通过汉明重量算符实现约束感知量子优化

Yajie Hao, [1,2] Qiming Ding, [3,4,*] Xiao Yuan, [3,4,†] 和 Xiaoting Wang[1,2,‡]

[1] *Institute of Fundamental and Frontier Sciences,University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China*[2] *Key Laboratory of Quantum Physics and Photonic Quantum Information, Ministry of Education,University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China*

[3] *Center on Frontiers of Computing Studies, Peking University, Beijing 100871, China*

[4] *School of Computer Science, Peking University, Beijing 100871, China*

具有严格线性约束的约束组合优化是药物发现、电网、物流和金融等领域应用的基础，但对于经典算法而言，计算成本仍然很高，尤其是在大规模问题上。量子近似优化算法（QAOA）提供了一种颇具前景的量子框架，但传统的基于惩罚项的形式会扭曲优化景观，并需要较深的量子电路，从而削弱其在近期量子硬件上的可扩展性。在这项工作中，我们提出汉明重量算符这一类新型约束感知算符，使量子演化严格局限于可行子空间之内。基于这一思路，我们开发了自适应汉明重量算子 QAOA，可动态选择最有效的算符，以构建浅层、针对问题定制的量子电路。我们在金融和高能物理领域的基准任务上验证了这一方法，具体包括投资组合优化以及具有能量平衡约束的双喷注聚类。在这些问题中，我们的方法从设计上便能自然满足所有约束，收敛速度更快，且取得了高于基于惩罚的QAOA的近似比，同时所需量子门约减少一半。通过将约束感知算符融入自适应变分框架，我们的方法为在近期量子设备上求解实际约束优化问题，开辟了一条可扩展且硬件高效的途径。

arXiv:2601.01516v1 [quant-ph] 4 Jan 2026

I. 引言

组合优化旨在寻找能够使目标函数最小化或最大化的二进制赋值，是投资组合优化、设施选址、项目调度、政治选区划分、能源系统、路径规划、物流和金融等关键应用的核心。然而，这类问题通常是 NP-hard 的，要获得精确解需要指数级的经典计算资源 [1–12]。量子计算已展现出解决各类优化问题中此类挑战的潜力 [13–24]。在最具代表性的方法中，量子近似优化算法（QAOA）已成为组合优化领域的主要框架之一 [25–39]。QAOA 将组合优化问题映射为伊辛哈密顿量，并采用变分量子-经典循环，利用量子叠加和干涉并行探索广阔的解空间，同时通过电路深度权衡精度与可行性 [40–50]。尽管大规模量子优势尚未得到证实，QAOA 在某些问题上的表现已可媲美甚至超越领先的经典启发式算法，使其成为近期实现实用量子优化的有力候选方案 [51–65]。

然而，将量子近似优化算法应用于约束问题时，会遇到两个主要瓶颈。首先，施加线性约束的传统方法——向代价哈密顿量中添加惩罚项——会扭曲优化景观，使性能对初始化高度敏感，并妨碍可靠收敛 {v1}–{v2}。惩罚因子必须经过精细调节：取值过小无法确保可行性，取值过大则会形成陡峭、崎岖的能量景观，可能引发贫瘠高原并严重妨碍收敛 [69–71]。其次，量子近似优化算法所需的电路深度会随问题规模迅速增长，从而放大量子噪声的影响，限制其近期应用 [28, 29, 72–74]。这一挑战在约束场景中尤为突出，因为惩罚哈密顿量往往会转化为深度大、资源消耗高的电路，进一步增加量子门数量。因此，要充分释放量子近似优化算法在含噪声中等规模量子设备上的潜力，亟需一种可扩展且资源高效的替代方案 [13, 75–80]。

为应对这些挑战，我们提出了一种根本不同的范式：我们不再惩罚不可行状态，而是设计一种完全限制在可行子空间内的量子演化。这是通过一类新颖的算子——汉明重量算符——实现的，它们充当约束感知混合算符，仅连接有效解。基于这一基础，我们提出自适应汉明重量算符量子近似优化算法（AHWO-QAOA）。受 ADAPT-VQE 框架的启发 [81, 82], , AHWO-QAOA 通过从预定义的算子池中自适应地选择最有效的汉明重量算符，迭代构建浅层、针对问题定制的拟设，从而同时确保满足约束并提高资源效率。

我们通过对基准投资组合优化问题进行大规模数值模拟，验证了 AHWO-QAOA 的性能，

* dqiming94@pku.edu.cn
† xiaoyuan@pku.edu.cn
‡ xiaoting@uestc.edu.cn

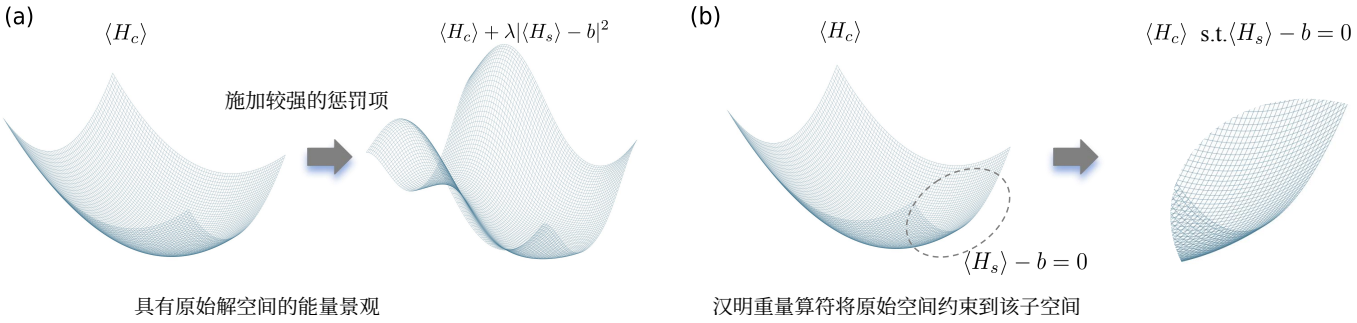


图1. 在量子近似优化算法中施加约束时，基于惩罚的方法与汉明重量算符方法的比较。(a) 基于惩罚的QAOA通过陡峭的势垒扭曲能量景观。(b) 汉明重量算符直接将演化限制在可行子空间内，从而保持稳定性和效率。

问题规模最高达 20 个量子比特；此外，我们还在高能物理中的双喷注聚类能量平衡任务上进行了验证。结果表明，相较于传统的基于惩罚项的方法，我们的方法具有三项显著优势：（i）保证可行性，所有线性约束在构造时均得到满足；（ii）加速收敛，只需显著更少的迭代次数即可获得高质量解；（iii）降低资源需求，AHWO-QAOA 使用的基本量子门数量几乎减少一半，同时取得更高的近似比。通过在金融和受物理启发的基准测试中验证其性能，AHWO-QAOA 提供了一个兼具约束感知、快速收敛和硬件高效性的框架，从而为近期量子设备上的可扩展约束优化奠定了必要基础，并为在各类现实应用中切实展示量子优势铺平了道路。

II. 带线性约束的组合优化

组合优化问题构成了一类核心计算挑战，其中决策变量为二进制变量（$x_i \in \{0,1\}$），并且必须满足特定约束。这类问题自然出现在许多实际场景中，例如金融、物流和电信领域，在这些场景中，离散决策与有限资源相互关联。形式上，该问题可表示为

$$\begin{aligned} &\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} \mu_{ij} x_i x_j + \sum_k \eta_k x_k, \\ &\text{s.t.} \sum_i \omega_i x_i = b. \end{aligned} \tag{1}$$

其中，$\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ 是二元决策变量，μ_{ij} 表示成对相互作用项（例如相关性或冲突），η_k 编码单变量贡献（例如成本或收益），ω_i 是整数权重，而b 是固定整数常数。

这种形式的线性约束在实践中十分常见，广泛存在于各个领域。例如，在金融领域，投资组合优化需要在固定预算下选择一组资产，其中 x_i 表示是否纳入资产 i，ω_i 表示其成本，b表示总预算 [83–85]。在物流和调度问题中，例如车辆路径规划或作业车间调度，ω_i 可以表示所需容量或处理时间，而 b 对应可用资源总量 [86–89]。在电信和网络设计中，信道或频率分配问题会受到带宽约束，其中 ω_i 表示带宽消耗，b表示总体频谱容量 [90–92]。类似地，在制造系统或云计算中，ω_i 可以表示任务的资源使用量，b表示整个系统的容量 [93, 94]。

此类问题通常是 NP 困难的，会给经典算法带来重大挑战，尤其是在问题规模和约束数量都增加时 [22, 74]。因此，有必要探索量子算法（例如量子近似优化算法），以期更高效地解决受约束组合优化问题。

为使用量子近似优化算法求解方程 (1) 中的受约束组合优化问题，我们首先通过 $x_i \mapsto (\mathbf{1} - \sigma_z^i)/2$ 将经典二进制变量映射为量子算符，其中 σ_z^i 是作用于量子比特i上的 Pauli-Z 算子。在此映射下，成本函数表示为代价哈密顿量

$$H_c = \frac{1}{4} \sum_{i,j} \mu_{ij} (\mathbf{1} - \sigma_z^i)(\mathbf{1} - \sigma_z^j) + \frac{1}{2} \sum_k \eta_k (\mathbf{1} - \sigma_z^k), \tag{2}$$

而线性约束则编码为

$$H_s = \sum_i \omega_i \frac{\mathbf{1} - \sigma_z^i}{2}. \tag{3}$$

目标是制备一个变分量子态

$|\psi(\boldsymbol{\gamma},\ \boldsymbol{\beta})\rangle$ 使用量子近似优化算法，使得

$$\begin{aligned} &\min\ \langle\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})|\, H_c\,|\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})\rangle\,, \\ &\text{s.t.}\quad \langle\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})|\, H_s\,|\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})\rangle = b. \end{aligned} \tag{4}$$

其中包含 p 层的变分态为

$$|\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})\rangle = \prod_{l=1}^{p} e^{-i\beta_l H_m} e^{-i\gamma_l H_c}\,|\psi_0\rangle\,, \tag{5}$$

由角度 $\boldsymbol{\gamma}=\{\gamma_1,\ldots,\gamma_p\}$ 和 $\boldsymbol{\beta}=\{\beta_1,\ldots,\beta_p\}$以及初始态 $|\psi_0\rangle=|+\rangle^{\otimes n}$参数化。这些变分参数分别控制在 H_c 和 $H_m=\sum_{i=1}^{n}\sigma_x^i$下的演化时间。一种称为多角度或全参数量子近似优化算法（ma-QAOA/FP-QAOA）的扩展变体 [95, 96], 能够有效减少层数，但代价是增加每层需要优化的参数数量。除非另有说明，本文的所有模拟均采用这种全参数形式。

在实践中，通常通过惩罚方法将约束纳入优化。由此得到的增广损失函数为

$$\begin{aligned} L(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta}) =& \langle\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})|\, H_c\,|\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})\rangle \\ &+ \lambda|\,\langle\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})|\, H_s\,|\psi(\boldsymbol{\gamma},\boldsymbol{\beta})\rangle - b|^2, \end{aligned} \tag{6}$$

其中，$\lambda \gg 1$ 是一个惩罚因子，用于确保约束得到满足。

尽管这种基于惩罚项的形式在概念上简单明了，但仍存在显著缺陷。较小的λ 可能导致违反约束的不可行解，而过大的 λ 则会造成病态的优化景观，阻碍收敛并引发不稳定，如图1(a)所示。此外，较大的惩罚因子通常需要更深的量子电路和更长的优化时间，从而增加计算成本 [69–71]。这些局限性暴露了基于惩罚的QAOA的脆弱性，并促使人们开发更有效处理约束的替代方法。

III. 自适应汉明重量算符量子近似优化算法

在上一节中，我们使用带有惩罚项的 QAOA 求解了受约束的组合优化问题。尽管这种方法简单直接，却存在稳定性差、效率低的问题，因为优化过程对惩罚因子的选择高度敏感。为克服这些局限，我们提出一种替代策略：将线性约束直接嵌入混合哈密顿量中。这样便无需惩罚项，并能确保变分态始终严格处于可行子空间内，从而提高稳定性和效率。

A. 汉明重量算子

我们从一般形式的线性约束开始：

$$\sum_i \omega_i x_i = b, \quad \omega_i \in \mathbb{Z}. \tag{7}$$

此类约束通常会在 $\{\omega_i\}$的子集之间诱导出多个关系，我们将其称为汉明重量方程：

$$\sum_{r=1}^{n}\omega_{i_r} = \sum_{k=1}^{m}\omega_{j_k} \le b, \tag{8}$$

其中，$\{i_r\}$和 $\{j_k\}$是互不相交的索引集。

例如，设 $\omega_1=1$，$\omega_2=2$，$\omega_3=2$，ω_4 =3，$\omega_5=5$，其中 $b=4$。诱导关系为

$$\omega_1+\omega_4=\omega_2+\omega_3, \quad \omega_1+\omega_2=\omega_4, \quad \omega_2=\omega_3,$$

每次交换都会产生可行态交换。例如，对于 $\omega_1+\omega_4=\omega_2+\omega_3$，$|1001\ldots\rangle$ 和 $|0110\ldots\rangle$ 都是可行的。同样，对于 $\omega_1+\omega_2=\omega_4$，如果 $|11\ldots0_4\ldots\rangle$ 可行，那么 $|00\ldots1_4\ldots\rangle$ 也可行。这种交换下的不变性就是我们所说的汉明重量不变性。

为利用这一性质，我们引入汉明重量算符。对于式（8），其定义为

$$\begin{aligned} M =& \prod_{r=1}^{n}\prod_{k=1}^{m}\left(\sigma_x^{i_r}+i\sigma_y^{i_r}\right)\left(\sigma_x^{j_k}-i\sigma_y^{j_k}\right) \\ &+ \prod_{r=1}^{n}\prod_{k=1}^{m}\left(\sigma_x^{i_r}-i\sigma_y^{i_r}\right)\left(\sigma_x^{j_k}+i\sigma_y^{j_k}\right), \end{aligned} \tag{9}$$

其作用为

$$\begin{aligned} M\,|\ldots0_{i_1}\ldots0_{i_n}\ldots1_{j_1}\ldots1_{j_m}\rangle &= |\ldots1_{i_1}\ldots1_{i_n}\ldots0_{j_1}\ldots0_{j_m}\rangle\,, \\ M\,|\ldots1_{i_1}\ldots1_{i_n}\ldots0_{j_1}\ldots0_{j_m}\rangle &= |\ldots0_{i_1}\ldots0_{i_n}\ldots1_{j_1}\ldots1_{j_m}\rangle\,, \\ M\,|\text{others}\rangle &= 0. \end{aligned} \tag{10}$$

因此，M 会交换可行基态，同时湮灭不可行态，从而确保动力学始终局限于约束子空间。对于满足约束的任意可行态 $|\psi_s\rangle$，变换后的状态

$$e^{-i\sum M}\,|\psi_s\rangle\,, \tag{11}$$

仍是可行态，因此可以在不违反线性约束的情况下探索受约束子空间。

该算子是一种广义交换类构造。在权重相等的双量子比特情形下，式（9）化为熟悉的形式 $\sigma_x^p\sigma_x^q+\sigma_y^p\sigma_y^q$ [30, 97]。因此，汉明重量算符将 XX+YY 算子推广到了更高维度。

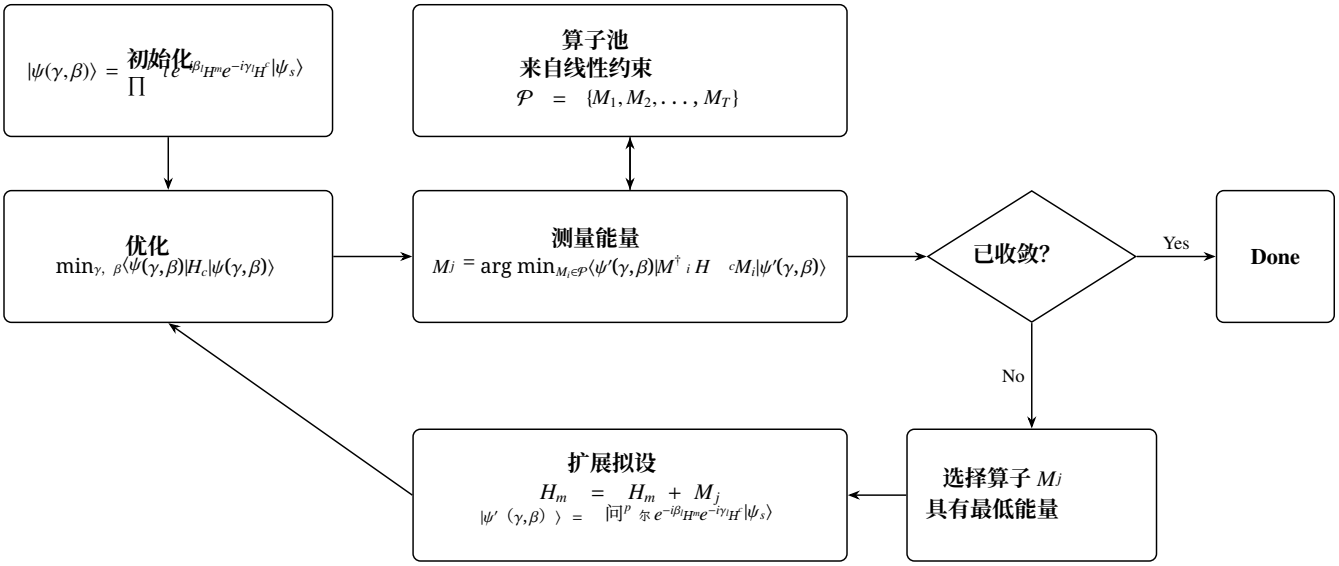


图 2. AHWO-QAOA 的工作流程。算法首先使用当前的代价哈密顿量 H_c 和混合哈密顿量 H_m 初始化变分态。根据线性约束构造算子池 $\mathcal{P} = \{M_1, M_2, \ldots, M_T\}$。在每次迭代中，评估候选算子的能量贡献，并选出贡献最大的算子（能量最低）。随后将选定的算子纳入混合哈密顿量并进行更新，相应地扩展变分拟设。该自适应过程持续进行，直至收敛，从而在保持约束满足的同时降低电路深度。

B. 汉明重量算子 QAOA

基于上述内容，可以对量子近似优化算法进行重新表述，以纳入汉明重量算符。对于式 (1) 中给定的未优化问题，我们首先检验所有导出的汉明重量方程，并构造相应的算符 M_k。修改后的混合哈密顿量和变分态为

$$
\begin{aligned}
H_m &= \sum_{i \notin \mathbf{c}} \sigma_x^i + \sum_t M_t, \\
|\psi(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})\rangle &= \prod_{l=1}^{p} e^{-i\beta_l H_m} e^{-i\gamma_l H_c} \, |\psi_s\rangle \,,
\end{aligned}
\tag{12}
$$

其中$\mathbf{c}$是受约束量子比特的集合。根据构造，$|\psi(\boldsymbol{\gamma},\ \boldsymbol{\beta})\rangle$ 始终处于可行子空间中。

优化目标为

$$
F(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \langle \psi(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) | \, H_c \, | \psi(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) \rangle \,. \tag{13}
$$

这种方法将线性约束直接编码到拟设中，避免了惩罚项，并且与式 (6) 相比提高了稳定性。

C. 自适应汉明重量算子量子近似优化算法

尽管汉明重量算符 QAOA 能确保可行性，但随着方程数量增加，电路深度可能大幅增长，因为每个方程都会添加一个非平凡算子 {v1}。

为此，我们提出自适应汉明重量算子 QAOA（AHWO-QAOA）。

受 ADAPT-VQE 启发，我们从所有候选算子中构建算子池 $\mathcal{P} = \{M_1, M_2, \ldots, M_T\}$。在训练过程中，根据各算子对降低代价哈密顿量的贡献自适应地选择算子。在每次迭代中，根据产生的能量评估候选算子，并选择能够得到最低能量的算子，将其纳入拟设。该过程重复进行，直至收敛，如图 2 所示。

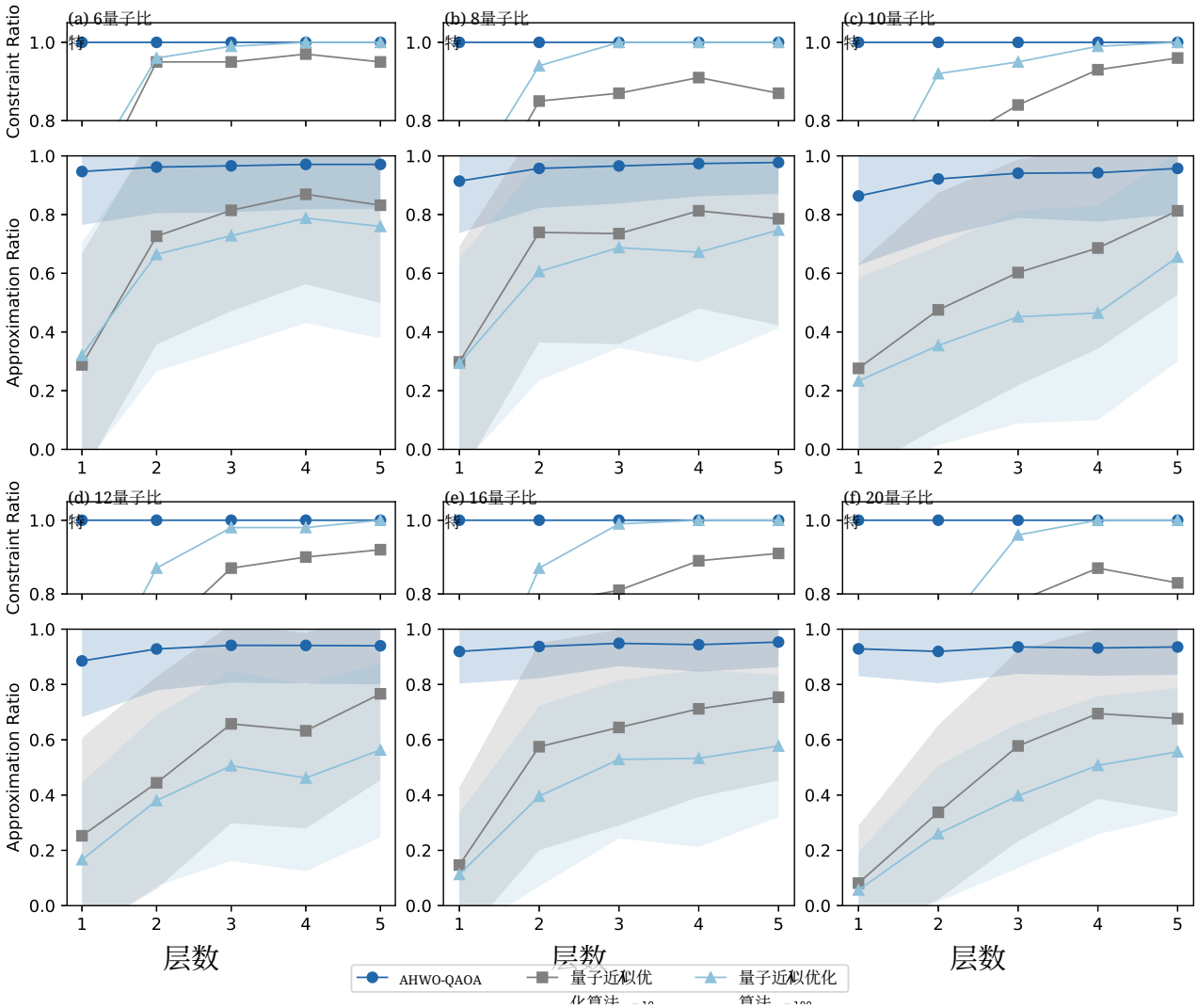


图 3. AHWO-QAOA 与基于惩罚的 QAOA 在惩罚因子 $\lambda = 10$ 和 $\lambda = 100$下的性能比较。各面板对应的系统规模分别为：(a) 6 个量子比特，(b) 8 个量子比特，(c) 10 个量子比特，(d) 12 个量子比特，(e) 16 个量子比特，以及 (f) 20 个量子比特。上方图表显示约束比率，即满足线性约束的测试用例所占百分比；下方图表显示近似比，其定义为 $1 - |\langle H_c \rangle - E_0|/|E_0|$，并在 $\langle H_s \rangle \neq b$ 时设为零。每种系统规模的结果均取 100 个随机生成的问题实例的平均值。基于惩罚的 QAOA 在近似性能与约束满足之间存在权衡：较小的 λ会带来更高的近似比，但可行性较差；较大的 λ 则能强制满足约束，但会牺牲性能。相比之下，AHWO-QAOA 在所有问题规模下始终满足全部约束，并且即使使用浅层电路（例如，20 个量子比特时仅用一层）也能获得更高的近似比，展现出良好的可扩展性。

使用多项式时间前缀搜索，其最坏情况复杂度为 $O(n^2)$；其详细构造与分析见附录 A。

因此，AHWO-QAOA 能够动态平衡表达能力与资源效率。通过剪除冗余算子，它在保持约束满足的同时，构建出更浅的量子电路，并且往往能提升优化性能，因此特别适用于近期量子设备。

D. 与其他量子近似优化算法变体的兼容性

尽管本文的数值实验采用多角度 QAOA [95, 96] 作为主要基线，但需要强调的是，近年来已有众多增强型QAOA变体被提出，旨在提升收敛速度、避免贫瘠高原或降低电路复杂度。代表性示例包括 DC-QAOA [26, 73], GM-QAOA [31], 量子随机失活 [98], WS-QAOA [34], 递归 QAOA [29], , 以及近期文献中提出的若干其他变体 [56]。

这些变体对交替算子框架的不同组成部分进行调整，例如参数调度、测量策略、逐层耦合结构或梯度估计，但仍沿用代价哈密顿量与混合哈密顿量之间的标准划分。相比之下，我们的 AHWO-QAOA 仅对混合器进行修改，以保约束汉明重量算符取代单量子比特 X 操作。

由于 AHWO-QAOA 仅修改混合器的结构，而保持代价哈密顿量和变分训练协议不变，因此它与上述变体相互独立且完全兼容。也就是说，本文提出的约束保持混合器原则上可以与其他量子近似优化算法改进方法相结合，例如动态耦合、热启动、递归结构或基于 dropout 的训练。从这个意义上说，AHWO-QAOA 提供了一种模块化升级方案，通过构造即确保可行性，并且可以在广泛的量子近似优化算法框架中直接替代标准混合器。

IV. 应用

A. 投资组合优化

式（1）所示约束组合优化问题的一个代表性实例，出现在金融市场中的投资组合优化场景中。在此问题中，投资者必须从候选资产池中选择一个子集，以最小化投资风险或最大化预期收益，同时满足严格的预算约束。

我们定义二元决策变量 $\{x_i\}$ (i =1、2、.....、n)，其中 $x_i = 1$ 表示将资产 i 纳入投资组合，否则则不纳入。二次系数 μ_{ij} 反映资产 i 与 j之间的两两相关性，体现分散化效应或联合风险贡献。线性系数 η_k 编码了选择资产 k的预期收益或个体风险。因此，目标函数在投资组合的风险与收益之间进行权衡：

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} \mu_{ij} x_i x_j + \sum_k \eta_k x_k.$$

施加严格的预算约束：

$$\sum_i \omega_i x_i = b,$$

其中，ω_i 表示资产i 的成本（例如，标准化价格），b 表示可用预算。这可确保总投资不超过投资者的可用资金。

这类公式广泛应用于金融工程。例如，在构建股票投资组合时，ω_i 可能对应于购买一份股票份额所需的资本 i，而 η_k 则根据历史预期收益得出。二次项 μ_{ij} 对资产协方差进行建模，惩罚高度相关的选择并促进分散化。由此产生的优化问题既具有实际意义，又在计算上颇具挑战性，因为它结合了二元决策变量与严格的线性约束。这使投资组合优化成为评估所提出 AHWO-QAOA 有效性的现实基准。

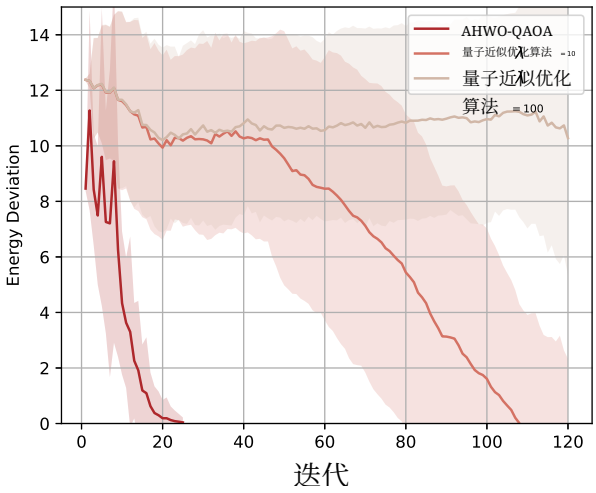


图 4。AHWO-QAOA 与惩罚因子为 $\lambda = 10$ 和 $\lambda = 100$ 的基于惩罚的QAOA 在 12 量子比特实例上的收敛行为对比。纵轴表示能量偏差，其定义为 $|\langle H_c\rangle - E_0|$，其中 $\langle H_c\rangle$ 为代价哈密顿量的期望值，E_0 为其基态能量。每条曲线表示变分参数经过 100 次随机初始化后的均值，阴影区域表示各次试验间的方差。基于惩罚的QAOA 收敛缓慢且波动较大，尤其是在早期迭代中，这反映出其稳定性较差。相比之下，AHWO-QAOA 收敛速度显著更快，由于其自适应机制，仅在初始迭代中出现轻微波动，并迅速趋于稳定，在更少的迭代次数内实现收敛。

为评估性能，我们模拟了规模为 $n \in \{6, 8, 10, 12, 16, 20\}$ 个量子比特的问题实例。对于每种规模，我们使用随机系数 μ_{ij} 和 η_k 生成了 100 个相互独立的问题实例，并随机选择了与式 (1) 一致的线性约束。变分参数 γ 和 β 在区间 $(-0.1,\ 0。1)$ 内均匀随机初始化。

约束满足与近似质量。我们首先比较了 AHWO-QAOA 与基于惩罚的 QAOA，惩罚因子分别为 $\lambda = 10$ 和 $\lambda = 100$。近似比定义为

$$\text{Approximation Ratio} = 1 - \frac{|\langle H_c\rangle - E_0|}{|E_0|},$$

其中 E_0 是 H_c的基态能量。为突出可行性，在 $\langle H_s\rangle \neq b$ 时，该比率设为零。我们还测量了约束比率，即

满足约束的测试用例所占的比例。

如图 3 所示，基于惩罚的QAOA存在一种权衡：较小的 λ 会带来更高的近似比，但约束满足效果较差；较大的 λ 则能确保可行性，但会牺牲近似质量。相比之下，AHWO-QAOA始终满足所有约束，并且在各种系统规模下都能保持出色的近似性能，即使仅使用单层且处理多达 20 个量子比特的系统也是如此，展现出显著的可扩展性。

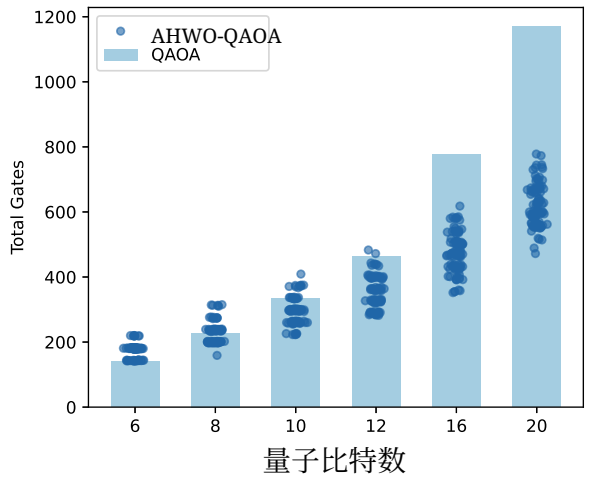


图 5. AHWO-QAOA（1 *ansatz* 层）与基于惩罚的QAOA（5 *ansatz* 层）的量子资源需求比较。纵轴表示量子门总数，横轴表示量子比特数。柱形表示基于惩罚的QAOA，圆点则表示在 100 个随机生成的问题实例中，AHWO-QAOA 的结果。结果表明，基于惩罚的QAOA的量子门数量会随系统规模迅速增长，而AHWO-QAOA始终需要更少的量子门。在 20 个量子比特时，AHWO-QAOA所用的量子门数量约为基于惩罚的QAOA的一半，同时在近似比和约束满足方面表现更优，从而显著降低量子资源成本。

收敛行为。随后，我们使用 100 次随机初始化，分析了一个具有代表性的 12 量子比特实例的收敛情况。如图 4 所示，基于惩罚的QAOA收敛缓慢，且方差较大，反映出其稳定性不足。相比之下，AHWO-QAOA的收敛速度显著更快。尽管由于自适应机制，早期迭代中会出现轻微波动，但该方法很快便趋于稳定并平滑收敛，所需迭代次数也少得多。这表明它具有更优越的收敛特性。

量子资源需求。最后，我们比较了资源成本。从上述结果可以看出，仅使用一层的 AHWO-QAOA 在近似比和约束满足方面已优于使用五层的基于惩罚的QAOA。因此，为了进行公平的资源比较，我们评估了AHWO-QAOA（一层）与基于惩罚的QAOA（五层）。

如图 5 所示，基于惩罚的QAOA所需的量子门数量随系统规模迅速增长，而 AHWO-QAOA 始终只需更少的量子门。在 20 个量子比特时，AHWO-QAOA 使用的量子门数量约为其一半，同时仍能取得更优的性能。这表明，AHWO-QAOA 不仅提高了准确性和稳定性，还大幅降低了量子资源成本。

B. 具有能量平衡的双喷注聚类 nce

式 (1) 中受约束组合优化问题的另一个代表性实例出现在高能物理的喷注聚类场景中。具体而言，我们考虑双喷注划分任务，目标是将一次 e^+e^- 碰撞产生的末态粒子分配到两个喷注中，并使其符合底层部分子过程（例如，$H \to s\bar{s}$）[99, 100]。

我们定义二元决策变量 $\{x_i\}$ (i =1、2、.....、n)，其中 $x_i = 1$ 表示将粒子 i 分配给喷注 A，而 $x_i = 0$ 表示将其分配给喷注 B。二次系数 μ_{ij} 对粒子 i 与 j 之间的角分离进行编码，反映出张角较大的粒子更有可能源自不同的喷注。因此，目标函数最大化喷注间分离，类似于 Max-Cut 表述：

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} \mu_{ij} x_i (1 - x_j).$$

除角度目标外，还施加严格的线性约束，以确保两个喷注之间的能量平衡：

$$\sum_i \epsilon_i x_i = \tfrac{1}{2} \sum_i \epsilon_i,$$

其中，ϵ_i 表示粒子 i 的测量能量，由实验数据或蒙特卡罗事件模拟提供。该约束确保喷注 A 携带的可见能量等于喷注 B 携带的可见能量，这与质心系中二体衰变的预期一致。

这一表述具有充分的物理依据。例如，在 $e^+e^- \to ZH$ 事件中，对于 $H \to s\bar{s}$，希格斯玻色子衰变为两个近乎背对背、能量相近的部分子。二次项 μ_{ij} 刻画了末态的角几何，而线性约束则强制满足能量守恒，并抑制一个喷注吸收几乎全部高能粒子这类非物理解。总体而言，该问题将二元喷注分配变量与硬线性约束结合起来，因而既具有实际意义，又在计算上颇具挑战性，是评估 AHWO-QAOA 的有意义基准。

为了进一步评估所提出的约束保持混合器的有效性，我们加入一项额外的

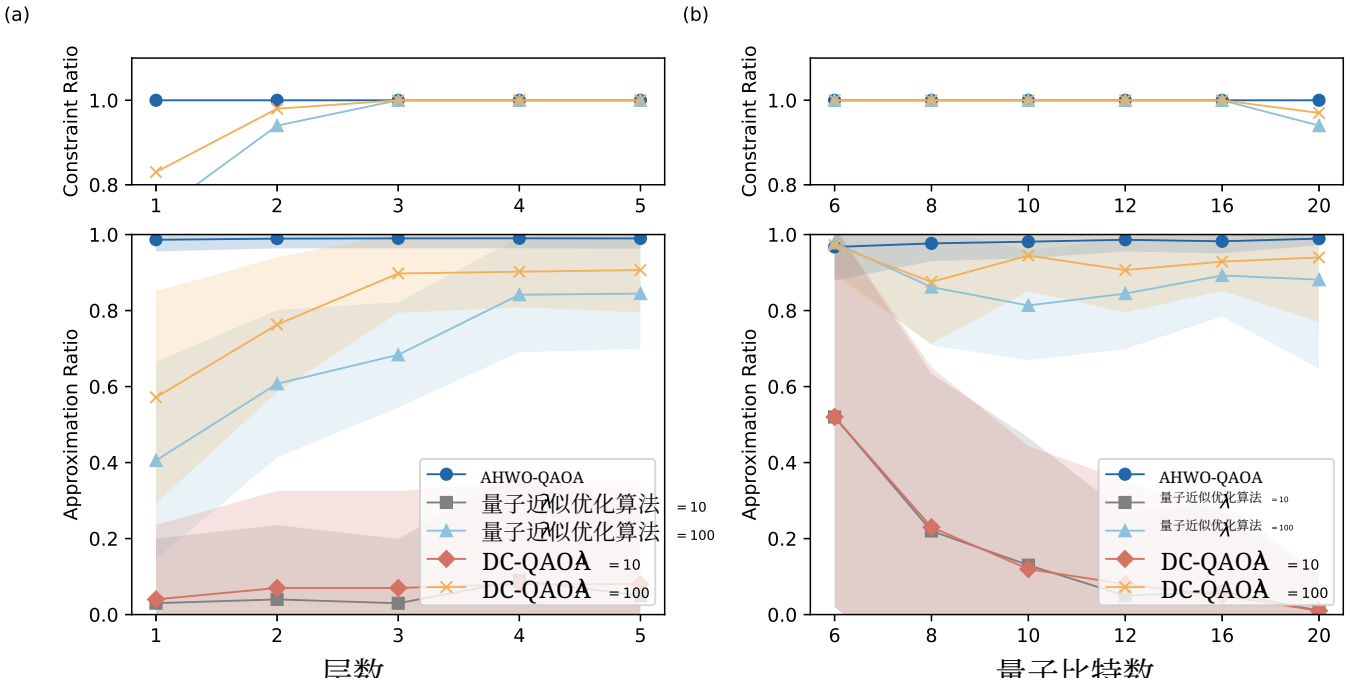


图 6. 自适应汉明重量算符量子近似优化算法（AHWO-QAOA）、基于惩罚的QAOA和基于惩罚的DC-QAOA在双喷注能量平衡问题上的性能比较。（a）固定为 12 个量子比特，将变分拟设层数从 1 层变化至 5 层。（b）AHWO-QAOA 固定为 1 个试探层，基于惩罚的基线方法固定为 5 个试探层，量子比特数在 $\{6, 8, 10, 12, 16, 20\}$ 中变化。上方各图展示约束比率（满足线性约束的解所占比例），下方各图展示近似比。在所有设置下，AHWO-QAOA 始终满足全部约束，并以显著更浅的量子电路实现更高的近似比。比较结果进一步表明，AHWO-QAOA 的性能优于基于惩罚的QAOA和增强型基于惩罚的DC-QAOA，证明了在混合器中直接施加线性约束的有效性。

比较，在双喷注聚类基准问题上，将其与一种具有代表性的增强型QAOA变体——DC-QAOA——进行对比。原则上，此类变体可应用于本文考察的两个基准问题，但此处我们选择DC-QAOA，因为它是近期文献中广泛讨论的增强型QAOA方法之一。因此，本小节在相同设置下比较基于惩罚的QAOA、基于惩罚的DC-QAOA，以及我们提出的约束保持型AHWO-QAOA，并提供补充基线，以说明在混合器中直接施加线性约束所带来的实际优势。

为评估性能，我们针对问题规模从 $n = 6$ 到 $n = 20$ 个量子比特的实例进行了模拟。每个实例均使用随机角系数 μ_{ij} 和粒子能量 ϵ_i 生成。与投资组合优化研究一样，我们将 AHWO-QAOA 与采用惩罚因子 $\lambda = 10$ 和 $\lambda = 100$ 的基于惩罚的量子近似优化算法进行了比较；此外，我们还纳入了文献近期讨论的一种代表性增强变体——基于惩罚的 DC-QAOA。图 6 总结了结果。面板 (a) 将系统规模固定为 12 个量子比特，并将拟设层数从 1 层调整至 5 层；面板 (b) 则将 AHWO-QAOA 的深度固定为 1 层，将基线方法（量子近似优化算法和 DC-QAOA）的深度固定为 5 层，以便在不同系统规模之间进行公平比较。上方各面板报告约束比率，下方各面板显示近似比。

除了在约束满足和近似质量方面的优势外，AHWO-QAOA 在收敛速度和资源效率方面也展现出明显优势。对于一个包含 12 个量子比特的实例，单层 AHWO-QAOA 平均约经过 30 次迭代即可收敛；相比之下，带有$\lambda = 10$的五层基于惩罚的QAOA约需 90 次迭代，带有 $\lambda = 100$ 时则超过 410 次迭代，而基于惩罚的 DC-QAOA 也呈现出类似的较慢收敛趋势。在电路成本方面，对于 20 个量子比特，AHWO-QAOA 仅需约 470 个量子门，而基于惩罚的基线方法则需要深得多的量子电路（例如，五层量子近似优化算法约需 1270 个量子门）；由于额外加入了反绝热项，DC-QAOA 的电路成本也相当，甚至更高。这些结果表明，AHWO-QAOA 不仅收敛更快、更稳定，而且与基于惩罚项的方法相比，量子门数量减少了一半以上。

总之，AHWO-QAOA 始终满足所有约束，并以显著更浅的量子电路实现接近最优的近似比；而基于惩罚的 QAOA和基于惩罚的DC-QAOA则面临可行性、准确性与电路深度之间的权衡。随着系统规模不断增大，这些优势会愈发明

显，从而凸显 AHWO-QAOA 在高能物理中现实约束优化任务上的可扩展性和硬件效率。

V. 结论

在本研究中，我们提出了 AHWO-QAOA，这是一种旨在解决带线性约束的组合优化中一个根本问题的框架：依赖资源消耗大且不稳定的惩罚方法来处理约束。通过引入一类新的约束保持门——汉明重量算符，并将其整合到自适应拟设构造中，我们的方法将主要策略从惩罚不可行态转变为完全局限于可行子空间内的量子演化。针对最多 20 个量子比特进行的数值模拟证实，该方法不仅可行，而且效果显著，能够以更快的收敛速度获得可行解，并且所需的量子资源更少，与传统方法相比。

我们的研究发现意义重大，远不止于投资组合优化和喷注聚类的特定实现，还为更广泛的量子计算领域带来了理论与实践价值。从理论角度看，汉明重量算符并不局限于量子近似优化算法；它还是一种新颖、通用的构件，可用于构造约束感知电路。该工具很容易适配其他变分算法，例如变分量子本征求解器，也可用于量子机器学习模型，尤其是在必须保持特定对称性或性质的场景中。更广泛而言，AHWO-QAOA 提供了一个可扩展的模板，用于解决其他复杂的约束问题，彰显了按照约束集的结构设计量子动力学的重要性。未来的研究方向包括将这一框架扩展至不等式约束，探索更丰富的对称性和守恒律，并在真实硬件上进行基准测试。本研究提出了一种有效、节省资源且无需惩罚项的方法，推动了适用于各类实际应用的实用量子优化技术的发展。

[1] Q. Zheng, M. Yu, P. Zhu, Y. Wang, W. Luo, 和 P. Xu, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**67**, 280311 (2024). [2] N. Heydaribeni, X. Zhan, R. Zhang, T. Eliassi-Rad, 和 F. Koushanfar, 《自然·机器智能》**6**, 664 (2024). [3] S. Jin, Y. Huang, S. Wu, G. Zhou, C.-L. Zou, L. Sun, 和 X. Wang, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**68**, 1 (2025). [4] F. Peres 和 M. Castelli, 《应用科学》**11**, 6449 (2021). [5] A. Banks, J. Vincent, 和 C. Anyakoha, 《自然计算》**7**, 109 (2008). [6] X. Huang, S. Zhang, 和 L. Li, 《理论计算机科学》**981**, 114255 (2024). [7] L. Liu, L. Qian, X.-Y. Wu, C.-R. Fan, L.-F. Zhang, D.-B. Cai, H.-J. Lu, T.-J. Wang, 和 C. Wang, 《IEEE智能交通系统汇刊》（2025）。[8] Y.-X. Lin, C.-Y. Xu, 和 C. Wang, arXiv预印本 arXiv:2503.07924（2025）。[9] R. Z. Farahani 和 M. Hekmatfar, “设施选址：概念、模型、算法与案例研究”（2009）。[10] D. Dugoˇsija, A. Savi´c, 和 Z. Maksimovi´c, 《运筹学年鉴》**288**, 247 (2020). [11] G. A. Kochenberger, F. Glover, B. Alidaee, 和 C. Rego, 《OR Spectrum》**26**, 237 (2004). [12] Z. Cui, S. Jin, A. Sone, 和 X. Wang, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**67**, 290362 (2024). [13] Y. Ma, W. Wang, X. Mu, W. Cai, Z. Hua, X. Pan, D.-L. Deng, R. Wu, C.-L. Zou, L. Wang 等, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**68**, 270311 (2025). [14] M.-T. Nguyen, J.-G. Liu, J. Wurtz, M. D. Lukin, S.-T. Wang, 和 H. Pichler, 《PRX量子》**4**, 010316 (2023).

[15] C. Dlaska, K. Ender, G. B. Mbeng, A. Kruckenhauser, W. Lechner 和 R. van Bijnen, 《物理评论快报》**128**, 120503（2022年）。[16] H. Yang、R. Zhang、Z. Zhang、N. Gong、Y. Jiang、Y. Jia 和 T. Wang, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**68**，100311（2025年）。[17] H. Situ、Z. He、Y. Wang、L. Li 和 S. Zheng, 《信息科学》**538**，193（2020年）。[18] Z. Zong、S. Huai、T. Cai、W. Jin、Z. Zhan、Z. Zhang、K. Bu、L. Sui、Y. Fei、Y. Zheng 等, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**67**，240311（2024年）。[19] M. Zheng、J. Zeng、W. Yang、P.-J. Chang、Q. Lu、B. Yan、H. Zhang、M. Wang、S. Wei 和 G.-L. Long, 《通讯物理》**8**，208（2025年）。[20] J.-M. Liang、S.-J. Wei 和 S.-M. Fei, 《中国科学：物理学、力学、天文学》**65**，250313（2022年）。[21] S.-J. Wei、C. Wei、P. Lv、C. Shao、P. Gao、Z. Zhou、K. Li、T. Xin 和 G.-L. Long, 《科学通报》**68**，494（2023年）。[22] G. Yan、K. Pan、R. Wang、M. Ran、H. Chen、X. Wang 和 J. Yan，arXiv 预印本 arXiv:2412.04825（2024年）。[23] A. Montanaro 和 L. Zhou，arXiv 预印本 arXiv:2411.04979（2024年）。[24] C. Song、J. Chen、Y. Wu、Z. Yang、S. Xu、X. Ye、K. Wang、C. Zhang、F. Jin、X. Zhu 等（2024年）。[25] M. Chalupnik、H. Melo、Y. Alexeev 和 A. Galda，“通过多参数问题无关层增强 QAOA 变分线路”（2022年）。[26] J. Wurtz 和 P. J. Love, 《Quantum》**6**，635（2022年）。[27] Y. Yu、C. Cao、C. Dewey、X.-B. Wang、N. Shannon 和 R. Joynt, 《物理评论研究》**4**，023249（2022年）。[28] L. Zhu、H. L. Tang、G. S. Barron、F. A. Calderon-Vargas、N. J. Mayhall、E. Barnes 和 S. E. Economou，Phys. Rev. Res. **4**, 033029（2022年）。

[29] S. Bravyi、A. Kliesch、R. Koenig 和 E. Tang，《物理评论快报》125，260505（2020年）。[30] S. Hadfield、Z. Wang、B. O'gorman、E. G. Rieffel、D. Venturelli 和 R. Biswas，《算法》12，34（2019年）。[31] A. B¨artschi 和 S. Eidenbenz，"QAOA 的 Grover 混合器：将复杂度从混合器设计转移到状态制备"（2020年）。[32] J. Golden、A. B¨artschi、D. O'Malley 和 S. Eidenbenz，"基于阈值的量子优化"（2021年）。[33] F. G. Fuchs、K. O. Lye、H. Møll Nilsen、A. J. Stasik 和 G. Sartor，《算法》15，202（2022年）。[34] D. J. Egger、J. Mareˇcek 和 S. Woerner，《Quantum》5，479（2021年）。[35] A. B. Magann、K. M. Rudinger、M. D. Grace 和 M. Sarovar，《物理评论快报》129，250502（2022年）。[36] A. B. Magann、K. M. Rudinger、M. D. Grace 和 M. Sarovar，《物理评论A辑》106，062414（2022年）。[37] T. Yoshioka、K. Sasada、Y. Nakano 和 K. Fujii，《物理评论研究》5，023071（2023年）。[38] J. Wurtz 和 P. J. Love，《IEEE 量子工程汇刊》2，1（2021年）。[39] J. Villalba-Diez、A. Gonz´alez-Marcos 和 J. B. Ordieres-Mer´e，《传感器》22，244（2021年）。[40] M. P. Harrigan、K. J. Sung、M. Neeley、K. J. Satzinger、F. Arute、K. Arya、J. Atalaya、J. C. Bardin、R. Barends、S. Boixo 等，《自然·物理》17，332（2021年）。[41] M. Cerezo、A. Arrasmith、R. Babbush、S. C. Benjamin、S. Endo、K. Fujii、J. R. McClean、K. Mitarai、X. Yuan、L. Cincio 等，《自然综述：物理》3，625（2021年）。[42] E. Farhi、J. Goldstone 和 S. Gutmann，arXiv 预印本 arXiv:1411.4028（2014年）。[43] L. Zhou、S.-T. Wang、S. Choi、H. Pichler 和 M. D. Lukin，《物理评论X辑》10，021067（2020年）。[44] P. Gao、K. Li、S. Wei 和 G.-L. Long，《中国科学：物理学、力学、天文学》64，100311（2021年）。[45] H.-Z. Xu、W.-F. Zhuang、Z.-A. Wang、K.-X. Huang、Y.-H. Shi、W.-G. Ma、T.-M. Li、C.-T. Chen、K. Xu、Y.-L. Feng 等，《中国物理B辑》33，050302（2024年）。[46] Q.-M. Ding、Y.-M. Huang 和 X. Yuan，《物理评论应用》21，034036（2024年）。[47] L. Cheng、Y.-Q. Chen、S.-X. Zhang 和 S. Zhang，《通讯物理》7，83（2024年）。[48] I. ˇCepait˙e、N. Vaishnav、L. Zhou 和 A. Montanaro，arXiv 预印本 arXiv:2508.16309（2025年）。[49] X.-H. Ni、Y.-S. Wu、B.-B. Cai、W.-M. Li、S.-J. Qin 和 F. Gao，arXiv 预印本 arXiv:2412.19621（2024年）。[50] J. Liu 和 X. Wang，Phys. Rev. A 111，052628（2025年）。[51] E. Farhi 和 A. W. Harrow，arXiv 预印本 arXiv:1602.07674（2016年）。[52] S. Boulebnane、A. Khan、M. Liu、J. Larson、D. Herman、R. Shaydulin 和 M. Pistoia，arXiv 预印本 arXiv:2505.07929（2025年）。[53] R. Shaydulin、C. Li、S. Chakrabarti、M. DeCross、D. Herman、N. Kumar、J. Larson、D. Lykov、P. Minssen、Y. Sun 等，《科学进展》10，eadm6761（2024年）。[54] J. Montanez-Barrera 和 K. Michielsen，《npj 量子信息》11，131（2025 年）。[55] P. D´íez-Valle、D. Porras 和 J. J. Garc´ía-Ripoll，《物理评论快报》130，050601（2023年）。[56] K. Blekos、D. Brand、A. Ceschini、C.-H. Chou、R.-H. Li、K. Pandya 和 A. Summer，《物理学报告》1068，1（2024年）。[57] B. Tsvelikhovskiy、M. Nuyten 和 B. N. Bakalov，arXiv预印本 arXiv:2509.10424（2025年）。[58] Q. Lu、S. Wei、K. Li、P. Gao、B. Yan、M. Zheng、H. Zhang、J. Zeng 和 G.-L. Long，arXiv预印本 arXiv:2508.08869（2025年）。[59] X. Wang、Y. Su 和 T. Li，arXiv预印本 arXiv:2504.12896（2025年）。[60] S. Omanakuttan、Z. He、Z. Zhang、T. Hao、A. Babakhani、S. Boulebnane、S. Chakrabarti、D. Her- man、J. Sullivan、M. A. Perlin 等，arXiv预印本 arXiv:2504.01897（2025年）。[61] S. Kazi、M. Larocca、M. Farinati、P. J. Coles、M. Cerezo 和 R. Zeier，Physical Review Research **7**，033014（2025年）。[63] M. Ramezani、S. Salami、M. Shokhmkar、M. Moradi 和 A. Bahrampour，arXiv预印本 arXiv:2402.18530（2024年）。[64] Y. Song、Y. Wu、S. Qin、Q. Wen、J. B. Wang 和 F. Gao，arXiv预印本 arXiv:2310.06270（2023年）。[65] L. Binkowski、G. Koßmann、T. Ziegler 和 R. Schwon- nek，New Journal of Physics **26**，073001（2024年）。[66] M. Ayodele，"QUBO表述中的惩罚权重：排列问题"，（2022年）。[67] S. Brandhofer、D. Braun、V. Dehn、G. Hellstern、M. H¨uls、Y. Ji、I. Polian、A. S. Bhatia 和 T. Wellens，Quantum Information Processing **22**，25（2022年）。[68] A. Verma 和 M. Lewis，Discrete Optimization **44**，100594（2022年）。[69] P. Mirkarimi、I. Shukla、D. C. Hoyle、R. Williams 和 N. Chancellor，Physical Review Research **6**，043241（2024年）。[70] D. Herman、R. Shaydulin、Y. Sun、S. Chakrabarti、S. Hu、P. Minssen、A. Rattew、R. Yalovetzky 和 M. Pistoia，《通讯物理》**6**，219（2023年）。[71] C. A. C. Coello，Computers in Industry **41**，113（2000年）。[72] M. Willsch、D. Willsch、F. Jin、H. De Raedt 和 K. Michielsen，Quantum Information Processing **19**，197（2020年）。[73] P. Chandarana、N. N. Hegade、K. Paul、F. Albarr´an- Arriagada、E. Solano、A. del Campo 和 X. Chen，Phys. Rev. Res. **4**，013141（2022年）。[74] D. Xiang、Q. Jiang、L. Lu、S. Tan 和 J. Yin，2025年IEEE高性能国际研讨会

计算机体

，275（2025年）。[75] S. Guo、J. Sun、H. Qian、M. Gong、Y. Zhang、F. Chen、Y. Ye、Y. Wu、S. Cao、K. Liu 等，《自然·物理》**20**，1240（2024年）。[76] S. Ebadi、A. Keesling、M. Cain、T. T. Wang、H. Levine、D. Bluvstein、G. Semeghini、A. Omran、J.-G. Liu、R. Samajdar 等，《科学》**376**，1209（2022年）。[77] H.-L. Huang、X.-Y. Xu、C. Guo、G. Tian、S.-J. Wei、X. Sun、W.-S. Bao 和 G.-L. Long，《中国科学：物理学、力学、天文学》**66**，250302（2023年）。[78] J. Preskill，《Quantum》**2**，79（2018年）。[79] S. Chen、J. Cotler、H.-Y. Huang 和 J. Li，《自然-通讯》**14**，6001（2023年）。[80] S. Wang、E. Fontana、M. Cerezo、K. Sharma、A. Sone、L. Cincio 和 P. J. Coles，《自然-通讯》**12**，6961（2021年）。[81] H. R. Grimsley、S. E. Economou、E. Barnes 和 N. J. Mayhall，《自然-通讯》**10**，3007（2019年）。[82] H. L. Tang、V. Shkolnikov、G. S. Barron、H. R. Grimsley、N. J. Mayhall、E. Barnes 和 S. E. Economou，《PRX量子》**2**，020310（2021年）。

[83] A. Gunjan 和 S. Bhattacharyya，《人工智能评论》**56**，3847（2023年）。[84] P. Rebentrost 和 S. Lloyd，《人工智能》**38**，327（2024年）。[85] S. Benati 和 R. Rizzi，《欧洲运筹学杂志》**176**，423（2007年）。[86] W. Herroelen，《生产与运营管理》**14**，413（2005年）。[87] U. Azad、B. K. Behera、E. A. Ahmed、P. K. Panigrahi 和 A. Farouk，《IEEE智能交通系统汇刊》**24**，7564（2022年）。[88] S. Harwood、C. Gambella、D. Trenev、A. Simonetto、D. Bernal 和 D. Greenberg，《IEEE量子工程汇刊》**2**，1（2021年）。[89] A. Omu、R. Choudhary 和 A. Boies，《能源政策》**61**，249（2013年）。[90] V. V. Dixit 和 C. Niu，《科学报告》**13**，12267（2023年）。[91] S. Golestan、M. Habibi、S. M. Mousavi、J. M. Guerrero 和 J. C. Vasquez，《能源报告》**9**，584（2023年）。[92] J. G. Vlachogiannis 和 K. Y. Lee，《IEEE电力系统汇刊》**23**，1627（2008年）。

[93] R. Jain 和 N. Sharma，《集群计算》**26**, 3587 (2023年). [94] S. Boulebnane 和 A. Montanaro，《PRX量子》**5**, 030348 2024年( ). [95] R. Herrman, P. C. Lotshaw, J. Ostrowski, T. S. Humble 和 G. Siopsis，《科学报告》**12**, 6781 (2022年). [96] K. Shi, R. Herrman, R. Shaydulin, S. Chakrabarti, M. Pistoia 和 J. Larson，2022年IEEE/ACM第七届边缘计算研讨会 (SEC), , 414 (2022年). [97] J. Robledo-Moreno, M. Motta, H. Haas, A. Javadi- Abhari, P. Jurcevic, W. Kirby, S. Martiel, K. Sharma, S. Sharma, T. Shirakawa 等，《科学进展》**11**, eadu9991 (2025年). [98] Z. Wang, P.-L. Zheng, B. Wu 和 Y. Zhang，《物理评论研究》**5**, 023171 (2023年). [99] Y. Zhu, W. Zhuang, C. Qian, Y. Ma, D. E. Liu, M. Ruan 和 C. Zhou，《科学通报》**70**, 460 (2025年). [100] H. Liang, Y. Zhu, Y. Wang, Y. Che, M. Ruan, C. Zhou 和 H. Qu，《物理评论快报》**132**, 221802 (2024年).