arXiv:2305.03390v1 [quant-ph] 5 May 2023

使用量子近似优化算法求解连续优化问题时，多项式无约束二元优化优于二次无约束二元优化的证据

Jonas Stein
jonas.stein@ifi.lmu.de 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 德国巴伐利亚州慕尼黑

Farbod Chamanian 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 德国巴伐利亚州慕尼黑
farbod.ch.96@gmail.com

Maximilian Zorn 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 德国巴伐利亚州慕尼黑
maximilian.zorn@ifi.lmu.de

Jonas Nüßlein 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 德国巴伐利亚州慕尼黑
jonas.nuesslein@ifi.lmu.de

Sebastian Zielinski 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 德国巴伐利亚州慕尼黑
sebastian.zielinski@ifi.lmu.de

Michael Kölle 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 慕尼黑，巴伐利亚，德国
michael.koelle@ifi.lmu.de

Claudia Linnhoff-Popien 慕尼黑路德维希-马克西米利安大学 慕尼黑，巴伐利亚，德国
linnhoff@ifi.lmu.de

摘要

量子计算提供了强大的算法工具，已证明在特定优化任务中优于成熟的经典求解器。使用量子近似优化算法（QAOA）等已知量子算法求解优化问题时，问题形式化是一个关键步骤。尽管量子优化历来主要关注二次无约束二元优化（QUBO）问题，但近期研究表明，许多组合优化问题（如旅行商问题）采用其原生的多项式无约束二元优化（PUBO）形式可以更高效地求解。由于实际中的许多优化问题还包含连续变量，我们研究了采用 PUBO 和 QUBO 表述时，QAOA 求解连续优化问题的表现。我们对适用基准函数进行的大量评估显示，PUBO 表述通常能带来更好的结果，同时所需量子比特更少。由于 PUBO 变体所需的多量子比特相互作用必须使用可用的硬件量子门（即目前的单量子比特门和双量子比特门）进行分解，PUBO 方法的电路深度会随目标函数的阶数大致线性增长，超过其 QUBO 替代方案。然而，若纳入计划引入的原生多量子比特门（如全局 Mølmer-Sørenson 门），我们的实验表明，对于更高阶的连续优化问题，PUBO 总体上优于 QUBO。

允许为个人或课堂使用而免费制作本作品全部或部分内容的数字副本或纸质副本，前提是这些副本不得用于营利或商业利益目的，也不得为此进行分发，并且副本首页必须保留本声明及完整引文。本作品中归其他方面非 ACM 所有的组件，其版权必须得到尊重。注明出处后允许摘录。若要以其他方式复制、重新出版、发布到服务器或向列表重新分发，则必须事先获得明确许可和/或支付费用。请通过 permissions@acm.org 申请许可。*GECCO '23，2023*年*7*月*15*日至*19*日，葡萄牙里斯本© 2023年 计算机协会。ACM ISBN 978-1-4503-XXXX-X/18/06...$15.00
https://doi.org/10.1145/1122445.1122456

CCS 概念

• **硬件** → **量子计算**; • **计算数学** →**连续函数**.

关键词

量子计算、连续优化、量子近似优化算法、二次无约束二元优化、多项式无约束二元优化

ACM 引用格式:
Jonas Stein、Farbod Chamanian、Maximilian Zorn、Jonas Nüßlein、Sebastian Zielinski、Michael Kölle 和 Claudia Linnhoff-Popien。2023年。证据表明，使用量子近似优化算法求解连续优化问题时，多项式无约束二元优化优于二次无约束二元优化。载于遗传与进化计算会议伴会（*GECCO'23* 伴会），*2023*年*7*月*15*日至*19*日，葡萄牙里斯本。ACM，纽约，NY，美国，8页。
https://doi.org/10.1145/1122445.1122456

1 引言

求解优化问题是生产和物流等领域行业中的一项核心任务。许多此类问题涉及调度、路径规划、装箱等，通常属于 NP-困难问题，因此需要启发式求解器。量子计算是求解这类优化问题的一种特别有前景的方法；尽管目前存在量子硬件限制，但它在小规模问题上已展现出可与经典最先进方法相媲美的结果[Albash 和 Lidar，2018年；Denchev 等人，2016年；Ebadi 等人， 2022]。很长一段时间以来，量子优化一直由 D-Wave Systems 的量子退火设备推动，而这些设备在技术上只能求解以二次无约束二元优化（QUBO）形式表示的问题。Farhi 等人提出的量子近似优化算法（QAOA）随后打破了这一限制。它本质上是在量子门计算机上模拟量子退火过程，并利用通用量子计算机更强大的能力实现进一步推广 [Farhi 等人 2014]。

QAOA 一项尤为强大的推广能力，是能够求解高阶多项式问题，也就是说，它可以原生处理多项式无约束二元优化（多项式无约束二元优化）问题。对于 D-Wave 的量子退火机而言，必须使用辅助量子比特将多项式无约束二元优化问题化为二次无约束二元优化形式；而 QAOA 无需如此，所需的多量子比特相互作用可以通过量子门建模 [Nielsen 和 Chuang 2010]。虽然目前的量子计算机通常只支持单量子比特门和双量子比特门，例如，预计囚禁离子量子计算机未来将实现 Mølmer-Sørenson 门等多量子比特门[1]。这类门将能够在恒定时间内执行对多项式无约束二元优化问题建模所需的量子比特相互作用，无需像目前这样将其分解为双量子比特门和单量子比特门 [Maslov 和 Nam 2018], ；这种分解所需的门数会随涉及的量子比特数量线性增长。

虽然 Max-Cut 或 NumberPartitioning 等一些二元组合优化问题天然以 QUBO 的形式表述，但对于旅行商问题（ TSP）这类本质上是非二元的问题，要用 QUBO 建模就需要采用诸如独热编码之类的特殊编码技术，这会使搜索空间超出必要范围 [Salehi 等人 2022]。对于这类问题，研究表明，与对应的 QUBO 版本相比，其多项式无约束二元优化（PUBO）版本通常在解的质量、所需优化步骤数以及 QAOA 迭代次数方面表现更优 [Salehi 等人，2022；Tabi 等人 2020]。

由于调度或装箱等许多 NP-困难问题在实际应用中也经常涉及高阶项中的连续变量 [Floudas 和 Lin 2005], ，我们着手比较多项式无约束二元优化（PUBO）与二次无约束二元优化（QUBO）表述在 QAOA 求解连续优化问题时的性能。本研究的两项核心贡献如下：

- 一种能够求解任意多项式优化问题的量子近似优化算法实现，并允许控制所使用的位深和输入变量的定义域，以及
- 一项深入的案例研究，评估多项式无约束二元优化和二次无约束二元优化的问题形式化在两个公认的连续优化基准函数上的表现。

本文分为五个部分。引言之后，我们将在第 2 节介绍理解本文方法所需的基础知识。随后，第 3 节将详细阐述利用量子近似优化算法求解高阶连续优化问题的概念。最后，第 4 节将应用既定方法开展预期的评估，并在第 5 节结合背景对所得结果进行总结。

2 背景

本节将介绍量子近似优化算法的整体运行机制及其最初的设计动机，以全面了解可能影响评估结果的各个组成部分。

量子近似优化算法（QAOA）的灵感来源于绝热量子计算（AQC）。绝热量子计算是除无处不在的量子门模型（QGM）之外的另一种量子计算范式。AQC 与 QGM 的主要区别在于，其时间演化本质上是连续优化，而不是像量子门模型（QGM）中那样迭代地应用离散门。根据绝热定理，该定理本质上指出，只要施加于物理系统的时间演化足够缓慢，并且相应的特征值与哈密顿量谱中的其余部分之间存在能隙，物理系统就会保持在其瞬时本征态中 [Born和Fock 1928],可以将优化算法表述为：

(1) 制备一个初始态 $|\psi$，它是已知哈密顿量 $\hat{} H_M$ 的基态。
(2) 确定一个用于建模目标函数 f 的哈密顿量 $\hat{} H_C$: $\{0,1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$，其中本征态表示输入问题的可能解。与本征态相对应的本征值体现了各个解的目标值。$\hat{}$ (3) 通过施加哈密顿量 $\hat{}H(t) = (1-t)\hat{} H_M + t\hat{}H_C$，逐步将初始态演化到 H_C 的基态，该基态对应于 f 的全局最优解。

哈密顿量 $\hat{} H_M$ 的标准选择是 $\hat{} H_M \coloneqq -\sum_{i=1}^{n} \sigma_i^x$，它具有易于制备的基态 $|+^{\otimes n}$；其中，σ_i^x 表示由 $n-1$ 个单位矩阵 I 构成的张量积，并在第 i 个位置放置泡利算符 σ_x。对于 $\hat{} H_C$，一种可能的定义是 $\hat{}H_C \coloneqq \sum_{x\in\{0,1\}^n} f(x)\ |x\ x|$，因为这显然符合上述要求。

虽然量子退火机可针对任意给定的伊辛哈密顿量[2] $\hat{} H_C = \sum_i h_i\sigma_i^z + \sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z$ 执行第 3 项中描述的过程，但要在量子门模型中实现这一时间演化（这是量子近似优化算法的基本思想），则必须使用离散化和哈密顿量模拟技术。通过迭代模拟哈密顿量 $\hat{}H(t_k)$ 的时间演化，将 $\hat{}H(t)$ 的连续时间演化离散化，其中 $t_k \in [0,1]$ 从 0 到 1 严格递增且等距，并且 $k \in \{1,\ldots,P\}$。

为在极限情况下完美近似 $P \rightarrow \infty$ 的连续时间演化，每个哈密顿量 $\hat{}H(t_k)$ 都被设定为作用 $1/p$ 的时间。然而，尤其是在 P 较小时，通常并不清楚时间演化在每个中间哈密顿量处应以多快的速度推进。在此背景下，引入与时间演化持续时长相关的参数已被证明颇有用处。随后可以利用这些参数来满足绝热定理的条件等，前提是 P 足够大。值得注意的是，针对这种参数化提出的具体实现中，两个哈密顿量各自使用独立参数：哈密顿量 $\hat{}H_C$ 使用 $\gamma_k \in \mathbb{R}$，哈密顿量 $\hat{} H_M$ 使用 $\beta_k \in \mathbb{R}$。这带来了更高的灵活性，尤其是在 P 较低的情况下。针对这些参数的优化，人们探索了许多不同的方法，其中最主要的是基于梯度的技术，例如将参数移位规则与梯度下降相结合 [Mitarai 等人 2018], ；此外，也有其他旨在快速得出结果的启发式方法，例如 COBYLA 优化器 [Powell 1994]。

因此，QAOA 算法可以理解为一种在基于门的量子计算机上模拟哈密顿量 $\hat{}H(t)$ 时间演化的算法

[1] https://ionq.com/docs/getting-started-with-native-gates

[2] 伊辛哈密顿量表示特定物理系统中的能谱。该系统由 伊辛模型 描述，这是一种统计力学中用于描述铁磁性的数学模型。该哈密顿量具有一个便捷的性质，即它与 NP 困难二次规划问题同构，因此能够自然地用于对许多有趣的优化问题进行建模。

它通过使用参数来引导时间演化速度，如图 1 所示。

3 概念

在本节中，我们将展示如何使用量子近似优化算法解决高阶连续多项式优化问题。具体而言，我们采用以下步骤：

(1) 目标函数的离散化 (2) 将目标函数转换为哈密顿量
(3) 使用量子门实现哈密顿量

3.1 目标函数的离散化

为了离散化给定的目标函数 $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ with $a < b \in \mathbb{R}$，我们需要选择合适的比特编码。为简单起见，我们选择符号-数值表示法：它先忽略整数的符号，将其映射为原生二进制编码，最后再用开头的额外一位表示符号，例如： $3_{10} \mapsto 0\,11_2$ and $-3_{10} \mapsto 1\,11_2$。此外，我们还将每个变量可能的定义域限制为 $]-2^n,\ 2^n[$，其中 $n \in \mathbb{N}$，从而避免为不平衡或远离 2 的幂次的区间采取必要的预防措施。这样一来，我们便可以通过使用标准浮点表示法，以简单直接的方式纳入整数以外的数值，并可自由选择比特分辨率 $m \in \mathbb{N}$。因此，给定的$x \in]-2^n, 2^n[$及比特分辨率 $m \in \mathbb{N}$的完整二进制编码可由以下近似表示：

$$x \approx (2x_0 - 1)\left(\sum_{i=1}^{n} 2^{n-i}x_i + \sum_{i=1}^{m} x_{n+i}2^{-i}\right) \tag{1}$$

如预期，这种离散化会得到比特串表示

$x \approx x_0\,x_1 \ldots x_n\ x_{n+1} \ldots x_{n+m}$ $\quad]-2^2,\ 2^2[\ \ni -2,75_{10} \mapsto$, , $1\,10,110_2$ $\quad m = 3$

例如，，对于比特分辨率为 的情况。不过需要注意的是，只有提高比特分辨率 m，才能逐渐逼近定义域空间的边界，而每增加一个比特，都会带来 $1/2^{m+1}$ 的提升。利用这种比特编码，我们还可以通过对每个维度分别执行上述替换过程，再将得到的比特串拼接起来，从而表示具有更高维输入空间的函数。

3.2 将目标函数转化为哈密顿量

如第 2 节所述，二元函数

$f \quad 0,1\ ^n \to \mathbb{R} \qquad H_C \coloneqq \{\}$ 与 $\sum_{x\in\ 0,1\ ^n} f\ x\ |x\quad x|$

哈密顿量之间存在原生映射，即 $\hat{}\{\}(\ )$ 。然而，如果我们只能将 f作为黑盒函数访问，这种方法的效率可能很低，因为哈密顿量可能包含指数级数量的非零项。鉴于我们能够以白盒方式访问 f，便可以更高效地执行这种映射，即将每个 $x_i \in \{0,1\}$ 替换为 $s_i \in \{-1,1\}$，如 $x_i \mapsto (s_i+1)/2$ 所示。对于输入比特之间存在高于二阶相互作用的 f（例如，包含 $\alpha \in \mathbb{R}$ 的项 $\alpha x_0x_1x_2$），二次无约束二元优化版本必须插入适当的二次化步骤。通常，在转换到自旋构型域 $\{-1,1\}$ 之前，通过向输入空间添加辅助比特和一个惩罚项来完成这一步骤函数 f，如方程 2 所示。关于这一步二次化的详细信息，我们参考了 Python 软件包 qubovert；在我们的实现中也使用了它来完成这一步骤[3]。值得注意的是，寻找能够最大限度减少所需辅助量子比特数量的最优二次化是 NP-困难问题，正如 [Boros 和 Hammer 2002] 所指出的。

$$\begin{aligned} &f(x_0,x_1,x_2) = \alpha x_0x_1x_2 \\ \mapsto\ &f(x_0,x_1,x_2,z) = \alpha z x_2 + 2\alpha\left(x_0x_1 - 2\left(x_0+x_1\right)z + 3z\right) \end{aligned} \tag{2}$$

为了将所得的自旋构型函数f，：$\{-1,\ 1\}^n \to \mathbb{R}$ 转换为量子力学哈密顿量，我们只需使用平凡映射 $s_i \mapsto \sigma_i^z$将所有自旋 s_i 替换为泡利算符。 [Farhi 等人 2014]

3.3 使用量子门实现哈密顿量

为了实现 QAOA 的量子电路，我们必须对 $\hat{}\,H_M$和 $\hat{}\,H_C$进行哈密顿量模拟。虽然 $\hat{}\,H_M$可以轻松地通过参数化的 X门进行模拟，但对于多项式无约束二元优化变体， H_C 包含高阶项（例如 $\alpha\sigma_i^z\sigma_j^z\sigma_k^z$，其中 $\alpha \in \mathbb{R}$）。正如 [Glos 等人 2022], 所指出的，这种形式的哈密顿量可以使用图2所示的通用架构进行模拟，该架构自然地从广为人知的二次情形扩展而来 $\alpha\sigma_i^z\sigma_j^z$。如果能够使用合适的多量子比特门，例如（全局）Mølmer-Sørenson 门，结合 [Nielsen 和 Chuang 2010] 的图4.19以及 [Maslov 和 Nam2018], 的图5，我们就能仅通过额外增加一个辅助量子比特，并仅需两次额外的电路操作，来模拟任意阶的泡利矩阵。由于 $\hat{}\,H_C$ 中的所有项彼此对易，哈密顿量模拟可简化为将用于实现求和符号中所有项的门依次串接起来 H_C，如图3所示。本节到此结束。

3.4 示例

现在，我们通过以下示例演示如何在实践中完成将目标函数转换为相应 QAOA电路的所有步骤：

$$f :]-2^2, 2^2[\to \mathbb{R} \tag{3}$$

$$x \mapsto x^2 + 2x \tag{4}$$

为简单起见，选择零比特分辨率 $m = 0$，比特编码如以下映射所示：

$$x \mapsto (2x_0 - 1)\left(2^1x_1 + 2^0x_2\right). \tag{5}$$

因此， f现在可以写成如下离散形式：

$$\begin{aligned} f\left(x_0,x_1,x_2\right) &= \left((2x_0-1)\left(2^1x_1+2^0x_2\right)\right)^2 \\ &\quad + 2\left(2x_0-1\right)\left(2^1x_1+2^0x_2\right) \\ &= 4\left(4x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2\right) \end{aligned} \tag{6}$$

[3] https://github.com/jtiosue/qubovert

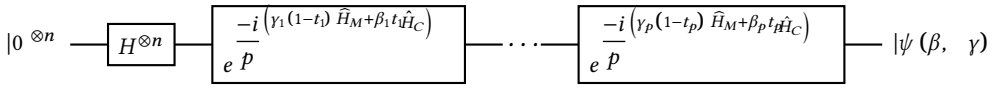
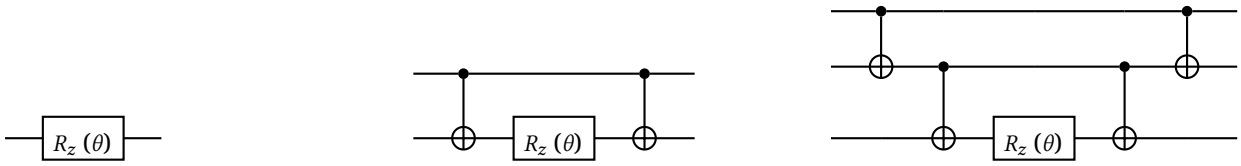


图 1：QAOA电路的一般形式。



(a) 哈密顿量模拟的 $\frac{\theta}{2}\sigma_0^z\sigma_1^z$. **(b) 哈密顿量模拟的** $\frac{\theta}{2}\sigma_0^z\sigma_1^z$. **(c) 哈密顿量模拟的** $\frac{\theta}{2}\sigma_0^z\sigma_1^z\sigma_2^z$.

图 2：成本哈密顿量 H_C 中各组成部分的哈密顿量模拟。

这随后转化为自旋构型函数 f，，如下面的方程 7 所述。

$$\begin{aligned} f'(s_0,s_1,s_2) &= 4\left(4\frac{s_0+1}{2}\frac{s_1+1}{2}+\frac{s_0+1}{2}\frac{s_2+1}{2}+\frac{s_1+1}{2}\frac{s_2+1}{2}\right) \\ &= 4\left(s_0s_1+s_0s_2+s_1s_2+2s_0+2s_1+2s_2+3\right) \end{aligned} \tag{7}$$

根据第 3.2 节所述，将自旋构型函数映射为量子哈密顿量，我们得到：

$$\hat{H}_C = 4\left(\sigma_0^z\sigma_1^z+\sigma_0^z\sigma_2^z+\sigma_1^z\sigma_2^z+2\sigma_0^z+2\sigma_1^z+2\sigma_2^z+3I^{\otimes 3}\right) \tag{8}$$

随后，我们可以使用一组包裹参数化旋转门 $R_z(\theta)$ 的 CNOT门，并将其作用于目标量子比特，从而构建用于模拟哈密顿量 H_C 的量子电路，如图 3 所示。

4 评估

为了比较量子近似优化算法在高阶连续优化函数的多项式无约束二元优化和二次无约束二元优化表述下的性能，我们对两个公认的基准函数进行了实验（见图4a和图4b）：一维 Styblinski-Tang 函数 $s(x) = (x^4-16x^2+5x)/2$（记作 1D-ST）[Styblinski和Tang 1990]，以及二维 Rosenbrock 函数 $r(x,y) = 100\left(y-x^2\right)^2+(x-1)^2$（记作 2D-Rb）[Rosenbrock 1960]。选择这两个函数，是因为它们在建模所需的量子比特数量（详情见图8）和求解难度[4]方面各不相同。由于需要指定用于搜索最优值的输入定义域，我们为 1D-ST 函数选取区间 $]-4,\ 4[$，为 2D-Rb 函数选取区间 $]-4,\ 4[^2$。这些定义域使我们能够找到每个函数的全局最优解，并在将模拟时间控制在数小时这一合理范围内的同时，考察多种不同的比特分辨率。具体而言，这些输入域允许我们考察 1D-ST 函数从 0 到 3 的比特分辨率，以及 2D-Rb 函数从 0 到 1 的比特分辨率。

下面，我们从三个标准探讨多项式无约束二元优化与 QUBO 方法之间的性能差异：

(1) 解的质量 (2) 参数训练
(3) 电路宽度和深度

对于以下所有实验，我们都使用了 Qiskit 的 qasm 模拟器、运行时间较短的 COBYLA 优化器，并将 1024 次测量作为所有电路运行的标准设置。此外，我们使用 斜坡初始化 来初始化所有参数，因为在我们的实验中，它始终表现出最佳效果。值得注意的是，斜坡初始化实际上就是为第 2 节所述的离散化哈密顿量模拟选择等间距的区间。此外，与相关工作相比，我们进行了次数非常多的 QAOA 迭代，即 $1 \le P \le 40$ 次，因为这有助于更准确地评估尺度扩展性能。

4.1 解的质量

为评估两种方法（多项式无约束二元优化和二次无约束二元优化）的解的质量，我们现在考察它们在不同位分辨率和不同 QAOA 迭代次数下的表现 P，如图 5 所示。

对于图 5a，我们选择展示一个基准结果，即比特分辨率为零时的 1D-ST 函数，因为该函数本质上是一个二次无约束二元优化问题。两个图呈现的行为非常相似，这表明对于二次函数，多项式无约束二元优化的表现与二次无约束二元优化完全相当。

观察图 5b 和图 5c 可以发现，对于高阶函数，多项式无约束二元优化方法始终优于二次无约束二元优化方法：其期望值、中位数和总体方差都显著更低。对于图 5c 所示的难度更高的 2D-Rb 函数，这一点愈发明显：随着 P 增大，二次无约束二元优化方法的表现基本趋于停滞，而多项式无约束二元优化的表现则明显受益于更高的 P。如果这一趋势在更高的 P 下仍能延续，这些结果就尤其令人鼓舞；未来的工作将对此进行探索。

尽管这些图仅展示了示例性结果，但我们的完整评估结果清楚地证实了所选图中可见的趋势。

[4]根据 Andrea Gavana 的 全局优化基准和 *AMPGO* 的结果，请参见 http://infinity77.net/global_optimization/index.html

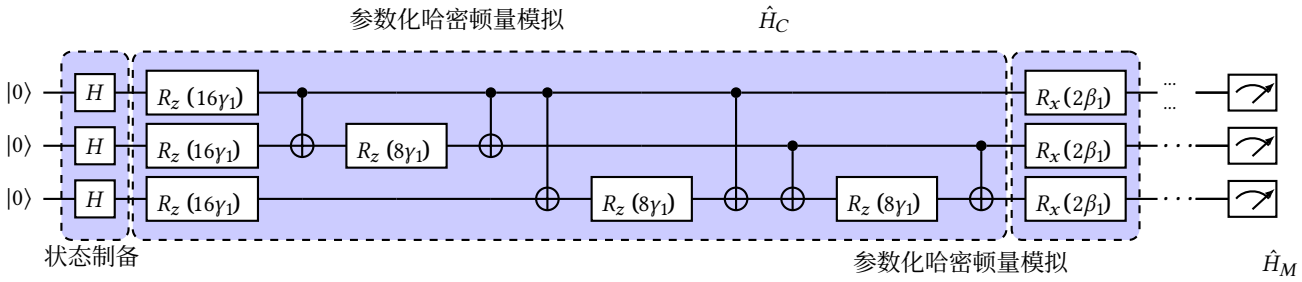
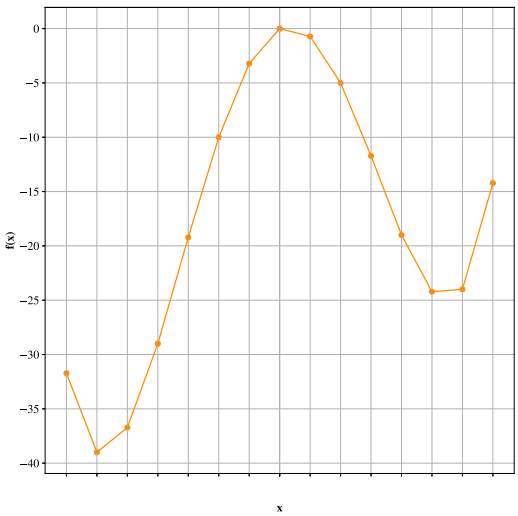
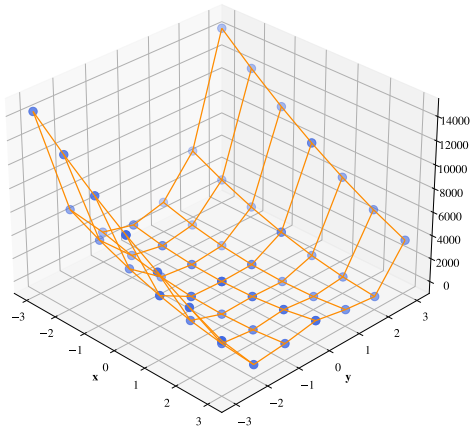


图 3：第 3.4 节示例中使用单量子比特门和 CNOT 门实现的 QAOA电路，展示了 $P = 1$次迭代。



(a) 比特分辨率为 1 时的一维 Styblinski-Tang 函数。



(b) 比特分辨率为 0 时的二维 Rosenbrock 函数。

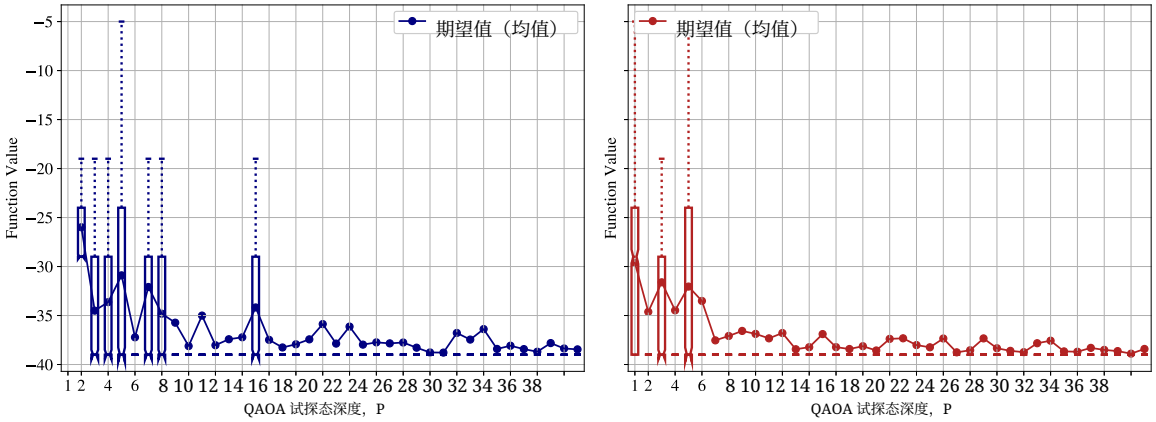
图4：用于评估的基准函数可视化结果。

4.2 参数训练

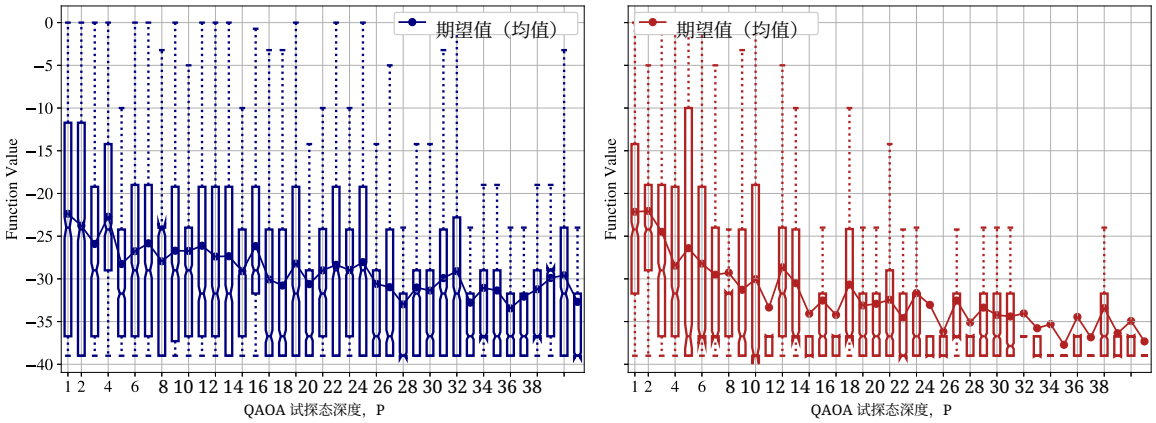
遵循 [Team 2022], 的建议，我们选择 COBYLA 优化器来训练 QAOA 参数。该优化器内置了停止准则：当最后几次优化迭代未能使目标值超过特定阈值（在我们的情况下为 $1e-4$）时，便终止学习过程。为防止此过程超出合理的执行时间，用户还可以指定最大迭代次数。我们将优化步数上限设为 1000，以利用这一功能；初步实验结果表明，几乎没有问题实例超过这一优化迭代次数。由于几乎所有参数训练都能运行至完成，这使我们能够不受该超参数影响地比较多项式无约束二元优化与二次无约束二元优化方法之间的优化步数。

如图 6 所示，考察不同 P所需的优化步数后可以发现，两种方法都需要大致相同的优化步数。总体而言，我们还可以观察到，Styblinski-Tang 函数所需的优化步数通常多于 Rosenbrock 函数。我们推测，这是因为 Rosenbrock 函数的地形较为平坦，因此训练改进更早降至阈值以下。此外，我们还可以观察到，当 QUBO 方法的解的质量不如多项式无约束二元优化时，它往往会更早减缓训练时间的增长（1D-ST 函数在比特分辨率为 3 时就是这种情况，因为该函数的曲线与图 6b 所示曲线非常相似）。

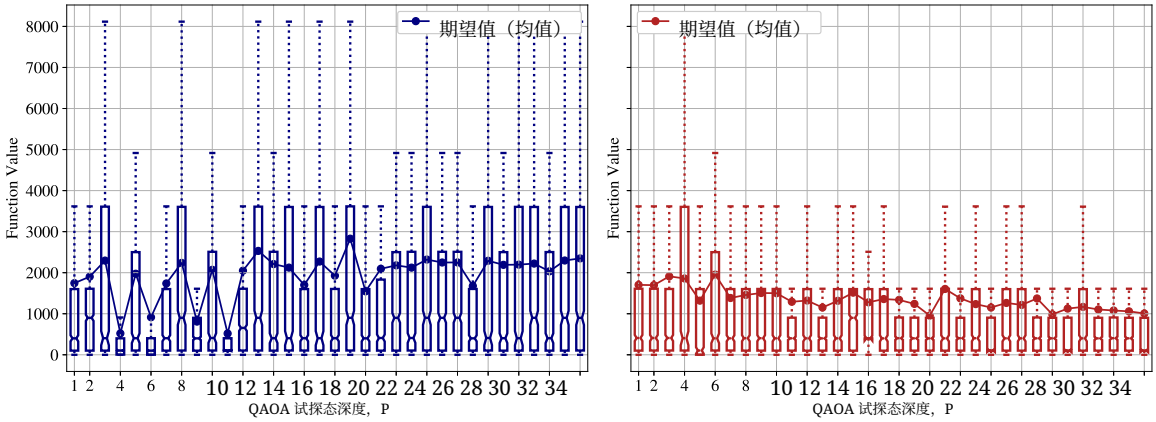
使用经典硬件模拟量子电路时，执行时间十分重要，因为它限制了使用非量子硬件能够了解其尺度行为等属性的程度。如图7所示，如果函数仅涉及少量高阶项（见图7a），训练时间不会有显著差异，而执行



(a) 比特分辨率为零时 1D-ST 函数的结果。

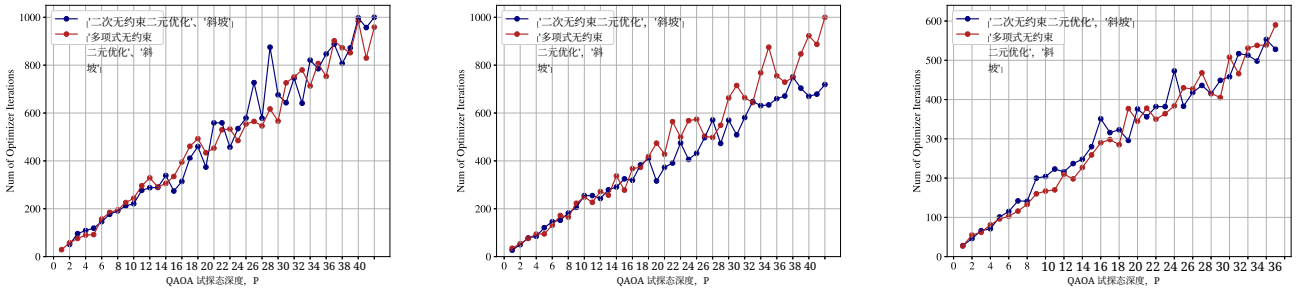


(b) 1 比特分辨率下 1D-ST 函数的结果。



(c) 比特分辨率为零时 2D-Rb 的结果。

图 5：箱线图展示了在不同 QAOA 迭代次数 P 下，使用量子近似优化算法求解 QUBO（蓝色）和 PUBO（红色）方法所获得的解的质量。Rosenbrock 函数的目标全局最小值为 0，而 Styblinski-Tang 函数的目标全局最小值为 -39.16599。



(a) 不同比特分辨率下的 1D-ST 函数 零。（b）比特分辨率为三的 1D-ST 函数。（c）比特分辨率为一的 2D-Rb 函数。 e.

图 6：不同 QAOA 迭代次数下的参数训练迭代次数 P

对于 QUBO 方法而言，随着所需量子比特数量的增加以及高阶项的增多，计算时间会大幅增长。值得注意的是，这种差异主要由所涉及的量子比特数量决定（在比特分辨率为 3 时，1D-ST 的 QUBO 表述需要 13 个量子比特，而在比特分辨率为 1 时，2D-Rb 函数的 QUBO 表述需要 17 个量子比特）。这清楚地展示了多项式无约束二元优化在经典硬件上进行模拟时的性能优势，同时也使得更深入的尺度扩展分析成为可能，而这在实践中具有很高的价值。

4.3 电路宽度与深度

要在真实硬件上执行所提出的方法，有两个关键标准：电路宽度（即量子比特数）和电路深度（即连续门操作的数量）。图8以 1D-ST 函数为例展示了这两项指标，因为该函数便于从比特分辨率的角度进行更大范围的尺度扩展分析。

在比较两种方法所需的量子比特数量之前，我们回顾一下：根据所选的离散化方式，所需的量子比特数量完全由比特深度和输入域的维度决定。对于多项式无约束二元优化，我们可以将表示输入域各维度所用的比特数相加，轻松计算所需的量子比特数量。对于二次无约束二元优化，我们可以先确定所需辅助量子比特的数量，再将其加到因二次化而使多项式无约束二元优化形式所需的量子比特数量上，从而计算总数。不过，辅助量子比特的数量很大程度上取决于具体函数和所采用的二次化技术。我们结合使用了多种不同技术，包括基于 Python 软件包 qubovert[5] 的技术以及布尔代数简化。1D-ST 函数所需的量子比特数量如图8所示。比较多项式无约束二元优化和二次无约束二元优化方法可以清楚地看到，二次无约束二元优化变体所需的量子比特数量更多；随着比特分辨率提高，该数量也逐渐增加，因为按照所选的离散化方式，三次项和四次项的数量不断累积，正如第3.1节所述。

继续考察电路深度（图8中也有展示），我们可以看到，在不具备合适门集的设备上执行时，PUBO 方法存在明显劣势：在最高复杂度下，QUBO 方法的整体电路深度上限不到 1400，而 PUBO 方法的整体深度则达到约 4000。对于当前硬件而言，电路深度显著增加，这在考虑是否将 PUBO 应用于当前含噪中等规模量子设备时构成一个重要的潜在缺点，因为门保真度是一项重要限制。不过，对于采用合适多量子比特门的未来量子计算机而言，就电路深度而言，其尺度扩展大致与 QUBO 方法相当。甚至可能需要更少的门，因为无需与辅助量子比特进行交互。另一个值得关注的优势是，PUBO 更容易使用经典电路模拟器，因为这类模拟器通常能够提供任意门集，从而允许使用更短的电路，同时所需量子比特也更少。

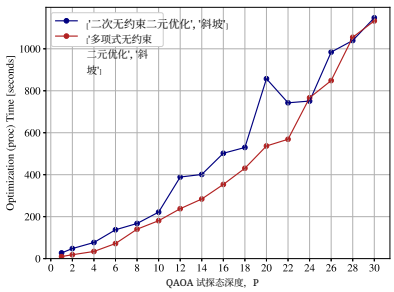
[5]https://github.com/jtiosue/qubovert

5 结论

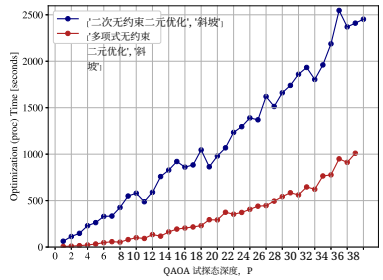
所开展的实验清楚表明，对于阶数较高的连续多项式目标函数，多项式无约束二元优化公式的结果质量优于其二次化的二次无约束二元优化等效形式。在适用的多量子比特门可用之前，这体现为所需量子比特数量（二次无约束二元优化线性增加）与电路深度（多项式无约束二元优化线性增加）之间的权衡。就参数训练步数而言，两种方法的表现相当。然而，使用量子电路模拟器时，多项式无约束二元优化公式的实际运行时间明显更优，这很可能是因为需要模拟的量子比特数量更少。对于含噪中等规模量子硬件，性能差异目前仍不明朗，应在未来的研究中加以探讨。我们预计，目标函数、输入域和比特分辨率之间的相互作用，以及它们与错误率的相互作用，将对结果起决定性作用。最后，未来我们计划将这些发现与现有的、关于使用多项式无约束二元优化解决组合优化问题的积极成果结合起来，研究多项式无约束二元优化公式在解决NP难混合整数问题时的表现。

致谢

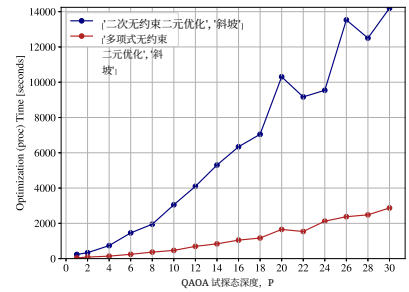
本研究部分由德国联邦经济和气候保护部项目 *QCHALLenge* (01MQ22008A) 资助。作者谨向 Johannes Kolb 对本研究所作出的贡献表示感谢。



(a) 比特分辨率为零时的 2D-Rb 函数。

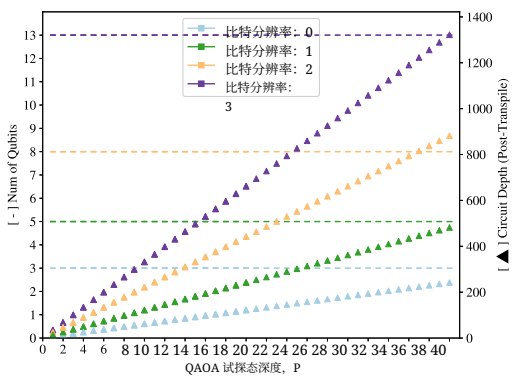


(b) 1D-ST，比特分辨率为三。

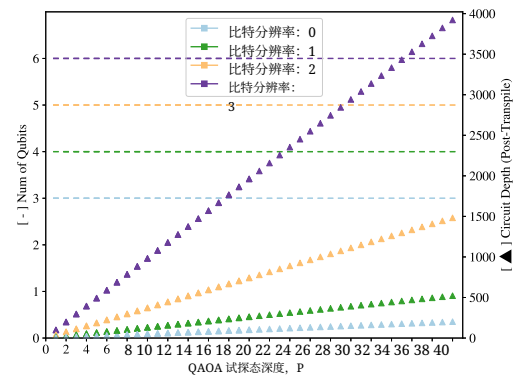


(c) 2D-Rb，比特分辨率为 1。

图7：不同 QAOA 迭代次数下 QAOA 参数的实际运行时间 P



(a) 1D-ST，二次无约束二元优化



(b) 1D-ST，多项式无约束二元优化

图8：不同 QAOA 迭代次数 P 和比特分辨率下所需的量子比特数量和电路深度。电路深度是在针对不包含受控非门以外的多量子比特门的门集进行转译后计算的。

参考文献

Tameem Albash 和 Daniel A. Lidar。2018。量子退火机相较于模拟退火的尺度扩展优势演示。《物理评论*X*》8（2018年7月），031016。第3期。https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.031016

M Born 和 V Fock 51, 3（1928），165–180。https://doi.org/10.1007/BF01343193

Endre Boros 和 Peter L. Hammer。2002。伪布尔优化。离散应用数学 123, 1 (2002), 155–225. https://doi.org/10.1016/S0166-218X(01)00341-9 Vasil S. Denchev、Sergio Boixo、Sergei V. Isakov、Nan Ding、Ryan Babbush、Vadim Smelyanskiy、John Martinis 和 Hartmut Neven。2016。有限程隧穿的计算价值是什么？《物理评论*X*》 6 (Aug 2016), 031015. 第3期。https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.031015

S. Ebadi、A. Keesling、M. Cain、T. T. Wang、H. Levine、D. Bluvstein、G. Se meghini、A. Omran、J.-G. Liu、R. Samajdar、X.-Z. Luo、B. Nash、X. Gao、B. Barak、E. Farhi、S. Sachdev、N. Gemelke、L. Zhou、S. Choi、H. Pichler、S.-T. Wang、M. Greiner、V. Vuletić 和 M. D. Lukin。2022。使用里德伯原子阵列进行最大独立集的量子优化。《科学》376，6598（2022），1209–1215。https://doi.org/10.1126/science.abo6587 arXiv:https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.abo6587 Edward Farhi、Jeffrey Goldstone 和 Sam Gutmann。2014。量子近似优化算法。arXiv:1411.4028 [quant-ph] Christodoulos A Floudas 和 Xiaoxia Lin。2005。流程调度中的混合整数线性规划：建模、算法与应用。《运筹学年刊》139，1（2005），131–162。https://doi.org/10.1007/s10479-005-3446-x Adam Glos、Aleksandra Krawiec 和 Zoltán Zimborás。2022。面向变分量子计算的空间高效二元优化。《*npj*量子信息》8，1（2022），39。https://doi.org/10.1038/s41534-022-00546-y

Dmitri Maslov 和 Yunseong Nam。2018。利用全局相互作用进行高效的量子电路构造。《新物理学杂志》20，3（2018年3月），033018。https: //doi.org/10.1088/1367-2630/aaa398

K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa，以及 K. Fujii. 2018. 量子电路学习. 《物理评论 *A*》98, 3（2018年9月）。https://doi.org/10.1103/physreva.98.032309

迈克尔·A. 量子计算与量子信息：十周年纪念版。剑桥大学出版社。https://doi.org/10.1017/CBO9780511976667

M. J. D. Powell 直接搜索优化方法：通过线性插值对目标函数和约束函数进行建模。施普林格·荷兰，多德雷赫特，51–67。https://doi.org/10.1007/978-94-015-8330-5_4

H. H. Rosenbrock。1960。一种寻找函数最大值或最小值的自动方法。计算机杂志 3, 3 (01 1960), 175–184。https://doi.org/10.1093/comjnl/3.3. 175 arXiv:https://academic.oup.com/comjnl/article-pdf/3/3/175/988633/030175.pdf Özlem Salehi、Adam Glos 和 Jarosław Adam Miszczak。2022。用于量子优化的旅行商问题变体无约束二进制模型。量子信息处理 21, 2 (feb 2022), 30 页。https://doi.org/10.1007/ s11128-021-03405-5 M.A. Styblinski 和 T.-S. Tang。1990。非凸优化实验：结合函数平滑与模拟退火的随机逼近。神经网络 3, 4 (1990), 467–483。https://doi.org/10.1016/0893-6080(90)90029-K Zsolt Tabi、Kareem H. El-Safty、Zsófia Kallus、Péter Hága、Tamás Kozsik、Adam Glos 和 Zoltán Zimborás。2020。采用空间高效嵌入进行图着色问题的量子优化。载于*2020* 年 *IEEE* 量子计算与工程国际会议（*QCE*）。56–62。https://doi.org/10.1109/QCE49297.2020. 00018 Qiskit 团队。2022。使用变分量子本征求解器模拟分子。https://qiskit.org/textbook/ch-applications/vqe-molecules.html