arXiv:2602.01353v1 [quant-ph] 1 Feb 2026

非变分启发式量子优化方法

Stuart Ferguson[1,*] 和 Petros Wallden[1]
[1] *Quantum Software Lab, School of Informatics, The University of Edinburgh, Edinburgh, United Kingdom*

（日期：2026年2月3日）

优化在广泛的科学与工业应用中发挥着核心作用，而量子计算已被广泛提出作为在该领域实现计算优势的一种途径。迄今为止，抗噪量子算法设计方面的研究主要由变分方法主导，而其他替代方案仍相对缺乏探索。在本工作中，我们引入一类新颖的量子优化启发式方法，放弃这一变分框架，转而采用建立在马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）技术之上的量子-经典混合方法。我们引入量子增强模拟退火（QeSA）和量子增强并行回火（QePT），随后在困难的 Sherrington-Kirkpatrick 实例上验证这些启发式方法，并展示其相对于经典基准的更优标度。这些算法预计具有固有的抗噪鲁棒性，并支持在量子与经典资源上并行执行，且仅需经典通信。因此，它们为利用近期量子设备求解大规模优化问题提供了一条可扩展且可能具有竞争力的路径。

I. 引言

量子算法早期的突破提供了严谨的概念验证，为这一领域的诞生奠定了基础，并推动了量子计算硬件的发展 [1, 2]。直到最近，研究这类算法的唯一途径都是考察其渐近计算复杂度。然而，随着硬件不断进步，研究新的启发式方法正变得越来越重要；即使在经典计算领域，这类方法也往往缺乏理论保证。

对于研究充分的组合优化问题，已有大量经典求解器，包括启发式求解器 [3, 4] 和精确求解器 [5]。在许多情况下，精确方法在最坏情形下需要指数级时间，因此人们依赖启发式方法，在实际可行的时间内找到次优解。

这一经典类比引出了一个目前在量子优化领域尚未得到充分探索的问题：有哪些量子启发式算法 [6]？变分量子算法（VQA）和量子退火（QA）都是文献中得到广泛研究的实例。然而，在这两种情况下，未来的发展方向都可能并不明朗 [7–10]。一些量子计算虚时间演化方法也属于启发式方法，但在成功概率或电路深度方面存在实际局限 [11–13]。近期还有一些打破这一模式的其他有前景的方法 [14–16]。此外，还有一些值得明确与我们的方法区分开来的重要工作：量子增强优化（通过暖启动） [17]；量子模拟退火（容错） [18]；量子副本交换 [19]；以及受量子启发的回火 [20]。

本文旨在提出一类新的量子优化算法：它们以经典启发式方法为基础，并应用一种简单的量子子程序。具体而言，我们探讨了实时演化的应用；此前，实时演化曾支持量子增强马尔可夫链蒙特卡洛（QeMCMC）实现（最高达）四次方的量子尺度优势 [21–24]。这是一个非常自然的出发点，例如，模拟退火（SA）和并行回火（PT）这两种算法在本质上都与马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）相关。在此，我们通过实验比较了这些算法在组合优化问题上的表现。需要注意的是，尽管并行回火通常被视为一种采样算法，但由于从复杂的“低温”分布中采样与优化之间存在联系，它也常用于优化。

我们的主要贡献是对两种新型量子算法的提议与原理验证：

- 量子增强模拟退火（QeSA）
- 量子增强并行回火（QePT）

我们还讨论了对这些基线方法的若干改进，融入了经典方法中的思想，并为算法引入灵活性，以适应不同的硬件要求和问题类型。这促使我们认识到，对于近期量子算法而言，将高性能计算（HPC）与量子计算相混合（高性能计算-量子计算）是必要的。尽管我们介绍了这些技术，但显然，在真实量子硬件上对其进行测试之前，它们不会被充分理解。正因如此，我们给出了这些算法，并附带一些原理验证数值结果，但并不试图量化这些方法可能实现的任何潜在量子加速。

本文其余部分的结构如下。在第 II 节中，我们回顾组合优化、马尔可夫链蒙特卡罗、经典启发式算法和量子增强马尔可夫链蒙特卡罗，并定义所使用的评估指标。在第 III 节中，我们介绍两种新的

* S.A.ferguson-3@ed.ac.uk

启发式方法，并提供一些模拟数值结果，以推动未来的研究。最后，第 IV 节讨论它们的潜力，并概述其近期实施所面临的挑战。

II. 预备知识

本节介绍本文其余部分所需的背景知识。其中包括对组合优化的简要介绍，以及对相关问题实例的一些细节说明，随后将优化与采样联系起来。这一联系正是本文所述算法的动机。接着，我们将介绍使用马尔可夫链蒙特卡罗进行的经典采样，以及相关的经典优化启发式方法，然后引入量子增强采样方法 QeMCMC [1]。最后，我们将介绍一些可用于评估上述算法的数值工具，例如“谱隙”和计算“工作量”。

A. 组合优化

在组合优化中，目标是从所有可能的候选项 $s = [s_1, s_2, ..., s_n]$ 中找到一个最优构型（s^*），其中每个 n 变量都可以取值 $s_i \in \{+1, -1\}$。候选项的集合称为构型空间 S，其中包含 $|S| = 2^n$。设最优解为构型，

$$s^* = \text{argmin}_{s\in S}(f(s)), \tag{1}$$

使某个目标函数 $f(s)$ 最小化。这种问题表述等价于使用二元变量而非自旋变量的表述。尽管我们的方法可推广到高阶目标函数，但在近端量子优化的背景下，通常关注二次无约束二元优化（QUBO）问题。

我们考虑一类称为 Sherrington-Kirkpatrick 模型的函数，它们是全连接的二阶自旋玻璃，其目标函数为

$$f_{\text{SK}}(s) = -\sum_{i=1}^{n} J_i^{(1)} s_i - \sum_{i<j}^{n} J_{ij}^{(2)} s_i s_j. \tag{2}$$

$J^{(1)}$ 和 $J^{(2)}$ 中的每个元素均取自标准正态分布。这对应于一般问题类别中尤为困难的一种情况，因为代价函数呈现“玻璃态”特征——即具有许多彼此差异显著的局部极小值。在我们的原理验证数值实验中，我们针对 $n \leq 10$研究 f_{SK}，通过生成随机模型实例来开展实验：从正态分布中抽样生成 $J^{(1)}$ 和 $J^{(2)}$。我们通过对每种算法在至少100个此类实例上的表现取平均值，比较组合优化方法。选择使用 Sherrington-Kirkpatrick 模型，是因为大多数问题实例中固有的玻璃态特征；这会产生规模较小但计算难度较高的问题，从而展示我们技术的潜力。尽管其他类型问题的分析留待未来工作，但需要指出的是，像这样的伊辛模型具有很强的通用性，其子情形包括最大割问题和旅行商问题等经典任务。

[1]本文在可能的情况下，沿用了 [21] 的记号。

B. 马尔可夫链蒙特卡罗

我们的问题采用自旋表述，其动机来自对核心计算技术——马尔可夫链蒙特卡罗——的经典描述。MCMC（算法 1）旨在近似地从难以处理的概率分布中采样[25, 26]。

算法 1. 马尔可夫链蒙特卡罗

$s \leftarrow$ 初始自旋构型
while not converged **do**
  $s' \leftarrow \text{LocalProposal}(s)$
  $A(s' \mid s) \leftarrow \min\left(1, \frac{\mu(s')}{\mu(s)} \frac{Q(s|s')}{Q(s'|s)}\right)$
  $u \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
  if $u < A(s' \mid s)$ **then**
    $s \leftarrow s'$
  end if
end while

一个例子是玻尔兹曼分布，

$$\mu(s) = \frac{1}{Z} e^{-f(s)/T}, \tag{3}$$

其中 Z 是配分函数，$Z = \sum_{s\in S} e^{-f(s)/T}$而 T 是温度参数。精确计算Z 难以实现——需要 Ω (2^n) 的时间。马尔可夫链蒙特卡罗并不尝试近似 Z，而是在 S上进行随机游走。任意转移$s \to s'$、 $P(s'|s)$ 的概率都必须经过选择，以确保经过许多步后，链处于任意状态 s的概率约为 $\mu(s)$。为确保收敛到这一平稳分布，链必须同时满足不可约和非周期的条件，并遵循一种称为详细平衡的条件，

$$P(s' \mid s)\mu(s) = P(s' \mid s)\mu(s'). \tag{4}$$

确保细致平衡的常见方法是在一次转移中采取两个不同的操作：首先，以概率 $Q(s'|s)$ 从当前的 (s)提出一个新的 (s') 配置；然后以概率 ()接受这个新的

提议。由此得到的概率，

$$P(s' \mid s) = A(s' \mid s)Q(s' \mid s), \tag{5}$$

可满足多种接受准则的详细平衡条件，但 Metropolis-Hastings，

$$A(s' \mid s) = \min(1, \frac{\mu(s')}{\mu(s)} \frac{Q(s \mid s')}{Q(s' \mid s)}) = \min(1, e^{-\frac{\Delta f}{T}}), \tag{6}$$

是最常用的方法。第二个等式源于配分函数的抵消，以及常见的提议方法（例如简单地翻转单个自旋，即局部提议，算法 2）会经过专门设计以确保$Q(s' \mid s) = Q(s \mid s')$。如果能够从玻尔兹曼分布中近似采样，那么通过设置 $T \approx 0$ 即可求解相关的优化问题，即式 2。然而，马尔可夫链蒙特卡罗的计算成本显然极其依赖温度；据经验可知，在低温区间，需要许多步才能收敛到平稳分布： 热化 过程极其缓慢。

算法 2. 局部提议

函数 LOCALPROPOSAL(s) ▷ 避免原地修改 $n \leftarrow$ 长度(s) $i \leftarrow$ 区间内的随机整数 $[1, n]$ ▷ 随机选择一个自旋 $s'_i \leftarrow -s'_i$ ▷ 翻转所选位置的自旋 **返回** s' **结束函数**

C. 经典优化启发式方法

一种朴素的优化方法是运行低温马尔可夫链蒙特卡罗。众所周知，在自旋玻璃伊辛模型中，随着 $T \to 0$，采样基态的概率达到最大。然而，使低温链热化所需的步数随 n呈指数增长，因此即使仅对于相对较小的小系统 [27]也会变得完全难以处理。这主要是由于代价函数中分隔局部极小值的“能量势垒”。在低温下，接受会使能量升高的提议转移的概率变得微乎其微。

为缓解陷入局部极小值的问题，模拟退火（算法3）引入一个调度（T_{schedule}），它会逐步降低 T，即在算法的每一步[28, 29]。如果初始温度（T_0）足够高，使该链能够全局遍历代价函数景观，并且调度足够缓慢，那么该链极有可能找到极小值。在本文中，我们假设采用对数冷却调度。

需要强调的是，马尔可夫链蒙特卡罗与模拟退火之间唯一的区别在于，温度不再是固定的。这一极其简单的改变将该过程转变为一种强大的优化算法。然而，由于马尔可夫链必然具有串行特性，高度可并行化的现代方法通常优于模拟退火。

ALGORITHM 3. Simulated Annealing

$s \leftarrow$ Initial spin configuration
$T_{\text{schedule}} \leftarrow$ Temperature Schedule
for T in $T_{schedule}$ **do**
  $s' \leftarrow$ LocalProposal(s)
  $\Delta f \leftarrow f(s') - f(s)$
  $A(s' \mid s) \leftarrow \min\left(1, \frac{\mu(s')}{\mu(s)} \frac{Q(s|s')}{Q(s'|s)}\right)$
  $u \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
  if $u < A(s' \mid s)$ **then**
    $s \leftarrow s'$
  end if
end for
return s

一种能够巧妙地实现马尔可夫链蒙特卡罗方法并行化的方法是并行回火（PT），算法。 4 目前，高性能计算中已将其用于采样和优化。它不只使用一条马尔可夫链， M 而是并行运行多个“副本”，每个副本都处于固定温度下，$T_1 < T_2 < ... < T_M$。系统会定期尝试交换它们的构型，因此也称为“副本交换马尔可夫链蒙特卡洛”。

ALGORITHM 4. Parallel Tempering

$T_{ladder} \leftarrow$ Temperature ladder
$\{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots, s^{(M)}\} \leftarrow M$ independent initial spin configurations
$k \leftarrow$ Swap interval
step $\leftarrow 0$ ▷ Timesteps
while not converged **do**
  step $\leftarrow$ step $+ 1$
  for $i = 1$ **to** M **do** ▷ Parallel MCMC Step
    $s^{(i)'} \leftarrow \text{LocalProposal}(s^{(i)})$
    $\Delta f \leftarrow f(s'_i) - f(s_i)$
    $A(s^{(i)'} \mid s^{(i)}) \leftarrow \min\left(1, \frac{\mu(s')}{\mu(s)} \frac{Q(s^{(i)}|s^{(i)'}}{Q(s^{(i)'}|s^{(i)})}\right)$
    $u \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
    if $u < A(s^{(i)'} \mid s^{(i)})$ **then**
      $s^{(i)} \leftarrow s^{(i)'}$
    end if
  end for
  if step $(\text{mod } k) == 0$ **then** ▷ Replica Exchange Step
    $start \leftarrow 2 - ((\text{step}/k) \pmod 2)$
    for $i = start, start + 2, \ldots$ while $i < M$ **do**
      $j \leftarrow i + 1$
      $\Delta\beta \leftarrow (1/T_i - 1/T_j)$
      $\Delta f_{ij} \leftarrow f(s^{(i)}) - f(s^{(j)})$
      $v \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
      if $v < \exp(\Delta\beta \cdot \Delta f_{ij})$ **then**
        Swap $s^{(i)} \leftrightarrow s^{(j)}$
      end if
    end for
  end if
end while
return s associated with $T_{\min}$

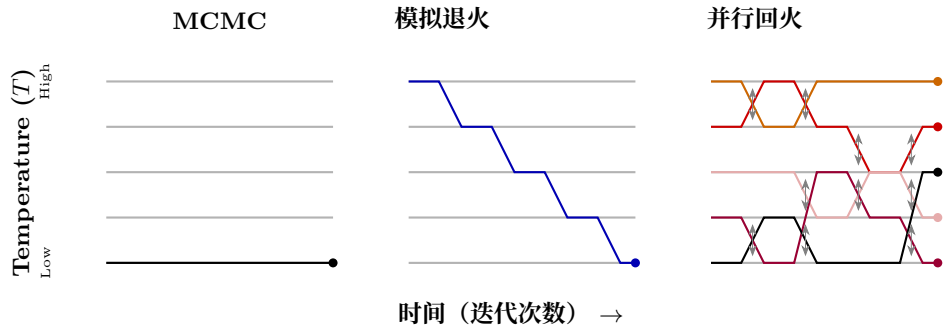


图 1. MCMC、模拟退火和并行回火的直观示意图。MCMC 尝试使给定温度 T_{low} 下的单条马尔可夫链达到热平衡。模拟退火从高温开始，并逐渐退火至 T_{low}；而并行回火则在不同温度下并行运行多条链，偶尔在链之间交换构型。

虽然存在各种交换方案，我们考虑一种常见做法：以固定的 k 步间隔，尝试交换相邻副本。为确保所有副本对都有机会交换，该算法会在两组副本对之间交替进行。第一个间隔时，尝试交换所有“偶数”副本对（$s^{(i)}$，$s^{(i+1)}$），其中 $i \in \{0, 2, 4, \dots\}$ 且 $s^{(i)}$ 是第 i^{th} 个副本的构型。下一个间隔时，尝试交换所有“奇数”副本对，其中 $i \in \{1, 3, 5, \dots\}$。副本 i（温度为 T_i）与副本 j 之间的交换提议将以如下概率接受：

$$A^{\text{PT}}(s^{(i)}, s^{(j)}) = \min\left[1, \exp\left((\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_j})(f(s^{(i)}) - f(s^{(j)}))\right)\right]. \tag{7}$$

通过这种方式，任意构型都可以在副本之间遍历迁移。类似于模拟退火中的 T_{schedule}，并行回火要求用户选择每个副本的温度 T_{ladder}。为保持一致，我们仍将其选为对数形式。并行回火还需要选择副本数量；如果选择不当，可能导致实现效率低下。如果 M 太大，链间混合会很慢；反之，相邻副本的能量分布之间几乎没有重叠。

D. 量子增强马尔可夫链蒙特卡罗

低温采样是文中引入的量子增强方法的核心动机之一[21]。通过描述一个满足 $|\langle s'|U|s\rangle| = |\langle s|U|s'\rangle|$的酉算符，可以仅通过以下步骤构建量子增强马尔可夫链蒙特卡罗提议机制：将量子计算机初始化为一个计算基态[2] $|s\rangle$，应用U，然后在计算基下测量系统。

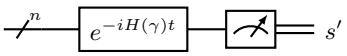
然而，问题在于，能否设计出一种有用的简单酉算符？从启发式角度看，最优提议具有两个不同的性质：较小的 Δf；以及较大的汉明距离[3] (ΔH)。较小的 Δf 意味着 $A(s'|s) \approx 1$，因此链能够稳定移动；较大的 ΔH 则意味着链会在结构迥异的构型之间进行非局域移动。 [21] 提出的一种兼具这些性质的方法是哈密顿量下的实时演化 $U = \exp^{-itH}$，

$$H = \gamma\Big[\sum_{j=1}^{n} X_j\Big] - (1-\gamma)\alpha\Big[\sum_{j>k=1}^{n} J_{jk}^{(1)} Z_j Z_k + \sum_{j=1}^{n} J_j^{(2)} Z_j\Big], \tag{8}$$

其中 Z 是泡利矩阵，且 γ 与 t 是应仔细选择的超参数。该哈密顿量中的第二项编码伊辛模型实例，而第一项与绝热量子计算中的驱动项相关：它迫使系统在邻近能级之间扩展。这意味着γ 可以调节，从而产生一个所得量子状态，该状态在使 Δf 较小的基底态上具有较大振幅。当测量该量子状态时，所得构型 s'具有如下性质： $f(s) \approx f(s') \pm \alpha$对于较小的 α。提议函数详见算法5。

算法 5. 量子提议

函数 QuantumProposal(s)
  $t \leftarrow$ 均匀分布($t_{\min}, t_{\max}$)　　▷ 演化时间
  $\gamma \leftarrow$ 均匀分布($\gamma_{\min}, \gamma_{\max}$)　　▷ 混合
  应用电路：



  返回 s'
结束函数

[2] 这是通过将自旋变量映射为二元变量来实现的。

[3] 我们将汉明距离定义为 s与 s'之间汉明重量的差异。

这种启发式设计意味着性能在解析上尚未得到充分理解。给定马尔可夫链蒙特卡罗的热化时间（τ）明显依赖于起始状态，而且在实践中，仅通过采样一条链并不总能判断其是否处于平稳态。然而，经验结果表明，量子尺度优势可能介于三次方与四次方之间，具体取决于温度设置。

E. 评估指标

一个重要的量是谱隙，$\delta = 1 - \text{最大}_{\lambda \neq 1} |\lambda|$，其中 $\{\lambda\}$ 是 $2^n \times 2^n$矩阵 P的特征值。谱隙界定了 τ 相对于 ε 的 $\mu(s)$ [27]，即马尔可夫链分布与

$$\left(\frac{1}{\delta} - 1\right) \ln\left(\frac{1}{2\varepsilon}\right) \leq \tau \leq \frac{1}{\delta} \ln\left(\frac{1}{\varepsilon \min_s \mu(s)}\right). \quad (9)$$

因此，通过理解 δ 随n的指数衰减，就能在不运行马尔可夫链蒙特卡罗的情况下，了解给定提议的 τ 缩放情况。当然，计算 δ 显然是不可行的，因此这种方法只能用于小系统。某些情况下，谱隙也可直接与优化联系起来——参见第IIIA 1节。

对于评估优化算法成功与否的情况，我们将找到全局极小值所需的计算工作量（N_p）定义为以概率 p找到全局极小值所投入的计算工作量。在我们的情形中，“计算工作量”的通用单位是使用一次提议机制，或者等价地，评估一次 f。当然，量子策略执行一次提议需要相当长的时间，但这取决于具体硬件。对于给定的方法，总计算工作量为 $N_p = \ell \times R$，即单条马尔可夫链的长度（ℓ）乘以为以概率 $p = 1 - \epsilon$ [30, 31]找到基态所需的重复次数（R）：

$$R = \log(1-p)/\log(1-p_s). \quad (10)$$

其中，p_s 是优化算法单次运行的成功概率，对于较小的 n，可以通过数值方法近似计算。如果有多个副本（例如在并行回火中），那么单次运行的计算工作量等于链的数量乘以单条链的计算工作量$\ell_{PT} = M\ell$。请注意，这略微低估了计算工作量，因为副本交换也会产生一定开销，但其影响可以忽略不计。本文其余部分将采用标准的 $\epsilon = 0.01$、$N_{0.99}$。

这一计算工作量定义意味着，我们能够公平地比较不同的优化方法。对于中等规模的问题，我们可以近似优化超参数以尽量降低计算工作量，这样便能根据各方法的“最优”计算工作量进行公平比较。

III. 量子增强优化

本节将介绍两种新颖的量子算法：量子增强并行回火和量子增强模拟退火。我们首先阐述这些量子启发式算法为何存在，并特别将其与相关的容错量子算法进行比较。随后，我们提供原理验证数值结果，表明与经典方法相比，这些算法具有更好的收敛性。

A. QeSA

正如模拟退火是一种极为有效的将马尔可夫链蒙特卡罗扩展到优化问题的方法，QeSA 也将量子增强马尔可夫链蒙特卡罗扩展到了优化问题。其思路很简单：在逐渐降低温度参数的同时运行量子增强马尔可夫链蒙特卡罗。若操作得当，下降至局部极小值的概率应高于可比的模拟退火算法。自然可以预期，量子增强收敛会在退火后期（低温阶段）提高移动性。详情参见算法 6。

算法 6. 量子增强模拟退火$s \leftarrow$ 初始自旋构型$T_{\text{schedule}} \leftarrow$ 温度调度**对于** T 在 $T_{schedule}$ **执行**$s' \leftarrow$ 量子提议(s)$\Delta f \leftarrow f(s') - f(s)A(s' \mid s)$ $\leftarrow$最小化 $\left(1, {}^{\mu(s')\,\mu(s)\,Q(s|s')\,Q(s'|s)}\right)u \leftarrow$ 均匀分布(0，1)**如果** $u < A(s' \mid s)$ **则**$s \leftarrow s'$**结束 if，结束 for，返回** s

需要强调的是，我们的方法与容错量子模拟退火（QSA）算法的二次量子加速 [18]之间存在明显差异。我们的方法是混合式的，马尔可夫链主要存储在经典计算机中，只有提议过程由量子方式完成。然而，先前的方法采用容错技术，包括量子相位估计，反复投影到对应退火温度的量子吉布斯态上。在推导其量子加速时，任何经典模拟退火算法的运行时间（N^{SA}，提议总数）都被设定了上界，

$$\mathcal{O}\left(\log\left(d/\epsilon_s^2\right)/\delta_{min}\right), \quad (11)$$

其中，$d = 2^n$ 是状态空间的维度，$p_s = 1 - \epsilon_s$是单次运行的成功概率，$\delta_{min} = \min^{T \in T_{\text{schedule}}}(\gamma)$ 是最小谱隙

在调度中的所有温度下。QSA 的等价表达式为

$$\mathcal{O}\left(\log^3\left(d/\epsilon_s^2\right)/\left(\epsilon_s^2\sqrt{\delta_{min}}\right)\right) \tag{12}$$

从而在 $\delta_{\min}$中实现二次加速。通过比较方程11 和 12，可以清楚地看出，所提出的 QeSA 以一种与其容错前身截然不同的方式实现量子加速。QeSA 仍受方程 11的限制，但它通过 QeMCMC 提议直接降低 $\delta_{\min}$。请注意，QeMCMC 的谱隙降低仅适用于平均情形实例，并且已证明在最坏情形下无效 [24]。

因此，QeSA 的主要动机在于，QeMCMC 在低温下的收敛可能会带来$N^{QeSA} < N^{SA}$。因此，我们假设，对于平均情形的自旋玻璃伊辛模型，组合优化中可实现最高四次方的标度优势。

1. *QeSA Proof of principle*

为检验这一假设，我们在模拟环境中对 QeSA 进行试验。当然，必须选择最优的退火调度，才能公平比较 SA 和 QeSA。在此，我们选择 $T_{\text{high}} = 10$ 和 $T_{\text{low}} = 0.1$，并采用形式为 $T_i = T_{\text{high}} \times e^{-ax}$的退火调度。我们用马尔可夫链所经历的步数 ℓ来表示一次退火运行的长度；当然，该数值与 a成反比。在所有实验中，我们研究了 100 个模型实例，每个数据点进行 100 次退火运行。量子增强超参数从以下范围中抽样：$[\gamma_{\min}, \gamma_{\max}] = [0.25, 0.6]$和$[t_{\min}, t_{\max}] = [2, 20]$。请注意，$t$ 表示整数个特罗特时间步，每个时间步的长度为 $\Delta t = 0.8$，如 [21]所示。算法的一个简单实现见 [32]。

当然，必须考虑在重复多次低成本退火过程与进行次数更少但更长的退火运行之间做出选择。如图2所示，经典模拟退火偶尔能够迅速找到全局极小值，但常常陷入局部极小值。相反，量子方法不会受到此类局域性问题的影响，并且在步数仅略有增加后便能持续达到高得多的成功概率。

这意味着我们必须优化 ℓ，使其相对于总计算开销，即式10，以便公平地比较各种方法。针对 $n = 10$ 的示例如图3所示。一旦针对每种问题规模找到 ℓ的合适取值，我们就可以直接比较QeSA与模拟退火所需的计算开销——图4。

从图4 中无法完全看清 SA 和 QeSA 的这种缩放关系形式，因此我们谨慎行事，不作任何假设。不过显而易见的是，我们的量子方法有望胜过其经典替代方案。

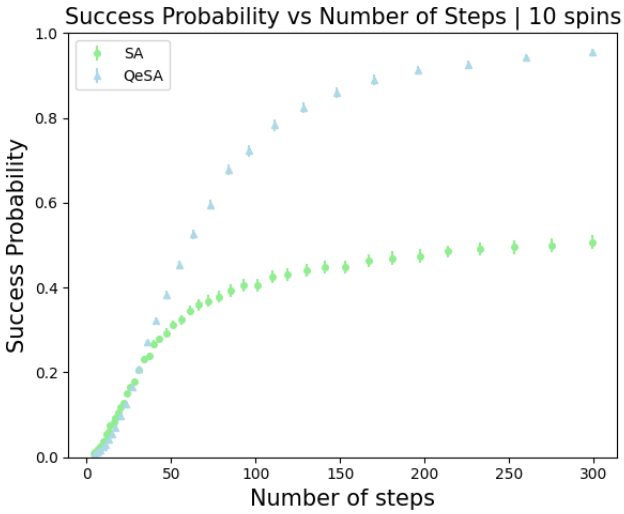


图2. 找到全局极小值的概率与所采取步数的关系。经典模拟退火（绿色）偶尔能迅速找到全局极小值；然而，如果它不在初始状态的局部区域内，就会陷入局部极小值，并可能需要极长时间才能逃逸。而QeSA（蓝色）不会受到此类局域性的影响，更长的退火运行会带来找到全局极小值的极高概率。每个数据点是100个不同模型的平均值，其中对每个步数值各执行100次退火过程。

B. QePT

并行回火是解决一个计算瓶颈——低温下热化缓慢——的优雅算法方案。这与 QeMCMC 的动机相同。自然，同时采用这两种技术的方法应当能够在低温下进行良好的采样，因而在优化中表现出色。PT 使用多条马尔可夫链，每隔 $k/2$ 步便以一定概率交换状态；QePT 则使用量子增强马尔可夫链，同样能够交换构型。PT 依赖多条相互协助进行探索的马尔可夫链。如果能够改进每条链，那么整个系统的热化效率就会更高。

并行回火链的谱隙 δ_{PT}，比单条链的谱隙复杂得多。我们不再追踪单条链如何遍历 2^n 构型，而是必须考虑 M 副本；这意味着在算法的每一步，转移都可能发生在2^{mn} 整体构型之间。谱隙不再仅取决于各条链的 δ，还取决于链之间的通信能力。事实上，经典文献指出，如果各条链受限于分布的局部模态，那么只要它们之间有足够的重叠，整体链就会高效收敛 [33, 34]。

当然，对于许多分布而言，局部极小值会导致低温链仍然形成瓶颈，造成

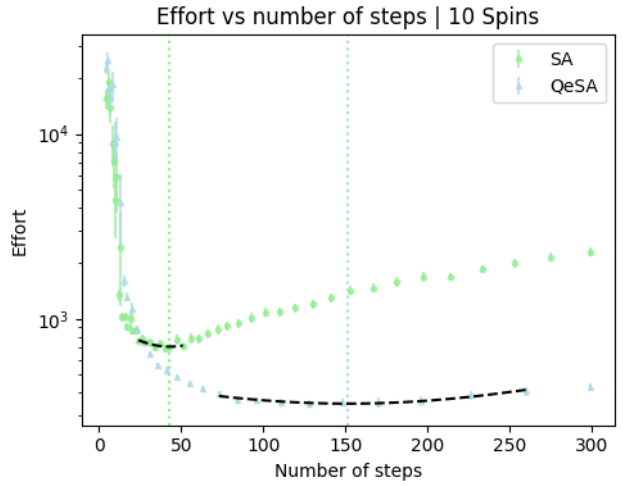


图 3. 2式中的计算工作量：针对 $n = 10$，绘出了寻找全局极小值所需工作量与马尔可夫链步数的关系，分别对应 SA（绿色）和 QeSA（蓝色）。尽管经典方法在重复进行大量短退火过程时效果良好，量子方法通过进行更少、更长的退火过程，可以迅速降低计算工作量。选取一部分计算工作量较低的数值，并用其拟合一个简单的二次函数（黑色），以近似求出各情况下的最优工作量。由垂直虚线表示的最优步数为$\ell_{SA} \approx 43$ 和 $\ell_{QeSA} \approx 151$

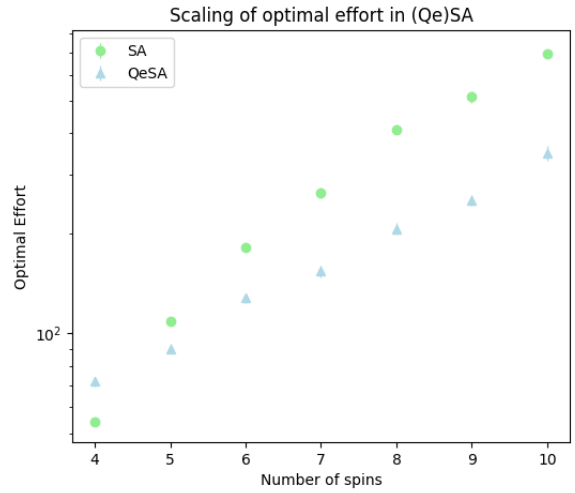


图 4. 随着自旋数增加，SA（绿色圆形）和 QeSA（蓝色三角形）的最优计算工作量。对于每个 n，都会找到最优的 ℓ（如图 3所示），随后使用 100 个新随机初始化的伊辛模型生成此图；此时每个退火过程均重复 1000 次。

热化不充分的链之间的重叠大幅降低。这意味着，当仅在最低温度的链上采用量子增强链时，QePT 很可能比并行回火更具实用优势。正因如此，我们选择研究该算法的收敛性，其中仅有一小部分低温

ALGORITHM 7. Quantum-enhanced Parallel Tempering

$T_{ladder} \leftarrow$ Temperature ladder
$\{s^{(1)}, s^{(2)}, \ldots, s^{(M)}\} \leftarrow M$ independent initial spin configurations
$k \leftarrow$ Swap interval
step $\leftarrow 0$ ▷ Timesteps
$M_q \leftarrow$ number of quantum chains
while not converged **do**
  step $\leftarrow$ step $+ 1$
  for $i = 1$ **to** M **do** ▷ Parallel MCMC Step
    if $i \leq M_q$ **then**
      $s^{(i)'} \leftarrow \text{QuantumProposal}(s^{(i)})$
    else
      $s^{(i)'} \leftarrow \text{LocalProposal}(s^{(i)})$
    end if
    $\Delta f \leftarrow f(s_i') - f(s_i)$
    $A(s^{(i)'} \mid s^{(i)}) \leftarrow \min\left(1, \frac{\mu(s')}{\mu(s)} \frac{Q(s^{(i)}|s^{(i)'})}{Q(s^{(i)'}|s^{(i)})}\right)$
    $u \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
    if $u < A(s^{(i)'} \mid s^{(i)})$ **then**
      $s^{(i)} \leftarrow s^{(i)'}$
    end if
  end for
  if step $\pmod k == 0$ **then** ▷ Replica Exchange Step
    $start \leftarrow 2 - ((\text{step}/k) \pmod 2)$
    for $i = start, start + 2, \ldots$ while $i < M$ **do**
      $j \leftarrow i + 1$
      $\Delta\beta \leftarrow (1/T_i - 1/T_j)$
      $\Delta f_{ij} \leftarrow f(s^{(i)}) - f(s^{(j)})$
      $v \leftarrow \text{Uniform}(0, 1)$
      if $v < \exp(\Delta\beta \cdot \Delta f_{ij})$ **then**
        Swap $s^{(i)} \leftrightarrow s^{(j)}$
      end if
    end for
  end if
end while
return s associated with $T_{\min}$

链是量子增强的 [4]。这一假说对 QePT 在高性能计算-量子计算环境中的实用性具有重大影响。

1. *QePT Proof of principle*

与 QeSA 的数值结果（第 IIIA 1 节）一样，我们令 T_{ladder} 介于 $T_{\text{high}} = 10$ 和 $T_{\text{low}} = 0.1$ 之间，且形式为 $T_i = T_{\text{high}} \times e^{-kx}$。我们还将交换尝试之间的步数设为 $k = n$。为了公平比较各种方法，我们必须找到能使计算开销达到最优的并行回火链长度，见公式 10。为简化分析，我们选用一个仅含 4 个副本的极小系统，但需注意，在大规模实例中通常会采用许多副本。尽管我们只考虑有 4 个梯级的情况，

[4]通常将并行回火视为副本马尔可夫链本身的交换，但将其视为交换它们的构型是等价的。我们选择后一种约定。

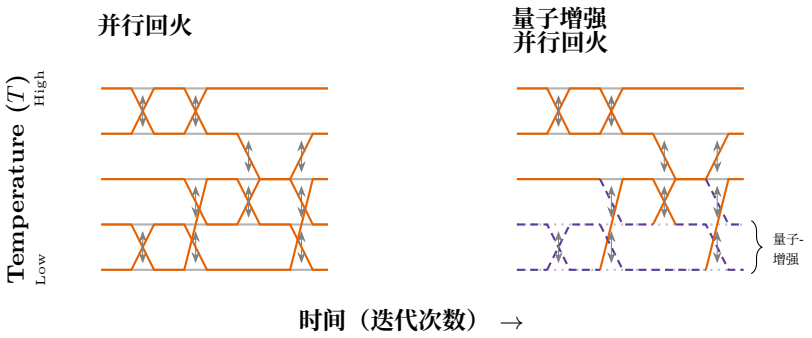


图 5. 并行回火（左）与 QePT（右）的比较，展示了我们的假设：并非所有马尔可夫链都必须经过量子增强，才能实现量子加速。

量子增强马尔可夫链（M_{q}）的数量会发生变化，并且 M_{q} 最低温度的链被设为量子链。QePT 的量子超参数与 QeSA 相同。该算法在 [35] 中实现。

找到合适的退火速率后，图中比较了 QePT 和 PT 的计算开销随规模的变化。6显然，并非所有链都需要采用量子方式，才能胜过经典方法。事实上，仅对最低层的链进行量子增强，就能带来切实的改善。只对整体计算负载中的一小部分灵活地进行量子增强，这一能力为高性能计算-量子计算带来了令人振奋的前景。

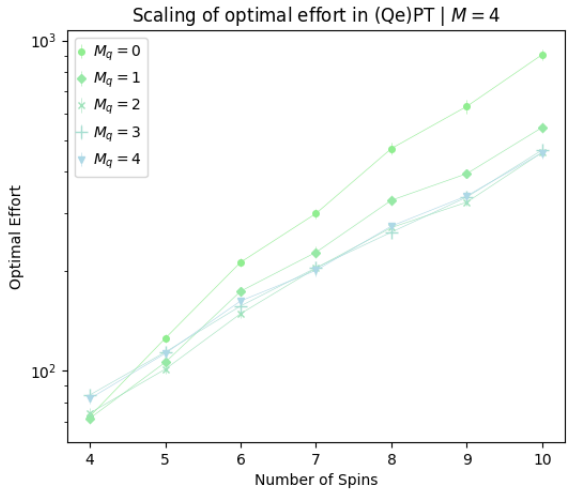


图 6. 并行回火（$M_q = 0$，绿色，三角形）和 QePT（$M_q = 4$，蓝色，圆形）的最优计算工作量随规模的变化。图中还包括含有 M_q 条量子增强链的混合情况，并以绿色至蓝色之间的不同颜色表示。最优计算工作量采用与（Qe）模拟退火相同的方法确定；本图使用了 100 个新的伊辛模型实例。

IV. 讨论

在模拟退火和并行回火中使用量子增强的马尔可夫链，显然有望在组合优化中实现量子规模优势。然而，要量化这些启发式方法的规模效益，就需要在真实量子硬件上进行实验。每步仅执行一次采样的协议具有很高的采样开销，因此即使对于中等规模的系统，对量子增强链进行经典模拟在计算上也难以承受。另一方面，这种协议非常适用于实际的量子计算。

在模拟退火和并行回火中，我们都观察到了使用量子增强链时假设的缩放优势。然而，并行回火的并行化特性使其成为最值得关注的算法，因为它在高性能计算-量子计算领域具有应用潜力。在并行回火包含 4 个副本的示例（图 6）中，使用量子增强链显然减少了找到全局极小值所需的计算工作量。然而，若将高温量子增强副本替换为经典链，这种优势仍大部分得以保留。事实上，我们的结果表明，量子资源带来的边际收益递减；具体而言，仅使用 2 个量子增强副本的配置，性能与完全量子增强系统相近。这种异构并行回火表明，高性能计算-量子计算能够实现极具吸引力的资源与性能权衡。

在运行该算法时，存在许多实际问题。例如，应如何选择哪些副本进行量子增强？在决定任意并行回火中应包含多少副本时，也需要进行类似的选择；与任何启发式方法一样，答案取决于可用资源的最大化与反复试验。根据以往文献 [21, 36] ，我们知道 Sherrington-Kirkpatrick 模型在低于 $t \approx 1$时会迅速变得更难热化，而在许多物理模型中，跨越相变后热化会更加困难。未来，可以利用对问题表述形式的一些了解来推测临界温度；低于这些温度时，量子链将变得有用。

除了传统的超参数外，这一

类量子增强方法还需要精心选择 γ和 t。实证结果表明，在实践中可以找到合适的参数，但也有一些分析论据表明，找到能够改善收敛的参数可能并不容易[22, 37]。在 QePT 中，不同副本可能适用不同的超参数，正如 QeMCMC 在不同温度下的最优值各不相同。

为了进一步利用经典计算能力，可以对链本身进行混合化。换言之，给定的马尔可夫链可以按一定概率执行经典或量子更新提议，从而减少对现有量子资源的依赖，同时仍能从链局域性降低中获得一些优势。在许多情况下，可以结合两种遍历提议机制，就像经典方法中常见的那样，以平衡局部提议和更全局的提议[38]。这只是用户在实现 QePT 时必须考虑的众多实际因素之一，不过目前的高性能计算-量子计算尚未发展到能够实现这些技术的阶段。

现有及近期可用的量子设备存在一些不尽如人意的特性，因此需要谨慎考量。首先是量子误差的存在，不过应当强调，预计 QeMCMC 天然具有韧性。在完全退极化噪声的极限下，QeMCMC 提议会对构型进行均匀采样，这仍是有效的 MCMC 提议。另一个问题是量子处理器运行速度较慢。尽管 QeMCMC 最初的提议通过经验结果表明，相较于经典 MCMC，它可以缩短热化时间，但量子设备执行一个电路所需的时间，比经典计算机翻转一个比特更长。只有在考虑非常大的系统时，快速热化的优势才可能弥补这一初始劣势；不过，将计算任务（例如高温副本）卸载到经典硬件上，可以缓解这一问题。

未来的工作应仔细将我们的方法与其他量子和经典启发式方法进行比较。例如，即使在马尔可夫链蒙特卡罗方法中，也存在多种提议机制，而我们在此并未考虑这些机制 [39–41]。还应与成熟的量子方法进行比较，例如变分量子算法或量子退火；不过，直接比较差异巨大的算法所需的开销（包括量子和经典开销）通常并非易事。组合优化涵盖了种类繁多的计算问题，其中许多问题具有特定的结构性质，因此可以采用效率极高的经典算法。因此，尽管量子增强方法可能对玻璃态景观表现出强大的能力，但它们未必适用于所有问题类别。因此，评估我们的方法在多种问题类型和实例上的表现，对于界定其适用范围至关重要。

V. 结论

本文提出了两种用于组合优化的新方法：量子增强模拟退火（QeSA）和量子增强并行回火（QePT）。两者都是经典技术的量子扩展，而这些经典技术依赖马尔可夫链蒙特卡罗子程序。受 [21], 启发，我们通过采用量子实时演化为马尔可夫链提出新的构型供其探索，从而增强这些算法。我们在模拟硬件上进行了原理验证数值实验，结果清楚表明，我们提出的两种量子增强方法都具有相当大的潜力。具体而言，QePT 通过并行使用经典链和量子链，天然适用于作为一种异构并行回火方法。

尽管本研究聚焦于模拟退火和并行回火，但群体退火和模拟回火等相关经典算法也可能提供类似的量子增强途径。此外，还可以探索量子增强领域中的其他扩展方向，例如粗粒化、受约束系统、量子退火以及量子启发式方法 [22, 23, 36, 42]。当前量子硬件很少支持测试这些算法所需的经典集成，而经典模拟能为我们提供的认识也有限。随着硬件架构不断发展，量子与经典的集成日趋紧密，这类方法的实际效用将越来越容易得到验证。

致谢

感谢 Feroz Hassan 分享有益的讨论。S.F. 感谢英国工程与自然科学研究委员会 DTP博士生奖学金项目 EP/W524311/1 的资助，P.W. 感谢英国工程与自然科学研究委员会项目 EP/X026167/1 和 EP/Z53318X/1 的资助。

[1] L. K. Grover，《用于数据库搜索的快速量子力学算法》，载于 *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing* (1996)，第 212–219 页。[2] P. W. Shor，《量子计算算法：离散对数与因数分解》，载于 *Proceedings 35th annual symposium on foundations of computer science*（IEEE，1994），第 124–134 页。[3] R. Mart、P. M. Pardalos 和 M. G. C. Resende，*Handbook of Heuristics* 1，第 1 版（施普林格出版公司，2018）。[4] A. A. Juan、P. Keenan、R. Martí、S. McGarraghy、J. Panadero、P. Carroll 和 D. Oliva，《启发式方法在随机优化中的作用综述：从元

从学习启发式方法到学习启发式方法，《运营研究年鉴》**320**，831（2023）。[5] D. R. Morrison、S. H. Jacobson、J. J. Sauppe 和 E. C. Sewell，分支定界算法：搜索、分支与剪枝近期进展综述，《离散优化》**19**，79（2016）。[6] H. Buhrman、N. Galke 和 K. Meichanetzidis，量子优势的形式化框架，arXiv 预印本 arXiv:2510.01953（2025）。[7] M. Cerezo、A. Arrasmith、R. Babbush、S. C. Benjamin、S. Endo、K. Fujii、J. R. McClean、K. Mitarai、X. Yuan、L. Cincio、 *et al.*，变分量子算法，《自然综述：物理》**3**，625（2021）。[8] M. Larocca、S. Thanasilp、S. Wang、K. Sharma、J. Biamonte、P. J. Coles、L. Cincio、J. R. McClean、Z. Holmes 和 M. Cerezo，变分量子计算中的贫瘠高原，《自然综述：物理》，1（2025）。[9] A. Rajak、S. Suzuki、A. Dutta 和 B. K. Chakrabarti，量子退火：综述，《英国皇家学会哲学汇刊 A》**381**，20210417（2023）。[10] S. Yarkoni、E. Raponi、T. B¨ack 和 S. Schmitt，工业应用中的量子退火：介绍与综述，《物理学进展报告》**85**，104001（2022）。[11] M. Motta、C. Sun、A. T. Tan、M. J. O'Rourke、E. Ye、A. J. Minnich、F. G. Brandao 和 G. K.-L. Chan，使用量子虚时间演化在量子计算机上确定本征态和热态，《自然物理》**16**，205（2020）。[12] S. McArdle、T. Jones、S. Endo、Y. Li、S. C. Benjamin 和 X. Yuan，基于变分拟设的虚时间演化量子模拟，《npj 量子信息》**5**，75（2019）。[13] I. Kolotouros、D. Joseph 和 A. K. Narayanan，利用随机测量加速量子虚时间演化，Physical Review A **111**，012424（2025）。[14] T. Bennett、L. Noakes 和 J. Wang，非变分量子组合优化，载于 *2024 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)* 卷 1（IEEE，2024）第 31–41 页。[15] Y. Nakano 和 K. Fujii，使用混合量子-经典马尔可夫链蒙特卡罗算法对基态构型进行公平采样，arXiv 预印本 arXiv:2512.14552（2025）。[16] X. Zhu、Z. Zou、F. Jin、P. Mosharev、M. Luo、Y. Wu、J. Chen、C. Zhang、Y. Gao、N. Wang、 *et al.*，利用含有 104 个超导量子比特的浅层量子电路增强组合优化，arXiv 预印本 arXiv:2509.11535（2025）。[17] I. ˇCepait˙e、N. Vaishnav、L. Zhou 和 A. Montanaro，利用暖启动实现量子增强优化，arXiv 预印本 arXiv:2508.16309（2025）。[18] R. Somma、S. Boixo 和 H. Barnum，量子模拟退火（2007）。[19] Z. Chen、J. Basso、Z. Ding 和 L. Lin，量子副本交换，arXiv 预印本 arXiv:2510.07291（2025）。[20] T. Albash、C. Smith、Q. Campbell 和 A. D. Baczewski，利用人工神经网络进行基态近似的量子启发式回火，《SciPost 物理》**14**，121（2023）。[21] D. Layden、G. Mazzola、R. V. Mishmash、M. Motta、P. Wocjan、J.-S. Kim 和 S. Sheldon，量子增强马尔可夫链蒙特卡罗，《自然》**619**，282（2023）。[22] J. Christmann、P. Ivashkov、M. Chiurco 和 G. Mazzola，从量子增强到量子启发式蒙特卡洛，Physical Review A 111，042615（2025）。[23] S. Arai 和 T. Kadowaki，量子退火增强的马尔可夫链蒙特卡罗，Scientific Reports 15，21427（2025）。[24] A. Orfi 和 D. Sels，量子增强马尔可夫链蒙特卡罗算法加速的界限，Physical Review A 110，052414（2024）。[25] W. K. Hastings，使用马尔可夫链的蒙特卡洛抽样方法及其应用，Biometrika 57，235 256 1970–（）。[26] N. Metropolis、A. W. Rosenbluth、M. N. Rosenbluth、A. H. Teller 和 E. Teller，通过快速计算机进行状态方程计算，The journal of chemical physics 21，1087（1953）。[27] D. A. Levin 和 Y. Peres，*Markov chains and mixing times* 卷 107（American Mathematical Soc.，2017）。[28] D. Bertsimas 和 J. Tsitsiklis，模拟退火，Statistical science 8，10（1993）。[29] S. Kirkpatrick、C. D. Gelatt Jr 和 M. P. Vecchi，通过模拟退火进行优化，science 220，671（1983）。[30] T. F. Rønnow、Z. Wang、J. Job、S. Boixo、S. V. Isakov、D. Wecker、J. M. Martinis、D. A. Lidar 和 M. Troyer，定义并检测量子加速，science 345，420 2014（）。[31] D. Herr、E. Brown、B. Heim、M. K¨onz、G. Mazzola 和 M. Troyer，优化量子退火的调度方案，arXiv 预印本 arXiv:1705.00420（2017）。[32] S. Ferguson，量子增强模拟退火，https://github.com/Stuartferguson00/QeSA（2026）。[33] H. Lee 和 Z. Shen，并行回火混合时间的改进界限，arXiv 预印本 arXiv:2304.01303（2023）。[34] D. B. Woodard、S. C. Schmidler 和 M. Huber，多峰分布上并行回火与模拟退火快速混合的条件，The Annals of Applied Probability 19（2009）。[35] S. Ferguson，量子增强并行回火，https://github.com/Stuartferguson00/QeSA（2026）。[36] S. Ferguson 和 P. Wallden，用于大于量子计算机规模系统的量子增强马尔可夫链蒙特卡罗，Physical Review Research 7，013231 2025（）。[37] A. Orfi 和 D. Sels，量子增强马尔可夫链需要精细调谐淬火，arXiv 预印本 arXiv:2408.07881（2024）。[38] L. Tierney，用于探索后验分布的马尔可夫链，The Annals of Statistics，1701（1994）。[39] U. Wolff，自旋系统的集体蒙特卡洛更新，Physical Review Letters 62，361（1989）。[40] S. Park、Y. Jang、A. Galanis、J. Shin、D. Stefankovic 和 E. Vigoda，随机分区吸引模型的快速混合 Swendsen-Wang 抽样器，载于 *Artificial Intelligence and Statistics* 2017 440–449（PMLR，）第 – 页。[41] R. H. Swendsen 和 J.-S. Wang，蒙特卡洛模拟中的非普适临界动力学，Physical review letters 58，86（1987）。[42] S. Ferguson、A. Nasiri 和 P. Wallden，量子增强马尔可夫链蒙特卡罗下离散时空的动力学，arXiv 预印本 arXiv:2506.19538（2025）。

附录 A：扩展数值结果

本节提供了正文中未包含的（Qe）模拟退火数值结果。在图7中，绘制了成功概率与步数的关系，针对 $\{5,6,7,8,9\}$ 个自旋。在图8中，绘制了每个自旋数对应的计算工作量。最后，在图9中，针对我们所考虑的每个 n 绘制了最优步数（通过图8中的二次拟合得到）。

我们还给出了 PT 的最优步数与 n 的关系，但没有给出概率和计算工作量图，因为数据量过大。PT 情况下所用的方法与 SA 的方法完全相同。

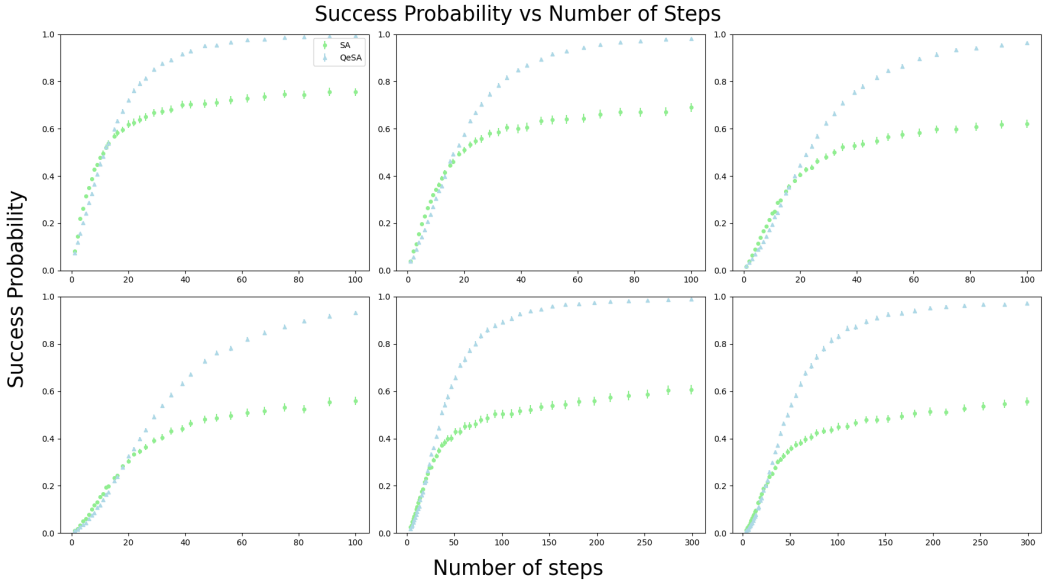


图 7. 在单次 SA（绿色，圆形）或 QeSA（蓝色，三角形）运行中，找到全局极小值的概率与运行步数的关系。自然，较慢的退火过程更有可能找到最优构型，但代价是需要更多步数。此处的每个子图均对应图 2，但针对 $n = \{4,5,6,7,8,9\}$。请注意，各子图的 x 轴刻度不同。

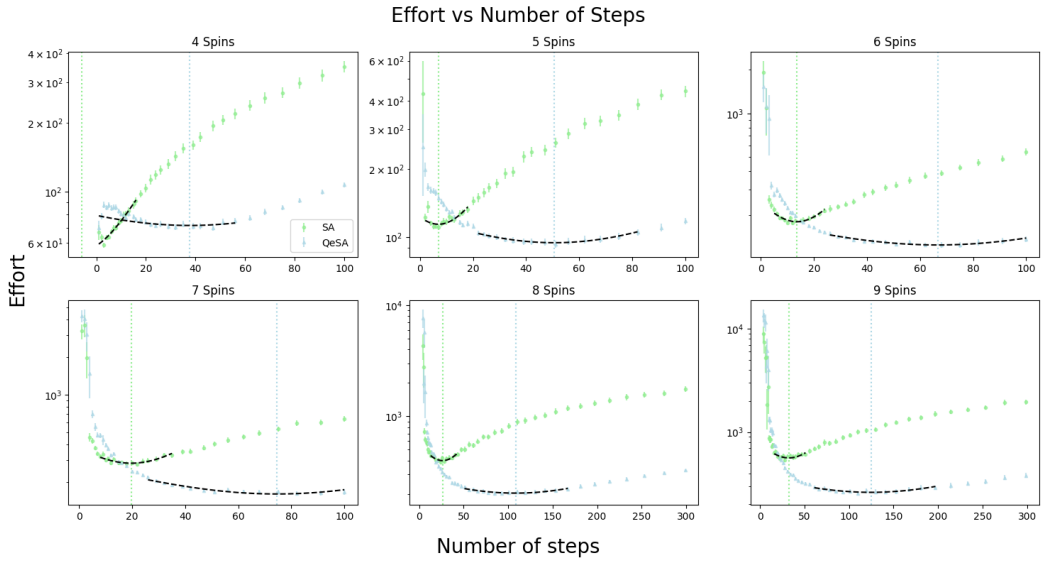


图 8. 在单次 SA（绿色，圆形）或 QeSA（蓝色，三角形）运行中，找到全局极小值所需的计算开销与运行步数的关系。退火过程存在一个最优长度；超过该长度后，与其进行更少次的长退火，不如进行额外的短退火，效率更高。此处的每个子图均对应图 3，但使用 $n = \{4,5,6,7,8,9\}$。对于 $n = 4$，系统过于简单，因此极短的退火过程也有用，二次拟合的效果较差。请注意，各子图的 x 轴和 y 轴刻度均不同。

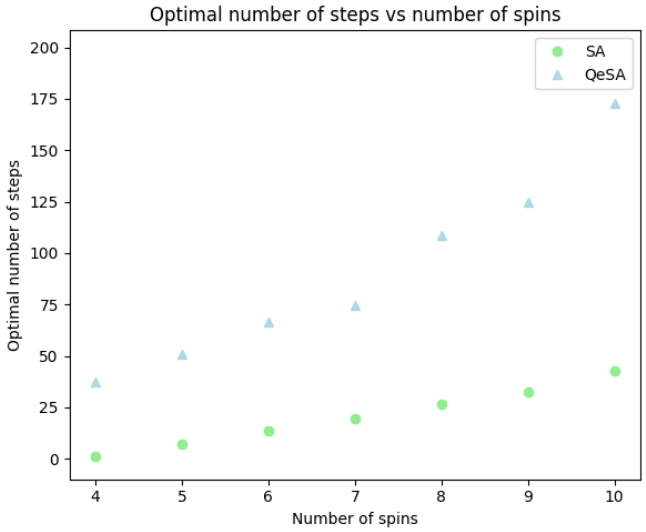


图 9. 最优步数（通过图 3和图 8中的二次拟合得到），相对于 n .

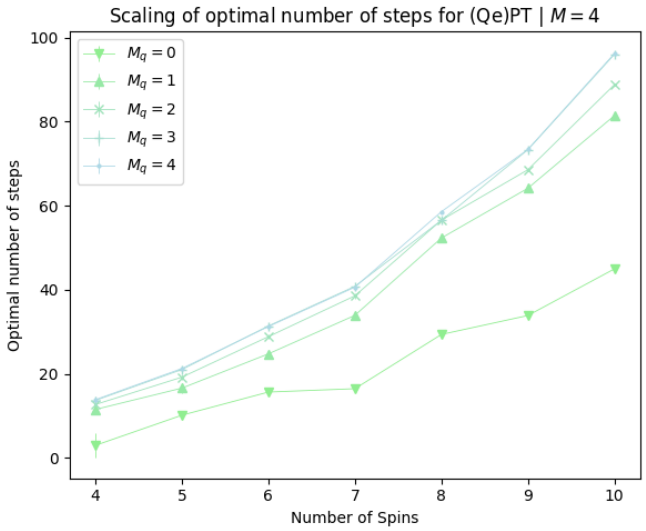


FIG. 10. 最优步数（通过与图 3类似的二次拟合得到，但针对并行回火），相对于 n.