、Dongsheng Cai 和 Nobuyoshi Asai。量子近似优化算法的参数固定策略。载于 2021 年 IEEE 量子计算与工程国际会议（QCE），第 10–16 页。IEEE，2021 年。[23] Chen-Fu Chiang 和 Paul M Alsing。受 Grover 搜索启发的量子近似优化算法搜索问题交替算子拟设。arXiv:2204.10324，2022 年。[24] William P Baritompa、David W Bulger 和 Graham R Wood。Grover 量子算法在全局优化中的应用。SIAM 优化杂志，15(4):1170–1184，2005 年。[25] Christoph Durr 和 Peter Hoyer。一种求解最小值的量子算法。quant- ph/9607014，1996 年。[26] Mauro Morales、Timur Tlyachev 和 Jacob Biamonte。Grover 量子搜索算法的变分学习。Physical Review A，98(6):062333，2018 年。[27] Peter C Cheeseman、Bob Kanefsky、William M Taylor 等。真正困难的问题在哪里。载于 IJCAI，第 91 卷，第 331–337 页，1991 年。[28] Kevin Leyton-Brown、Holger H Hoos、Frank Hutter 和 Lin Xu。理解 NP 完全问题的经验难度。Communications of the ACM，57(5):98–107，2014 年。[29] David Mitchell、Bart Selman、Hector Levesque 等。SAT 问题的困难与简单分布。载于 AAAI，第 92 卷，第 459–465 页，1992 年。[30] James M Crawford 和 Larry D Auton。随机 3-SAT 交叉点的实验结果。《人工智能》，81(1-2):31–57，1996 年。[31] Thomas Gabor、Sebastian Zielinski、Sebastian Feld、Christoph Roch、Christian Seidel、Florian Neukart、Isabella Galter、Wolfgang Mauerer 和 Claudia Linnhoff-Popien。在量子退火平台上评估 3SAT 的解质量。载于量子国际研讨会

技术与优化问题，第 23–35 页。施普林格，2019 年。[32] Andrew Lucas。许多 NP问题的伊辛模型表述。《物理学前沿》，第 5 页，2014 年。[33]Michael A Nielsen 和 Isaac L Chuang。《量子计算与量子信息》。剑桥大学出版社，2010 年。[34] Jonas N¨ußlein、Thomas Gabor、Claudia Linnhoff-Popien 和 Sebastian Feld。用于 k-SAT 和哈密顿回路的算法 QUBO 表述。载于遗传与进化计算大会伴随会议论文集，GECCO '22，第 2240–2246 页，2022 年。[35] Nicholas Chancellor、Stefan Zohren、Paul Warburton、Simon Benjamin 和 Stephen Roberts。将最大 k-SAT 和高阶奇偶校验直接映射到 Chimera图。《科学报告》，6，2016 年 4 月。[36]Rebekah Herrman、Lorna Treffert、James Ostrowski、Phillip C. Lotshaw、Travis S. Humble 和 George Siopsis。全局优化约束优化问题的 QAOA电路深度。《算法》，14(10)，2021 年。[37] J. D. Whitfield、M. Faccin 和 J. D. Biamonte。基态自旋逻辑。《欧洲物理快报》，99(5):57004，2012 年 9 月。[38] Bruno Schmitt 和 Giovanni De Micheli。tweedledum：用于量子计算的编译器辅助工具。载于*2022*年欧洲设计、自动化与测试会议暨展览会（*DATE*），第 7–12 页，2022 年。[39] Pauli Virtanen 等。SciPy 1.0：Python科学计算的基础算法。《自然·方法》，17:261–272，2020 年。[40] Wim Lavrijsen、Ana Tudor、Juliane Muller、Costin Iancu 和 Wibe de Jong。面向含噪中等规模量子设备的经典优化器。载于*2020*年 *IEEE* 量子计算与工程国际会议（*QCE*）。IEEE，2020 年 10 月。[41]Alexey Ignatiev、Antonio Morgado 和 Joao Marques-Silva。PySAT：用于 SAT预言机原型设计的 Python 工具包。载于SAT，第 428–437 页，2018 年。[42] 关于 qiskit.algorithms.minimum eigensolvers.QAOA 的文档。在线获取：https://qiskit.org/documentation/stubs/qiskit.algorithms.minimum_eigensolvers. QAOA.html（访问日期：2023年3月2日）。[43] V. Akshay、H. Philathong、I. Zacharov 和 J. Biamonte。图问题的量子近似优化中的可达性缺口。$Quantum$，5:532，2021 年 8 月。[44] Julien Gacon、Christa Zoufal、Giuseppe Carleo 和 Stefan Woerner。量子费舍尔信息的同时扰动随机逼近。$Quantum$，5:567，2021 年 10 月。[45] Jorge Nocedal 和 Stephen J Wright。数值优化。施普林格，1999 年。[46] James C Spall。使用同时扰动梯度逼近的多变量随机逼近。《*IEEE*自动控制汇刊》，37(3):332–341，1992 年。[47]Craig Gidney。使用量子门代替辅助比特。在线获取：https://algassert.com/circuits/2015/06/22/Using-Quantum-Gates-instead-of-Ancilla-Bits. html（访问日期：2023年3月2日），2015年6月。[48] Bruno Schmitt、Ali Javadi-Abhari 和 Giovanni De Micheli。经典定义量子操作的编译流程。载于*2021*年欧洲设计、自动化与测试会议暨展览会（*DATE*），第 964–967 页，2021 年。[49]Mathias Soeken、Martin Roetteler、Nathan Wiebe 和 Giovanni De Micheli。基于查找表的分层可逆逻辑综合。《*IEEE*计算机辅助集成电路与系统设计汇刊》，38(9):1675–1688，2019 年。[50] Shuai Yang、Wei Zi、Bujiao Wu、Cheng Guo、Jialin Zhang 和 Xiaoming Sun。用于 SAT预言机的高效量子电路综合：辅助量子比特数量有限，2021 年。