

## 量子近似优化算法在约束优化问题中的应用

刘畅, 张学锋

安徽工业大学 计算机科学与技术学院, 安徽 马鞍山 243000

**摘要:** 结合量子近似优化算法求解约束优化问题是当前的研究热点之一, 针对约束优化问题, 提出了一种在量子近似优化算法框架中的改进方法; 此方法融合了二次无约束二元优化和量子交替拟设这两种方法, 同时将在目标算符中添加惩罚项, 将不符合解的期望值降低和通过对问题进行求解得出问题的可行解, 将混合操作限定在可行解空间内融合在一起; 优点在于在求解约束优化问题时, 能减小迭代次数, 快速并准确地得到问题的最优解; 以最小顶点覆盖问题为例, 将提出的方法与几种已有的方法做比较, 得出方法能减小量子近似优化算法的迭代次数, 使得能够高质量和高效率的求解约束优化问题。

**关键词:** 量子近似优化算法; 最小顶点覆盖问题; 惩罚项; 可行解

**中图分类号:** TP391.4 **文献标识码:** A **doi:** 10.16055/j.issn.1672-058X.2023.0006.009

### Application of Quantum Approximate Optimization Algorithm to Constrained Optimization Problems

LIU Chang, ZHANG Xuefeng

School of Computer Science and Technology, Anhui University of Technology, Anhui Maanshan 243000, China

**Abstract:** Combining quantum approximate optimization algorithm to solve the constrained optimization problem is one of the current research hotspots. In order to solve the constrained optimization problem, an improved method is proposed in the framework of the quantum approximate optimization algorithm. This method combines the quadratic unconstrained binary optimization method and the quantum alternate ansatz method, adds penalty term to the target operator, reduces the expected value of nonconforming solution and obtains feasible solution by solving the problem, and limits the mixing operation to the feasible solution space and fuses together. The advantage of this method is that it can reduce the number of iterations and get the optimal solution quickly and accurately when solving constrained optimization problems. Taking the minimum vertex coverage problem as an example, the proposed method is compared with several existing methods, and it is concluded that the proposed method can reduce the number of iterations of the quantum approximate optimization algorithm, so that the constrained optimization problem can be solved with high quality and high efficiency.

**Keywords:** quantum approximate optimization algorithm; minimum vertex coverage; penalty term; feasible solution

## 1 引言

量子近似优化算法(Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)是一种可变量子算法, 旨在为组合优化问题提供解决方案。由于量子近似优化算法的核心问题是计算目标哈密顿量期望值, 在一般的浅层量子电

路上, 能否找到一种求解量子期望值的有效经典算法以便快速获取最佳可变参数对于在含噪声的中型量子硬件上展示潜在的量子优势至关重要。在量子近似优化算法背景下求解带约束的组合优化问题时, 需要找到一种将问题的约束编码到方案中的方法。对于约束

收稿日期: 2022-03-21 修回日期: 2022-05-07 文章编号: 1672-058X(2023)06-0068-06

基金项目: 安徽省教育厅自然科学重点研究项目(KJ2020A0233)。

作者简介: 刘畅(1996—), 女, 安徽六安人, 硕士研究生, 从事人工智能和量子计算研究。

引用格式: 刘畅, 张学锋. 量子近似优化算法在约束优化问题中的应用[J]. 重庆工商大学学报(自然科学版), 2023, 40(6): 68—73.

LIU Chang, ZHANG Xuefeng. Application of quantum approximate optimization algorithm to constrained optimization problems [J]. Journal of Chongqing Technology and Business University (Natural Science Edition), 2023, 40(6): 68—73.

问题,在 QAOA 中有两种处理约束的方法。

第一种是二次无约束二元优化方法,是当有约束违反时,在目标算符中加入惩罚项<sup>[1-3]</sup>,将不符合解的期望值降低,但初始时需要在全部解集上迭代,使得迭代次数变多。另一种方法是量子交替拟设方法,主要思想是重新设计编码了约束条件的演化算符,使得量子态演化限制在可行解范围内<sup>[4-6]</sup>,虽然初始时混合操作被限制在可行解空间中,但向目标函数演化时,最优解的期望值不一定是最优的,使得用该方法求解出问题的最优解不一定是问题的最优解,准确性较低。

对于约束优化问题融合了二次无约束二元优化方法和量子交替拟设方法这两种方法,通过将约束问题中不符合约束条件的解剔除,只留下可行解作为量子近似优化算法框架的初始基态,使得混合操作在初始基态上进行。数值证明了这可以提供更高质量的解。并在目标函数中添加惩罚项,将对角线中不符合解的期望降低。将一个约束问题转变成一个无约束问题,从而高质量解决一般约束问题。

## 2 最小顶点覆盖问题

最小顶点覆盖 (Minimum Vertex Cover, MVC) 问题是一个著名的 NP-hard 问题<sup>[7]</sup>。最小顶点覆盖问题描述为:给定一个图  $G=(V,E)$ ,其中  $V$  是图的顶点集, $E$  是边集。 $A$  为  $V$  的子集,若  $G$  中的每一条边都至少接触集合  $A$  中的一个顶点,则称  $A$  为覆盖集,包含顶点最少的  $A$  则称为最小顶点覆盖集。

$A$  中的顶点可用一个取值为 0 或 1 的变量  $x_i$  表示, $x_i=1$  表示图中对应的顶点  $i$  在覆盖集  $A$  中, $x_i=0$  表示顶点  $i$  不在  $A$  中。那么, $A$  可以用向量  $x$  表示, $x=(x_i) \in \{0,1\}^{|V|}$ ,并满足约束:任意的  $(i,j) \in E, x_i=1$  或者  $x_j=1$ 。由此,该问题即是寻找  $x^*$ :

$$\begin{aligned} |x^*| = \text{minimize} & \sum_{i \in V} x_i \\ \text{subject to} & \text{all } (i,j) \in E, \text{ then } x_i=1 \vee x_j=1 \end{aligned}$$

## 3 量子近似优化算法

### 3.1 绝热量子计算

绝热量子计算 (Adiabatic Quantum Computation, AQC) 是一种通过连续绝热量子演化的方式来解决计

算问题的量子计算模型。对于一个物理系统,其哈密顿量是可以调控的。针对一个给定的问题,找到目标哈密顿量,在准备一个具有简单哈密顿量的系统并初始化为基态,简单的哈密顿量绝热地演化为期望的目标哈密顿量。最后系统的状态描述了问题的解决方案。

绝热量子计算是通过以下过程解决特定问题和其他组合搜索问题。通常这种问题就是寻找一种状态满足  $C_1 \wedge C_2 \wedge \dots \wedge C_M$ ,表达式包含可满足条件的  $M$  个子问题,每个子问题  $C_i$  值为 True 或 False,并且可能包含  $n$  位,这里的每一位都是一个变量  $x_j \in \{0,1\}$  所以  $C_i$  是一个关于  $x_1, x_2, \dots, x_n$  的布尔值函数,绝热量子算法利用量子绝热演化解了这类问题。它以初始哈密顿量  $H_B$  开始:

$$H_B = H_{B_1} + H_{B_2} + \dots + H_{B_M}$$

这里  $H_{B_i}$  对应于该子问题  $C_i$  的哈密顿量,通常选择的  $H_{B_i}$  不会依赖于其他的子问题。然后经历绝热演化,以问题的哈密顿量  $H_p$  结束:

$$H_p = \sum_C H_{P,C}$$

这里  $H_{P,C}$  是满足问题  $C$  的哈密顿量,它有特征值 0 和 1。如果子问题  $C$  满足条件,则特征值为 1,不满足则特征值为 0。对于一个简单的绝热演化路径,如图 1 所示。

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) H_B + \frac{t}{T} H_p$$

令  $s = \frac{t}{T}$ ,则有:

$$\tilde{H}(t) = (1-s)H_B + (s)H_p$$

这就是算法的绝热演化哈密顿量。

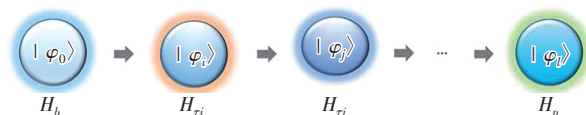


图 1 绝热演化路径

Fig. 1 Adiabatic evolutionary path

根据绝热定理,从哈密顿量的基态开始  $H_B$ ,首先,经历一个绝热过程,最后以问题哈密顿量的基态结束  $H_p$ ,然后测量最终状态  $n$  个自旋的  $z$  分量,这将产生一个字符串  $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$  这很可能就是问题的结果。

### 3.2 量子近似优化算法

量子近似优化算法是由 Farhi 等提出的一种启发式算法,作为一种近似算法,它并不是给出最好的结果,而是给出一个“足够好”的结果。量子近似优化算法是一种利用经典和量子资源寻找组合优化问题近似解的算法框架<sup>[8-10]</sup>,从量子绝热算法的近似推导而来。在求解具有约束的组合优化问题时,需要找到一种将问题约束编码到方案中的方法,并通过期望的质量来解决每个问题实例。

量子近似优化算法受到绝热定理的启发,构造类似绝热演化的参数化量子电路来求解目标哈密顿量的基态。量子近似优化算法的工作流程如图 2 所示,首先制备一个初态  $|s\rangle$ ,然后需要以目标哈密顿量  $\hat{C}$  和混合哈密顿量  $\hat{B}$  为生成元制备两个酉变换,分别为  $U(\hat{C}, \gamma_i) = e^{-i\gamma_i \hat{C}}$  和  $U(\hat{B}, \beta_i) = e^{-i\beta_i \hat{B}}$ ,  $i=1, 2, \dots, k$ 。

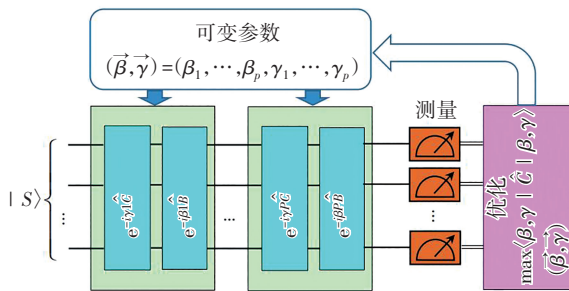


图 2 QAOA 的工作流程

Fig. 2 Work flow of quantum approximate optimization algorithm (QAOA)

交替使用含有参数的  $U(\hat{C}, \gamma_i)$  和  $U(\hat{B}, \beta_i)$  两个酉变换作用于量子叠加态  $|s\rangle$  上。经过  $p$  步的演化,得到的量子态如式(1)所示:

$$|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle \leftarrow e^{-i\beta_p \hat{B}} e^{-i\gamma_p \hat{C}} \dots e^{-i\beta_1 \hat{B}} e^{-i\gamma_1 \hat{C}} |s\rangle \quad (1)$$

其中  $\beta_i, \gamma_i \in [-\pi, \pi]$ ,  $\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)$ ,  $\vec{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_p)$ 。 $n$  为量子位或二进制变量的个数。选取适合的初始态和混合算子将  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  限制在约束优化问题可行解的子空间中。为了找到  $\hat{C}$  的最高能量本征值,利用经典优化器优化参数  $\vec{\beta}, \vec{\gamma}$ 。通过计算基对量子态  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  进行测量,得到  $\hat{C}$  在  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  上的期望值如式(2)所示:

$$f(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) \leftarrow \langle \psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) | \hat{C} | \psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) \rangle \quad (2)$$

$\exists p$ , 使得  $\beta_*, \gamma_* = \operatorname{argmax}_{\vec{\beta}, \vec{\gamma}} f(\vec{\beta}, \vec{\gamma})$ , 得到的量子态  $|\psi(\beta_*, \gamma_*)\rangle$  编码了经典组合问题的最优解。

### 3.3 二次无约束二元优化方法

二次无约束二元优化方法是对量子近似优化算法的改进算法,现已被广泛研究,并被用于建模和解决许多类别的优化问题。约束优化问题的目标是最小化或最大化一个代价函数,这个代价函数在物理上可以解释为找到一个典型的伊辛哈密顿函数的基态。二次无约束二元优化方法通过预处理将问题的约束条件转换到代价函数中,从而提高解的质量和运行时间。二次无约束二元优化的一个主要优点是它提供了一个统一的算法框架,适用于解决许多类型的问题。

在处理带约束的优化问题时,二次无约束二元优化方法通过在哈密顿量  $\hat{C}$  中添加惩罚项,将不符合问题的期望值比符合问题期望值的解要差,使得在量子近似优化算法框架中能更快地得到准确的期望值。

### 3.4 量子交替拟设方法

HADFIELD 等扩展了量子近似优化算法框架,根据不同问题设置了不同的基态代替了固定的初始基态,将全集均匀叠加态转化为可行解均匀叠加态,这个扩展的实质被称为量子交替算符拟设方法。对于只需要在期望的子空间内进行混合的情况,初始哈密顿量在可行解子空间基态上混合运行能够得到比在原始框架中更高效的结果。这种方法对于具有约束的优化问题特别有用,将满足约束条件的集合定义为一个可行解子空间。使得在量子近似优化算法的框架下更高效地得到问题的最好结果。

在处理带约束的问题时,量子交替算符拟设方法的初始量子态只包含可行解演化空间,即求解的带约束的优化问题中满足约束的所有解集合。混合哈密顿量  $\hat{B}$  将量子态的演化限制在约束优化问题可行解空间中。

## 4 基于 QAOA 的 MVC 问题求解

### 4.1 提出方法的算法描述

根据最小顶点覆盖问题的定义,给出了在量子近似优化算法框架中的解决方案。求解的过程如算法 1 所示:

算法 1: 求解最小顶点覆盖问题

输入: 图  $G=(V,E)$ , 迭代次数  $p$

输出: 最小顶点覆盖集  $A$

- 1)  $A \leftarrow \text{satisfy\_constraints}(G)$   
//satisfy\_constraints 为求解出图  $G$  的满足约束的所有解,  $A$  为可行解集合
- 2)  $\Omega \leftarrow \{x \in \text{binary\_system}(A)\}$   
//binary\_system 为将集合  $A$  转化为二进制集合,  $x$  为二进制向量
- 3) 初始化:  $\vec{\beta}, \vec{\gamma} \leftarrow \text{rand}(-\pi, \pi)$
- 4)  $|s\rangle \leftarrow \Omega$
- 5)  $\hat{B} \leftarrow \sum_{i=1}^n (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y)$
- 6)  $\hat{C} \leftarrow \sum_{x=0}^{2^n-1} x \cdot e |x\rangle \langle x| + 2 * \sum_{(i,j) \in E} \frac{\sigma_i^z + 1}{2} * \frac{\sigma_j^z + 1}{2}$
- 7)  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle \leftarrow e^{-i\vec{\beta} \cdot \hat{B}} e^{-i\vec{\gamma} \cdot \hat{C}} \dots e^{-i\beta_1 \hat{B}} e^{-i\gamma_1 \hat{C}} |s\rangle$
- 8)  $f(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) \leftarrow \langle \psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) | \hat{C} | \psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma}) \rangle$
- 9)  $\beta_*, \gamma_* \leftarrow \text{Simplex\_optimize}(\text{argmax}_{\vec{\beta}, \vec{\gamma}} f(\vec{\beta}, \vec{\gamma}))$   
//Simplex\_optimize 为单纯性优化方法
- 10)  $A \leftarrow \text{measure\_max}(|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle)$   
//测量  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  中最大概率对应的二进制向量  $A$
- 11) return  $A$

在本文给出的方法中,融合了在 3.3 节和 3.4 节中提出的两种方法。首先,对约束问题进行处理,求解出所有满足约束的解。该解作为可行解空间,用来制备初始的量子态,初始量子态为可行解均匀叠加态。哈密顿量  $\hat{B}$  的构造如式(3)所示,哈密顿量  $\hat{B}$  在可行解空间中进行混合操作(图 3),方法通过限制可行解范围,对  $\hat{B}$  进行约束。构造的哈密顿量  $\hat{B}$  如图 3(b)所示,可以看作是一个图,顶点之间的边可以看作两个状态之间构成的线路。酉算子  $e^{-i\vec{\beta} \cdot \hat{B}}$  在这个图上进行连续量子游走<sup>[6]</sup>。

$$\hat{B} \leftarrow \sum_{i=1}^n (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) \quad (3)$$

并通过在  $\hat{C}$  中添加惩罚项,来保证优秀解的期望

值更好。根据最小顶点覆盖问题的构造的哈密顿量  $\hat{C}$  如式(4)所示<sup>[3]</sup>:

$$\hat{C} \leftarrow \sum_{x=0}^{2^n-1} x \cdot e |x\rangle \langle x| + 2 * \sum_{(i,j) \in E} \frac{\sigma_i^z + 1}{2} * \frac{\sigma_j^z + 1}{2} \quad (4)$$

在目标哈密顿量  $\hat{C}$  中,  $\sum_{x=0}^{2^n-1} x \cdot e |x\rangle \langle x|$  表示选择的顶点个数,其中  $\vec{x} = x_0 x_1 \dots x_{n-1}$ ,  $x_i = 1$  或 0 表示第  $i$  节点被选择或者不被选择,  $\vec{e} = (11 \dots 1)^T$ 。

惩罚项  $2 * \sum_{(i,j) \in E} \frac{\sigma_i^z + 1}{2} * \frac{\sigma_j^z + 1}{2}$  表示加上未选择的顶点之间的边数。这有效地将约束问题简化为一个无约束问题去进行处理。通过经典优化器(做实验时使用的优化方法为单纯性优化方法)优化参数  $\vec{\beta}, \vec{\gamma}$ , 最后通过对量子态  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  进行测量,得到  $\hat{C}$  在  $|\psi(\vec{\beta}, \vec{\gamma})\rangle$  上的最好期望值对应的二进制向量,该向量对应的就是问题的解。

#### 4.2 对比方法的算法描述

在本节中,将讨论一些对比方法。

(1) 经典方法。经典方法中的解空间为全集(包含可行解和不可行解),故初始量子态为全集均匀叠加量子态,哈密顿量  $\hat{C}$  与提出方法一样,都添加了惩罚项<sup>[3]</sup>。

$$|s\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle$$

$$\hat{B} = \sum_i \sigma_i^x$$

$$\hat{C} = \sum_{x=0}^{2^n-1} x \cdot e |x\rangle \langle x| + \sum_{(i,j) \in E} \frac{\sigma_i^z + 1}{2} * \frac{\sigma_j^z + 1}{2}$$

(2) QAOA+。该方法与量子近似优化算法的区别是哈密顿量  $\hat{C}$  只包含惩罚项。这样做的意义为通过解析的方式分析每一步的效果,在最后求解期望时,仍然用经典方法中的哈密顿量  $\hat{C}$  进行求解<sup>[12-13]</sup>。

$$|s\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle$$

$$\hat{B} = \sum_i \sigma_i^x$$





远。反之,无偏差的均匀叠加状态更有利于后续进化到最终最优状态。

提出的方法优于经典方法,因为提出的方法的演化空间更小,收敛到最优解的迭代次数减少。所以在图4中,可以看到提出的算法的性能非常优异。

## 5 结论

研究提出了新的方法并回顾了现有的方法,将这些方法应用到带有约束的最小顶点覆盖问题中。提出的方法中,先确定可行解空间,使初始态为可行解的均匀叠加态。这样做缩小了初始态的范围,使混合操作限定在可行解空间内,对混合算子进行了约束,将一个不等式约束问题转化为等式约束问题。再在目标函数中添加惩罚项,将对角线中不符合解的期望降低。将一个约束问题转变成一个无约束问题。同其他方法相比较,方案可高效率、高准确性地解决问题。

在未来的工作中,计划将提出的方案变成量子线路。并将应用于其他约束组合优化问题,如最大割问题、旅行商问题等。这些问题在许多学科中都有重要的应用,并将研究基于机器学习的量子近似优化算法方法应用于约束组合优化问题中。

## 参考文献(References):

- [1] GLOVER F, LEWIS M, KOCHENBERGER G. Logical and inequality implications for reducing the size and difficulty of quadratic unconstrained binary optimization problems [J]. *European Journal of Operational Research*, 2018, 265(3): 829—842.
- [2] PAPALITSAS C, ANDRONIKOS T, GIANNAKIS K, et al. A QUBO model for the traveling salesman problem with time windows[J]. *Algorithms*, 2019, 12(11): 224—224.
- [3] LUCAS A. Ising formulations of many NP problems [J]. *Frontiers in Physics*, 2014(2): 5—12.
- [4] SALEEM Z H. Max-independent set and the quantum alternating operator ansatz[J]. *International Journal of Quantum Information*, 2020, 18(4): 10—17.
- [5] WANG Z H, RUBIN N C, DOMINY J M, et al. XY mixers: Analytical and numerical results for the quantum alternating operator ansatz [J]. *Physical Review A*, 2020, 101(1): 55—64.
- [6] HADFIELD S, WANG Z H, O' GORMAN B, et al. From the quantum approximate optimization algorithm to a quantum alternating operator ansatz [J]. *Algorithms*, 2019, 12(2): 34—34.
- [7] KHAIRY S, SHAYDULIN R, CINCIO L, et al. Learning to optimize variational quantum circuits to solve combinatorial problems [J]. *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, 2020, 34(3): 2367—2375.
- [8] WILLSCH M, WILLSCH D, JIN F P, et al. Benchmarking the quantum approximate optimization algorithm [J]. *Quantum Information Processing*, 2020, 19(7): 1—24.
- [9] REBEKAH H, LORNA T, JAMES O, et al. Empirical performance bounds for quantum approximate optimization[J]. *Quantum Information Processing*, 2021, 20(12): 403—403.
- [10] ANDREW A, LUKASZ C, ANDREW T S, et al. Variational consistent histories as a hybrid algorithm for quantum foundations[J]. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 1—7.
- [11] LLOYD S, MOHSENI M, REBENTROST P. Quantum principal component analysis[J]. *Nature Physics*, 2014, 10(9): 108—113.
- [12] FARHI E, GAMARNIK D, GUTMANN S. The quantum approximate optimization algorithm needs to see the whole graph: A typical case[J]. *ArXiv preprints arXiv*, 2020(5): 91—97.
- [13] FARHI E, GAMARNIK D, GUTMANN S. The quantum approximate optimization algorithm needs to see the whole graph: Worst case examples[J]. *ArXiv preprints arXiv*, 2020(11): 45—53.
- [14] EGGER D J, MAREČEK J, WOERNER S. Warm-starting quantum optimization[J]. *Quantum*, 2021(5): 479—479.