

# 一种求解图分割问题的量子近似优化算法

袁志强, 杨思春, 阮越, 薛希玲, 陶陶\*

(安徽工业大学计算机科学与技术学院, 安徽马鞍山 243032)

**摘要:** 量子近似优化算法(Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)是求解组合优化问题的算法框架,是近期最有可能展示量子计算优势的算法之一。在QAOA框架内,表征解的量子态采取的二进制编码方案导致的对称性限制了QAOA的性能。为了克服这一局限性,本文受Dicke态制备算法的启发,给出了一种新的解编码方案,消除了现有编码方案中的对称性。本文还设计了新的演化算子——星图(Star Graph, SG)算子,及其对应的SG算法,给出了算法求解图分割问题时的量子电路。在IBM Q上的实验结果显示,星图算法比标准QAO算法平均约有25.3%的性能提升。

**关键词:** 量子近似优化算法;组合优化问题;星图算子;星图算法;图分割

**基金项目:** 国家自然科学基金(No.61802002);安徽省自然科学基金(No.1708085MF162, No.1908085MF212);安徽省高校自然科学基金重点项目(No. KJ2020A0233, No. 2022AH050319);安徽省重点研究与开发计划项目(No.201904d07020020)

中图分类号: TP301.6

文献标识码: A

文章编号: 0372-2112(2024)06-2025-12

电子学报URL: <http://www.ejournal.org.cn>

DOI: 10.12263/DZXB.20220784

## Quantum Approximate Optimization Algorithm for Graph Partitioning

YUAN Zhi-qiang, YANG Si-chun, RUAN Yue, XUE Xi-ling, TAO Tao\*

(School of Computer Science and Technology, Anhui University of Technology, Ma'anshan, Anhui 243032, China)

**Abstract:** Quantum approximate optimization algorithm (QAOA) is an algorithm framework for solving combinatorial optimization problems. It is regarded as one of the promising candidates to demonstrate the advantages of quantum computing in the near future. Within the QAOA framework, the symmetries of quantum states induced by the binary encoding scheme restrain the performance of QAOA. Inspired by the Dicke state preparation algorithm, we proposed a new encoding scheme that eliminated the symmetry of quantum states representing solutions. Beyond that, we also proposed a novel evolution operator, star graph (SG) mixer, and its corresponding SG algorithm. The quantum circuit implementation of the SG algorithm on IBM Q showed the SG algorithm has an average performance improvement of about 25.3% over the standard QAOA algorithm in solving the graph partitioning problem.

**Key words:** quantum approximate optimization algorithm; combinatorial optimization; star graph mixer; star graph algorithm; graph partitioning

**Foundation Item(s):** National Natural Science Foundation of China (No.61802002); Natural Science Foundation of Anhui Province (No.1708085MF162, No.1908085MF212); Anhui Provincial Key Research and Development Project (No.KJ2020A0233, No.2022AH050319); Key Research and Development Project of Anhui Province (No.201904d07020020)

## 1 引言

量子近似优化算法(Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)是Farhi等人在2014年提出的求解组合优化问题的算法框架<sup>[1]</sup>。它是一种启发式的算法,用于寻找组合优化问题的近似解,实验结果显示,它在Max-Cut, Max E3-LIN2等问题上可以取得优于

经典随机算法的近似解<sup>[1,2]</sup>。该算法被提出后,得到广泛关注<sup>[3-8]</sup>。量子霸权(quantum supremacy)提出者John Preskill认为该算法是最有可能在近期的含噪中型量子(Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ)时代展示量子计算相对于经典计算优势的算法之一<sup>[9]</sup>。

QAOA是应用Trotter定理对量子绝热算法(Quantum Adiabatic Algorithm, QAA)的近似<sup>[10,11]</sup>,最初被用来

求解 Max-Cut 问题. 它将 QAA 中随时间演化的哈密顿量拆分成与时间无关的瞬时哈密顿量, 并诱导出两个酉算子  $U_{H_B}(\beta_t) = e^{-i\beta_t H_B}$  和  $U_{H_C}(\gamma_t) = e^{-i\gamma_t H_C}$  ( $t=1, 2, \dots, p$ ,  $H_B$  称为“混合哈密顿量”对应 QAA 的初始哈密顿量,  $H_C$  称为“问题哈密顿量”对应 QAA 的终止哈密顿量), 然后利用经典优化过程调节参数  $\beta$  和  $\gamma$  来近似最优绝热演化路径, 最终在演化的终态中获取问题的解<sup>[12]</sup>, 其演化过程可表示为

$$|\beta, \gamma\rangle = U_{H_B}(\beta_p) U_{H_C}(\gamma_p) \cdots U_{H_B}(\beta_1) U_{H_C}(\gamma_1) |s\rangle \quad (1)$$

其中,  $|s\rangle$  是初态,  $\beta$  和  $\gamma$  是需要调节的参数.

Max-Cut 问题是无约束优化问题, 但是现实中众多的优化问题只能规约为有约束的优化问题. 那么在 QAOA 框架中如何有效地处理问题的约束就成了一个具有挑战性的问题. 目前的方法主要有两种.

一种方法是将约束优化问题转换为二次无约束二元优化 (Quadratic Unconstrained Binary Optimization, QUBO) 问题, 即在问题哈密顿量  $H_C$  中加入惩罚项  $H_P$ <sup>[13]</sup>, 保证不可行解的期望值比可行解的期望值差. 基于此, 近年来研究者们提出了一些改进方案. Farhi 等人<sup>[14,15]</sup> 提出的 QAOA+ 通过在执行的过程中简化  $U_{H_C}(\gamma_t)$  (使用惩罚项  $H_P$  代替  $U_{H_C}(\gamma_t)$  中的  $H_C$ ), 最后再添加修剪步骤以获取最佳的解方案. Bravyi 等人<sup>[16]</sup> 提出 RQAOA (Recursive QAOA) 通过迭代的方法逐步消除相关的项以减少问题的规模. Egger 等人<sup>[17]</sup> 提出的 WSQAOA (Warm-Starting QAOA) 通过制备与经典松弛解相对应的初始状态来热启动量子优化, 试图提高获取解的速度. Chai 等人<sup>[18]</sup> 提出的 S-QAOA (Shortcuts to QAOA) 在已有 ZZ 相互作用的基础上, 还引入了其他两体相互作用, 从而加速 QAOA 的优化. 这一类方法在迭代中有一个较浅的量子电路, 但需要在整个空间中搜索最优解, 算法最终输出的概率分布中往往包含非可行解.

另一种方法是量子交替算符方案 (quantum alternating operator ansatz). Hadfield 等人<sup>[19-21]</sup> 首次提出了这一方案, 设计了 XY 混合算子, 部分混合算子等, 将约束编码进混合哈密顿量  $H_B$ , 替代  $H_C$  中的“惩罚”项  $H_P$ , 使算法的演化始终在可行空间中进行. 基于此, 也有一些改进方案被提出. Marsh 等人<sup>[22]</sup> 将量子态的演化解为在混合哈密顿量  $H_B$  上的量子行走, 通过将优化问题的约束编码进  $H_B$ , 使量子行走限定在可行解范围内. Saleem 等人<sup>[23]</sup> 提出了动态量子变分 (Dynamic Quantum Variational Ansatz, DQVA) 方法, 通过在部分混合算子中添加更多可调参数来缩短每次迭代的电路深度. 该类方法保证了输出的可行解质量, 但一步迭代的量子电路较深 (相对于 QUBO 方案).

这两种处理约束的方案各有优缺点, 但它们处理线性等式约束问题时, 编码解的量子态方案却有一共

同的问题, 即表征最优解的量子态有高度的对称性 (纠缠), 这限制了 QAOA 的性能<sup>[16]</sup>. Bravyi 等人<sup>[16]</sup> 发现对于 Max-Cut 的某些实例, 经典的 Goemans-Williamson 算法性能在同样问题规模上优于 QAOA 算法, 主要原因是低深度的量子电路不能制备高度纠缠的量子态. 比如  $\mathbb{Z}_2$  对称态  $(|x\rangle + |\bar{x}\rangle)/\sqrt{2}$ , 其中  $|\bar{x}\rangle$  为  $|x\rangle$  的对称态, 虽然  $|x\rangle$  没有任何纠缠, 但其  $\mathbb{Z}_2$  对称态是一个高度纠缠态.  $\mathbb{Z}_2$  对称态与  $n$  量子位的 Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ) 态  $(|0\rangle^{\otimes n} + |1\rangle^{\otimes n})/\sqrt{2}$  很相似, GHZ 态不能用低深度电路制备<sup>[24]</sup>, 因此  $\mathbb{Z}_2$  对称态也不能用低深度电路制备. 在拓扑量子序理论中, 对称性可能会阻止人们通过低深度电路制备某些哈密顿量的基态, 这被称为对称性保护<sup>[25-27]</sup>.

本文受 Dicke 态制备算法<sup>[28]</sup> 的启发, 提出一种新的表征解的量子态构造方法, 消除了对称性 (纠缠) 所带来的问题; 同时, 提出了一种新的编码了约束的混合哈密顿量  $H_B$  的构造方法——星图 (Star Graph, SG) 算子, 及其对应的基于 QAOA 框架的算法——SG 算法, 并将其应用于求解图分割问题<sup>[29,30]</sup>. 图分割问题是一个 NP 难 (Non-deterministic Polynomial Hard, NP-Hard) 问题<sup>[31,32]</sup>, 它可以描述为: 给定一个具有  $N$  ( $N$  为偶数) 个顶点的无向图  $G=(V, E)$ , 将顶点集合  $V$  划分为两个大小相等的子集, 使  $G$  中连接这两个子集的边的数目最小化<sup>[13]</sup>.

本文的贡献:

- (1) 提出了一种新的表征解的量子态构造方法, 消除了量子态的对称性.
- (2) 使用星图算子对优化问题的约束进行处理, 及其对应的基于 QAOA 框架的算法——SG 算法.
- (3) 给出了 SG 算法在图分割问题上的量子电路.

## 2 相关工作

### 2.1 Dicke 态制备

Dicke 态<sup>[33]</sup> 是一种纠缠态. Dicke 态  $|D_k^n\rangle$  的定义为所有汉明权重为  $k$  的  $n$  个量子比特状态  $|x\rangle$  (即所有长度为  $n$  的 ‘0-1’ 字符串, 正好有  $k$  个 ‘1’) 的相等叠加, 即

$$|D_k^n\rangle = \frac{1}{\sqrt{C_n^k}} \sum_{x \in \{0,1\}^n, \text{wt}(x)=k} |x\rangle \quad (2)$$

其中,  $C_n^k$  为组合数,  $\text{wt}(\ast)$  为汉明权重.

Dicke 态具有以下归纳和形式:

$$|D_k^n\rangle = \sqrt{\frac{k}{n}} |D_{k-1}^{n-1}\rangle \otimes |1\rangle + \sqrt{\frac{n-k}{n}} |D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle \quad (3)$$

详细的证明过程见文献<sup>[28]</sup>.

在 QAOA 框架内, 演化量子态的初态可以制备为 Dicke 态, 用于求解具有约束的组合优化问题. Bärttschi

等人<sup>[28]</sup>提出了一种制备 Dicke 态的电路,该电路使用了酉算子  $U_{n,k}$  将输入的经典状态  $|0\rangle^{\otimes n-k}|1\rangle^{\otimes k}$  映射到 Dicke 态(本文使用的量子态以左侧表示低位,右侧表示高位,比如  $|01\rangle$ ,左侧 0 为低位,右侧 1 为高位).酉算子  $U_{n,k}$  是由酉算子  $U_{n-1,k}$  和分裂循环移位(Split & Cyclic Shift)酉算子  $SCS_{n,k}$  构成,而酉算子  $U_{n-1,k}$  又可由  $U_{n-2,k}$  和  $SCS_{n-1,k}$  构成,以此类推,最终酉算子  $U_{n,k}$  可由一系列的分裂循环移位酉算子  $SCS$  构成,这里给定  $U_{1,1}=I$ ,如

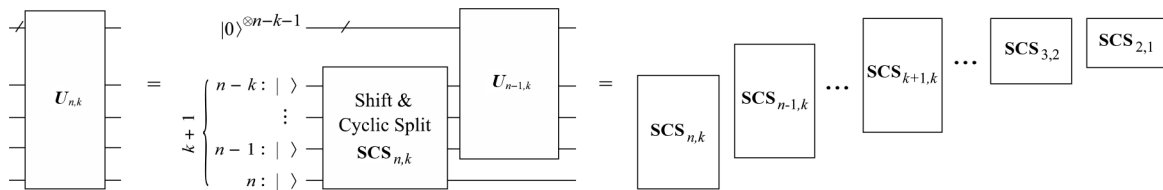


图1 酉算子  $U_{n,k}$  的构成

### 2.2 QAOA 框架内的约束处理策略

对于图分割问题,标准 QAOA 的约束处理策略是基于 QUBO 的方案,即添加惩罚项将问题哈密顿量  $H_C$  定义为式(5)所示形式.  $H_C$  是一个对角矩阵,其对角元素(特征值)表示连接两个子集的边数.惩罚项  $\alpha \left( \sum_{i=1}^n Z_i \right)^2$  保证任何不可行解对应的特征值不小于所有可行解对应的特征值,使在搜索最小值时,不可行解的期望大于可行解的期望.要确保惩罚项能起到作用,惩罚因子  $\alpha$  必须满足  $\alpha \geq \min(2\Delta, n)/8$ ,其中  $\Delta$  是图的最大度<sup>[13]</sup>,本文示例中  $\alpha=0.5$ .

$$H_C = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} (I - Z_i Z_j) + \alpha \left( \sum_{i=1}^n Z_i \right)^2 \quad (5)$$

其中,  $E$  是给定图的边集,  $n$  是顶点数,  $Z_i$  是泡利  $Z$  算符.标准 QAOA 的初态  $|s\rangle$ ,制备为  $|+\rangle^{\otimes n} = 1/\sqrt{2^n} \sum_x |x\rangle$ ,混合哈密顿量  $H_B = \sum_{i=1}^n X_i$ ,  $X_i$  为泡利  $X$  算符.

与标准 QAOA 不同,以下几种算法使用量子交替算符方案来处理约束.

#### (1) 环形算法

环形算法的哈密顿量  $H_B$  被定义为

$$H_B = \sum_{i=0}^n X_i X_{i+1} + Y_i Y_{i+1} \quad (6)$$

其中,  $i+1$  取模  $n$ ,  $Y_i$  为泡利  $Y$  算符.环形算法的初态  $|s\rangle = |\Omega|^{-1/2} \sum_{x \in \Omega} |x\rangle$ ,其中  $\Omega$  为可行解集<sup>[12]</sup>,  $x$  为可行解,问题哈密顿量  $H_C = 1/2 \sum_{(j,k) \in E} (I - Z_j Z_k)$  (不再需要惩罚项).在全连接的体系架构中,环形混合算子可以通过

图1所示.酉算子  $SCS_{n,k}$  是由一个两比特门和  $k-1$  个三量子比特门构成,其作用为

$$SCS_{n,k} |0\rangle^{\otimes k+1-l} |1\rangle^{\otimes l} = \sqrt{\frac{l}{n}} |0\rangle^{\otimes k+1-l} |1\rangle^{\otimes l} + \sqrt{\frac{n-l}{n}} |0\rangle^{\otimes k-l} |1\rangle^{\otimes l} |0\rangle \quad (4)$$

对于任意  $k$ ,即使在线性最近邻(Linear Nearest Neighbor, LNN)结构上,该算法也可以在  $O(n)$  深度上用  $O(kn)$  量子门制备 Dicke 态,而无需使用辅助量子位.

$O(\log n)$  深度的量子门电路实现;LNN 架构中,则可以通过  $O(n)$  深度的量子门电路实现<sup>[34,35]</sup>.

#### (2) 完全图算法

完全图算法的哈密顿量  $H_B$  被定义为

$$H_B = \sum_{(i,j) \in E(G_n)} X_i X_j + Y_i Y_j \quad (7)$$

其中,  $E(G_n)$  是  $n$  个顶点的完全图  $G_n$  的边集.完全图算法的初态  $|s\rangle$  和问题哈密顿量  $H_C$  与环形算法的形式一致.完全图混合算子可以在  $O(n^2)$  深度的量子门电路上实现<sup>[34]</sup>.

#### (3) 统一量子交替算符(Unified Quantum Alternating Operator Ansatz, UQAOA) 算法

UQAOA 算法的混合哈密顿量  $H_B$  被定义为

$$H_B = \sum_{x,x' \in \Omega, d(x,x')=2} |x\rangle \langle x'| + |x'\rangle \langle x| \quad (8)$$

其中,  $d(x, x')$  是  $x$  和  $x'$  的汉明距离. UQAOA 算法的初态  $|s\rangle$  和问题哈密顿量  $H_C$  与环形算法的形式一致. UQAOA 算法的酉算子  $U_{H_B}$  实现的电路深度与完全图混合算子相同,为  $O(n^2)$ <sup>[12]</sup>.

## 3 算法描述

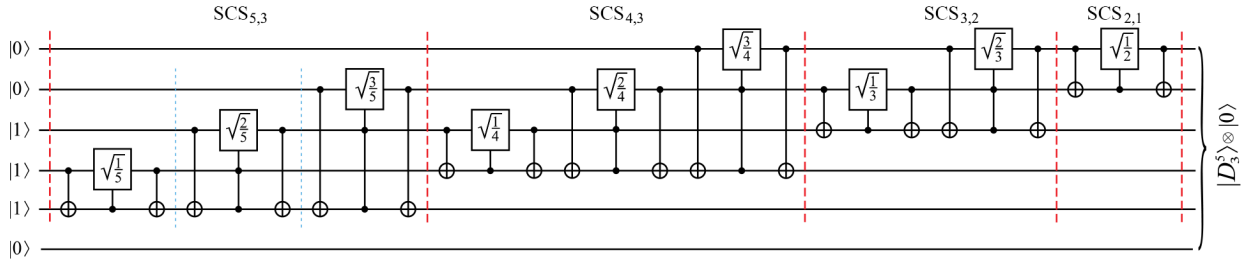
### 3.1 初态制备

比较 QAOA 处理约束的两类方法,虽然基于 QUBO 的方案中量子电路的深度较浅,但是量子交替算符方案在相同的迭代深度下,取得的解的质量比基于 QUBO 的方案高得多.这暗示了当可行解空间远远小于解集的全空间( $0 \sim 2^n - 1$ )时,将 QAOA 的演化过程限制在可行解空间的好处很可能会超过量子交替算符方案中混合哈密顿量对应电路的线性实现代价.所以,SG 算法采用了量子交替算符方案类似的实现思路.

然而,使用量子交替算符方案在解决某些问题时仍会存在表征最优解的量子态对称性问题. 这种对称性在图分割问题上具体表现如下: $x_{\text{str}} = \text{"111000"}$ 和 $\bar{x}_{\text{str}} = \text{"000111"}$ ( $\bar{x}_{\text{str}}$ 由 $x_{\text{str}}$ 的按位取反得到)虽然是两个不同的最优解,但它们属于同一种分割方案,即目标函数 $C_{\min} = C(\bar{x}_{\text{str}}) = C(x_{\text{str}})$ . 于是, $x_{\text{str}}$ 对应的量子态 $|x\rangle = |111000\rangle$ 与 $\bar{x}_{\text{str}}$ 对应的量子态 $|\bar{x}\rangle = |000111\rangle$ 的均匀叠加态 $(|x\rangle + |\bar{x}\rangle)/\sqrt{2}$ 就呈现了这种对称性问题.

所以,在初态(可行解的集合)的制备中应该去除掉上述这种情况. 于是,我们提出了一种初态的构造方法,具体如下:设 $\Omega$ 是问题的可行解集, $x, \bar{x} \in \Omega$ ,其中 $\bar{x}$ 是 $x$ 的位反,通过去除 $\bar{x}$ ,保留 $x$ ,构成新的可行解集 $\Omega_N$ . 这样,就能在低深度量子电路构造初态. 比如Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ)类的 $G_3$ 态 $(|D_1^3\rangle - |D_2^3\rangle)/\sqrt{2}$ ,因为其量子态的高度纠缠,所以无法使用低深度量子电路制备,而 $G_3$ 态中的 $|D_1^3\rangle$ 或 $|D_2^3\rangle$ 却可以. 因此,SG算法的初态可以构造为

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\Omega_N|}} \sum_{x \in \Omega_N} |x\rangle \quad (9)$$



注: $\sqrt{lm}$ -门是Y旋转 $R_Y(2 \arccos \sqrt{lm})$ 的缩写,将 $|0\rangle$ 映射到 $\sqrt{lm}|0\rangle + \sqrt{(n-l)/n}|1\rangle$

图2 初态 $|s\rangle = |D_3^5\rangle \otimes |0\rangle$ 的量子电路

### 3.2 星图及其量子电路

星图(SG)是图论中最规则的结构之一,它代表了不规则图和复杂图的局部树结构. 大小为 $N$ 的星图由一个中心点和 $N-1$ 个叶节点组成. 所有叶节点都连接到中心节点,叶节点之间没有连接. 对于NP难的组合优化问题,一般很容易找到一个可行解 $x^*$ ,如果该问题的可行解集合 $\Omega_N$ 可以很容易得到,那么选择 $x^*$ 作为中心节点,SG算法的哈密顿量 $H_B$ 可以构造为

$$H_B = \sum_{x, x^* \in \Omega_N, x \neq x^*} |x\rangle\langle x^*| + |x^*\rangle\langle x| \quad (12)$$

从式(12)可知, $H_B$ 是一个秩为2的低阶哈密顿量,其非零本征值 $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{N-1}$ ,对应的本征态为

$$|v_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x^*\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{x \in \Omega_N, x \neq x^*} |x\rangle \right) \quad (13)$$

其中, $N$ 是可行解集 $\Omega_N$ 中可行解的个数. 本征值和本征态的求解过程详见附录B.

对于图分割问题,由于其所有可行解对应的量子态的权重都相等,我们可以使用Dicke态来构造初态,即

$$|s\rangle = |D_k^n\rangle \quad (10)$$

这里 $k = n/2$ . 尽管可以使用Dicke态构造初态,但使用新的初态构造方法还能进一步的简化量子电路. 在图分割问题上,式(3)中的 $|D_{k-1}^{n-1}\rangle \otimes |1\rangle$ 和 $|D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle$ 的量子态个数相同,并且 $|D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle$ 中的任意一个量子态都可以在 $|D_{k-1}^{n-1}\rangle \otimes |1\rangle$ 中找到其对称态可以得到证明,具体证明过程见附录A. 因此,这里选择 $|D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle$ 作为SG算法的初态,即

$$|s\rangle = |D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle \quad (11)$$

具体的初态制备的量子电路可以参考第2.1节中介绍的Dicke态制备的量子电路,只需在前 $n-1$ 个量子位中应用制备 $|D_k^{n-1}\rangle$ 的量子电路以及第 $n$ 个量子位保持 $|0\rangle$ 不变即可. 图2给出了6量子位的初态制备量子电路. 和式(11)相比,式(10)量子线路减少了一个分裂循环移位酉算子 $\text{SCS}_{n,k}$ ,使其使用的量子门数降低了 $k$ 个,提高了初态制备的精度和速度.

对于图分割问题,星图算子 $U_{H_B}(\beta_t) = e^{-i\beta_t H_B}$ 的实现

过程如下:

$$\begin{aligned} e^{-i\beta_t H_B} &= e^{-i\beta_t W A W^\dagger} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\beta_t)^m (W A W^\dagger)^m}{m!} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\beta_t)^m}{m!} W A^m W^\dagger \\ &= W \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-i\beta_t)^m}{m!} A^m W^\dagger \\ &= W e^{-i\beta_t A} W^\dagger \\ &= W \left( I - (1 - e^{-i\beta_t \lambda_+}) (|0 \dots 00\rangle\langle 0 \dots 00|) \right. \\ &\quad \left. - (1 - e^{-i\beta_t \lambda_-}) (|0 \dots 10\rangle\langle 0 \dots 10|) \right) W^\dagger \end{aligned} \quad (14)$$

其中,酉算子 $W$ 实现了 $|0 \dots 00\rangle \mapsto |v_+\rangle, |0 \dots 10\rangle \mapsto |v_-\rangle, A$ 是一个对角阵,非零对角元素为 $\lambda_+$ 和 $\lambda_-$ .

为了实现  $W$  的量子电路,根据式(13),我们设计一个酉算子  $U_n, U_n$  的功能如下:

$$|0 \cdots 00\rangle \mapsto |x^*\rangle \quad (15)$$

$$|0 \cdots 10\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{x \in \Omega_N, x \neq x^*} |x\rangle \quad (16)$$

由此将如何实现  $W$  转化为了如何实现  $U_n$  的问题,从式(16)中可以观察到,  $1/\sqrt{N-1} \sum_{x \in \Omega_N, x \neq x^*} |x\rangle$  是可行解集  $\Omega_N$  中除了中心点  $x^*$  外的所有可行解的均匀叠加,而初态是可行解集  $\Omega_N$  中所有可行解的均匀叠加,即  $1/\sqrt{N} \sum_{x \in \Omega_N} |x\rangle$ ,这两者基本相同. 所以,  $U_n$  可以根据初态制备的量子电路实现.

图分割问题的初态制备的量子电路将  $|0\rangle^{\otimes n-1-k} |1\rangle^{\otimes k} |0\rangle \mapsto 1/\sqrt{N} \sum_{x \in \Omega_N} |x\rangle$ . 要实现  $U_n$ , 我们采取以下步骤来完成:

(1) 使用  $k-1$  个多控  $X$  门, 将  $|0 \cdots 010\rangle \mapsto |0\rangle^{\otimes n-1-k} |1\rangle^{\otimes k} |0\rangle$ .

(2) 对初态的量子电路进行修改, 通过修改  $RY$  旋转门的参数以及去除被选为中心点的可行解  $x^*$ , 输出可行解集  $\Omega_N$  中除中心点  $x^*$  外的所有可行解的均匀叠加, 最终完成  $|0\rangle^{\otimes n-1-k} |1\rangle^{\otimes k} |0\rangle \mapsto 1/\sqrt{N-1} \sum_{x \in \Omega_N, x \neq x^*} |x\rangle$ . 整个过程使用酉算子  $U_{S_6}$  进行表示.

(3) 使用  $k$  个多控  $X$  门, 将  $|0 \cdots 00\rangle \mapsto |x^*\rangle$ .

酉算子  $U_n$  的实现过程如图 3 所示. 酉算子  $W$  可由  $H$  门和  $U_n$  构成, 首先在第  $n-1$  位量子位上应用一个  $H$  门, 产生  $(|0 \cdots 00\rangle \pm |0 \cdots 10\rangle)/\sqrt{2}$ , 然后使用酉算子  $U_n$ , 就完成了  $W$  的量子电路, 整个过程如图 4 所示.

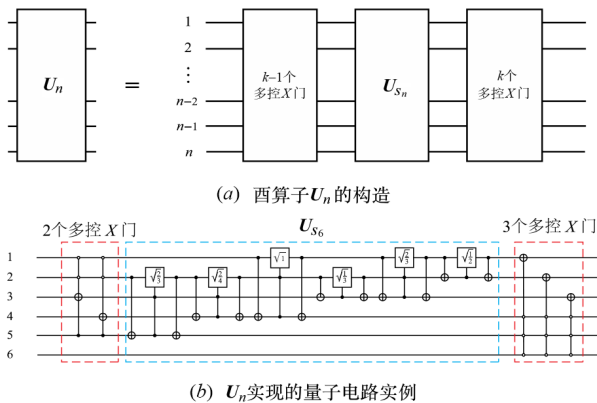


图 3  $U_n$  的构造及其  $U_n$  的构造实例

星图算子  $e^{-i\theta H_g}$  可以看作在星图上的量子行走. 那就在星图上进行量子行走的电路设计如下: 首先, 使用  $W^\dagger$  将输入的计算基转换为星图本征态; 其次, 在第  $n-1$

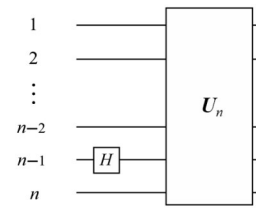


图 4 酉算子  $W$  的构造

位量子比特中作用上由除最高位的其他量子位为  $|0\rangle$  所控制的  $RZ$  旋转门  $RZ(-2\beta_i \lambda_+) = RZ(-2\beta_i \sqrt{N-1})$ ; 最后, 再使用  $W$  将其转换回计算基. 以上步骤实现了在星图上的量子行走. 由于  $H$  门和  $RZ$  门可以由  $RX$  门替代, 所以整个量子电路如图 5 所示.

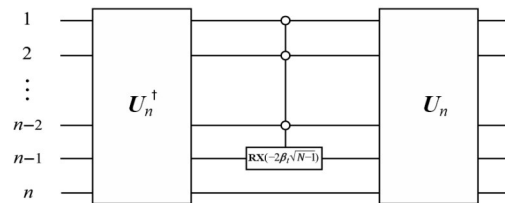


图 5 星图算子  $e^{-i\theta H_g}$  的量子电路

星图算子的量子电路深度跟初态制备的量子电路深度相关. 对于图分割问题, 我们使用 Dicke 态制备的量子电路, 其量子电路深度为  $O(n)$ , 那么图分割的星图混合器的量子电路的深度也为  $O(n)$ .

### 3.3 星图算法在 IBM Q 上的量子电路

量子算法在具体量子计算硬件上的实现需要至少考虑 3 个步骤:

(1) 量子门(酉矩阵)分解为单量子门和双量子门

一般说来, 开发商提供的编译器, 如 IBM 的 Qiskit 可以直接将酉矩阵编译成量子电路执行, 但很多时候编译器对底层硬件的抽象能力有限, 生成的量子电路执行结果不好<sup>[36]</sup>. 想要在量子计算硬件上获得较好的执行结果, 需要将量子门分解为底层的单量子门和双量子门. IBM 的多数量子计算硬件仅支持 5 种原生门 (CNOT, I, RZ, SX, X), 如何将量子电路表示成这 5 种原生门是需要面对的第一个问题.

(2) 特定量子架构的优化

针对特定量子架构的优化被称为量子位分配<sup>[37]</sup>, 通常指将逻辑量子位映射到特定硬件上的物理量子位及将逻辑量子门映射为物理量子门. 在 IBM 量子计算硬件上需要考虑连接拓扑结构、门的成功概率、量子位串扰限制等因素.

(3) 抑制噪声引起的错误

抑制噪声引起的错误是目前量子计算硬件所面临的主要问题. 目前解决该问题的可行方法是 QEM

(Quantum Error Mitigation), 即通过经典的处理技术来抑制误差<sup>[38]</sup>. QEM 技术大致可分为两类: 一类是零噪声外推<sup>[39,40]</sup>. 在已知物理噪声模型的各种有效噪声下, 通过回归步骤(外推)获得无噪声模型期望值的模型参数; 另一类是基于门集断层扫描的概率误差消除<sup>[41,42]</sup>. 这类方法结合了线性独立的基集运算和门集断层扫描, 通过系统地测量误差的影响来完全消除局部马尔可夫误差的影响, 而且不需要事先知道精确的物理噪声模型.

从以上步骤中可以看出, 量子算法在具体量子计算硬件上的实现, 不仅要考虑上层逻辑电路的生成和优化, 还需要关注底层物理量子位的布局. 彻底全面地解决这一问题是一个异常复杂的过程.

为了更好地阐述算法在 IBM Q 上的电路生成与优化, 我们通过一个非常简单的图分割问题实例(图 6)进行说明.



图 6 简单的图分割问题实例, 红线表示最佳分割

根据第 3.1 节初态制备及第 3.2 节 SG 算子  $e^{-i\theta H_B}$  对应的量子电路生成方法, 该图分割问题所对应的 SG 算法在 IBM Q 上的量子电路如图 7 所示.

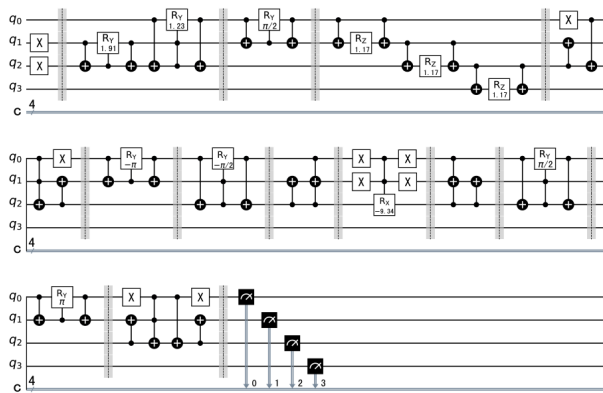


图 7 图分割问题实例所对应的 SG 算法在 IBM Q 上的量子电路

上面的电路在 IBM Q 的模拟器和实际的量子计算硬件上执行后, 模拟器上的运行结果和理论分析结果一致, 但是算法在具体量子计算硬件上表现不尽如人意, 还需进一步对图 7 中的量子电路进行优化. 附录 C 中给出了进一步优化过程的某些步骤.

## 4 实验及讨论

为了证明本文所提算法的优越性, 本节设置了几组对比实验, 从不同的角度论证本文算法的优势. 为了评估算法性能, 本文使用了文献[1]和文献[34]中提到的近似比的概念, 其定义为

$$r = \frac{\min_x C(x)}{\langle \beta, \gamma | H_C | \beta, \gamma \rangle} \quad (17)$$

其中,  $\min_x C(x)$  表示优化函数  $C(x)$  的最小值.

### 4.1 四种算法在对称性消除前后的性能比较

为了验证对称性对 QAOA 算法性能的影响, 我们使用本文提出的新量子态构造方法(对称性消除后对应的量子态构造方法)与原量子态构造方法(对称性消除前对应的量子态构造方法)分别在环形算法、完全图算法、UQAOA 算法和 SG 算法进行实验对比.

实验结果表明(表 1), 四种算法在对称性消除后的近似比高于对称性消除前的近似比, 在  $p=1, p=3, p=5$  和  $p=7$  时, 分别提升了 7.83%, 3.3%, 4.23%, 5.65%. 这不仅验证了 Bravyi 等人提出的表征解的量子态的对称性编码会限制 QAOA 算法性能<sup>[16]</sup>, 同时也说明了当消除对称性(纠缠)后, QAOA 算法性能会有进一步的提升.

表 1 四种算法在对称性消除前和消除后的近似比对比

算法	$p=1$	$p=3$	$p=5$	$p=7$
环形算法 + 前	0.722	0.810	0.845	0.884
环形算法 + 后	<b>0.763</b>	<b>0.872</b>	<b>0.950</b>	<b>0.989</b>
完全图算法 + 前	0.726	0.828	0.872	0.914
完全图算法 + 后	<b>0.726</b>	<b>0.850</b>	<b>0.933</b>	<b>0.961</b>
UQAOA + 前	<b>0.749</b>	0.822	0.853	0.912
UQAOA + 后	0.733	<b>0.850</b>	<b>0.907</b>	<b>0.974</b>
SG 算法 + 前	0.685	0.803	0.852	0.897
SG 算法 + 后	<b>0.689</b>	<b>0.857</b>	<b>0.924</b>	<b>0.993</b>

注:“前”表示对称性消除前;“后”表示对称性消除后.

### 4.2 SG 算法与其他算法的比较

为了评估 SG 算法的性能, 我们将其与第 2.2 节提到的四种算法进行比较.

图 8 给出了 SG 算法、标准 QAOA 算法、环形算法、完全图算法和 UQAOA 算法在 6 个顶点的随机图上的算法性能对比. 可以看出, SG 算法取得的近似比明显优于标准 QAOA 算法, 平均约有 25.2% 的性能提升. 与环形算法、完全图算法和 UQAOA 算法相比, 虽然 SG 算法的性能在  $p \leq 2$  时的近似比略低, 但随着  $p$  值的增大, 其

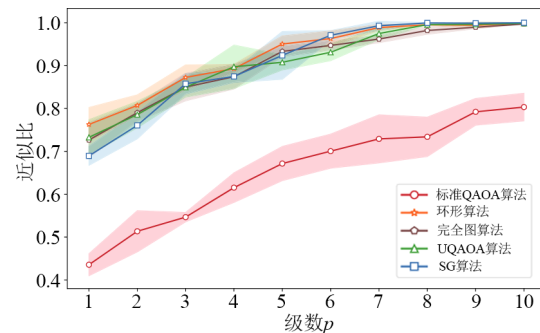


图 8 SG 算法与其他四种算法近似比对比图

取得的近似比达到甚至超过它们。

SG算法的量子电路实现代价为 $O(n)$ ,与环形算法相同,低于完全图算法和UQAOA算法的 $O(n^2)$ ,同时SG算法中星图算子复用了初态制备的量子电路,大大简化了算法的电路设计。

更重要的一点是,SG算法处理约束的通用性更强.对于复杂度属于NP-hard的优化问题,一般来说,比较容易找到一个可行解,将这个可行解作为星图算子的中心,只要能够构造出所有可行解的叠加态(对于NP问题,可在多项式时间构造),那么就可以利用SG算法求解,而不像其他算法要考虑约束的具体形式,选择(构造)合适的 $H_b$ 算子。

### 4.3 SG算法中心点的选取对算法性能影响的比较

因为SG算法的中心点是任意选取的可行解,所以其选择会对算法的性能有影响.图9给出了SG算法选取不同中心点取得的近似比。

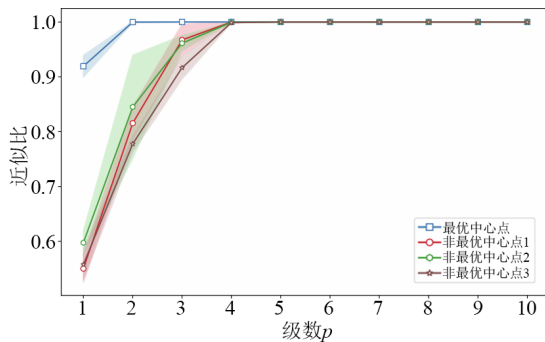


图9 SG算法在不同中心点下的近似比对比图

从图9可以看出,当算法选取的中心点恰好为最优解时,算法性能最优,级数 $p$ 很小时,就取到很高的近似比.但在实际应用中,选取SG算法的中心点恰好为算法的最优解的概率很小.但从图中可以看出,只要增加迭代次数(级数 $p$ ),SG算法依然可以取得非常高的近似比。

## 5 结论

在QAOA框架中,表征解的量子态所使用的二进制编码方案会产生对称性问题,该问题限制了QAOA算法的性能.为了解决该问题,本文提出了新的初态制备方法消除了现有编码方案中量子态的对称性,使算法性能有了进一步提升.同时,本文还给出了星图(SG)算子及其对应的SG算法,并针对图分割问题,设计了SG算法具体的量子电路.在IBM Q上的实验结果显示,SG算法与标准QAOA算法相比,平均约有25.3%的性能提升;与环形算法、完全图算法和UQAOA算法相比,线路简单代价较低.我们认为,星图算法有更广的适用性,未来我们将在更多的约束优化问题上尝试使用SG算法,并进一步将其应用到诸如量子机器学习

等更加实际的问题中。

## 参考文献

- [1] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S. A quantum approximate optimization algorithm[EB/OL]. (2014)[2022]. <https://arxiv.org/abs/1411.4028>.
- [2] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S. A quantum approximate optimization algorithm applied to a bounded occurrence constraint problem[EB/OL]. (2014)[2022]. <https://arxiv.org/abs/1412.6062>.
- [3] FARHI E, HARROW A. Quantum supremacy through the quantum approximate optimization algorithm[EB/OL]. (2016)[2022]. <https://arxiv.org/abs/1602.07674>.
- [4] YANG Z, RAHMANI A, SHABANI A, et al. Optimizing variational quantum algorithms using Pontryagin's minimum principle[J]. Physical Review X, 2017, 7(2): 021027.
- [5] JIANG Z, RIEFFEL E, WANG Z. Near optimal quantum circuit for Grover's unstructured search using a transverse field[J]. Physical Review A, 2017, 95(6): 062317.
- [6] WECKER D, HASTINGS M, TROYER M. Training a quantum optimizer[J]. Physical Review A, 2016, 94(2): 022309.
- [7] WANG Z, HADFIELD S, RIEFFEL E, et al. Quantum approximate optimization algorithm for Maxcut: A fermionic view[J]. Physical Review A, 2018, 97(2): 022304.
- [8] VENTURELLI D, DO M, RIEFFEL, et al. Compiling quantum circuits to realistic hardware architectures using temporal planners[J]. Quantum Science and Technology, 2018, 3(2): 025004.
- [9] PRESKILL J. Quantum computing in the NISQ era and beyond[J]. (2018)[2022]. <https://arxiv.org/abs/1801.00862>.
- [10] FARHI E, GOLDSTONE J, GUTMANN S, et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem[J]. Science, 2001, 292(5516): 472-475.
- [11] HALL B. Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction[M]. 1st ed. New York: Springer, 2003: 35-37.
- [12] RUAN Y, YUAN Z, XUE X, et al. Quantum approximate optimization for combinatorial problems with constraints[J]. Information Sciences, 2023, 619: 98-125.
- [13] LUCAS A. Ising formulations of many NP problems[J]. Frontiers in Physics, 2014, 2(5): 1-15.
- [14] FARHI E, GAMARNIK D, GUTMANN S. The quantum approximate optimization algorithm needs to see the whole graph: A typical case[EB/OL]. (2020)[2022]. <https://arxiv.org/abs/2003.02933>.

- //arxiv.org/abs/2004.09002.
- [15] FARHI E, GAMARNIK D, GUTMANN S. The quantum approximate optimization algorithm needs to see the whole graph: Worst case examples[EB/OL]. (2020) [2022]. <https://arxiv.org/abs/2005.08747>.
- [16] BRAVYI S, KLIESCH A, KOENIG R, et al. Obstacles to variational quantum optimization from symmetry protection[J]. *Physical Review Letters*, 2020, 125(26): 260505.
- [17] EGGER D, MARECEK J, WOERNER S. Warm-starting quantum optimization[EB/OL]. (2021)[2022]. <https://arxiv.org/abs/2009.10095>.
- [18] CHAI Y, HAN Y, WU Y, et al. Shortcuts to quantum approximate optimization algorithm[J]. (2021)[2022]. <https://arxiv.org/abs/2112.10943>.
- [19] HADFIELD S. Quantum algorithms for scientific computing and approximate optimization[EB/OL]. (2018)[2022]. <https://arxiv.org/abs/1805.03265>.
- [20] HADFIELD S, WANG Z, O’GORMAN B, et al. From the quantum approximate optimization algorithm to a quantum alternating operator ansatz[J]. *Algorithms*, 2019, 12(2): 34.
- [21] HADFIELD S, WANG Z, O’GORMAN B, et al. Quantum approximate optimization with hard and soft constraints[C]//The Second International Workshop on Post-Moore’s Era Supercomputing. New York: Association for Computing Machinery, 2017: 15-21.
- [22] MARSH S, WANG Z. A quantum walk-assisted approximate algorithm for bounded NP optimisation problems[J]. *Quantum Information Processing*, 2019, 18(3): 61.
- [23] SALEEM Z, TARIQ B, SUCHARA M. Approaches to constrained quantum approximate optimization[EB/OL]. (2020)[2022]. <https://arxiv.org/abs/2010.06660>.
- [24] BRAVYI S, HASTINGS M, VERSTRAETE F. Lieb-robinson bounds and the generation of correlations and topological quantum order[J]. *Physical Review Letters*, 2006, 97(5): 050401.
- [25] GU Z, WEN X. Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry protected topological order[J]. *Physical Review B*, 2009, 80(15): 155131.
- [26] SCHUCH N, PEREZ-GARCIA D, CIRAC I. Classifying quantum phases using matrix product states and projected entangled pair states[J]. *Physical Review B*, 2011, 84(16): 165139.
- [27] POLLMANN F, BERG E, TURNER A, et al. Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension[J]. *Physical Review B*, 2009, 81(6): 064439.
- [28] BARTSCHI A, EIDENBENZ S. Deterministic preparation of dicke states[EB/OL]. (2019) [2022]. <https://arxiv.org/abs/1904.07358>.
- [29] JOHNSON D, ARAGON C, MCGEOCH L, et al. Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation[J]. *Operations Research*, 1989, 37(6): 865-892.
- [30] BICHOT C, SIARRY P. General Introduction to Graph Partitioning[M]. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2013: 1-25.
- [31] KARP R, MILLER R, THATCHER J. Reducibility among combinatorial problems[J]. *Journal of Symbolic Logic*, 2010, 40(4): 618-619.
- [32] GAREY M, JOHNSON D, STOCKMEYER L. Some simplified NP-complete graph problems[J]. *Theoretical Computer Science*, 1976, 1(3): 237-267.
- [33] DICKE R. Coherence in spontaneous radiation processes[J]. *Physical Review*, 1954, 93(1): 99-110.
- [34] COOK J, EIDENBENZ S, BARTSCHI A. The quantum alternating operator ansatz on maximum k-vertex cover[C]//2020 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering(QCE). Denver: IEEE, 2020: 83-92.
- [35] WANG Z, RUBIN N, DOMINY J, et al. Xy-mixers: Analytical and numerical results for QAOA[J]. *Physical Review A*, 2019, 101(1): 012320.
- [36] LAROSE R. Overview and comparison of gate level quantum software platforms[J]. *Quantum*, 2019, 3: 130.
- [37] SIRAICHI M, SANTOS V, COLLANGE S, et al. Qubit allocation[C]//Proceedings of the 2018 International Symposium on Code Generation and Optimization. New York: IEEE, 2018: 113-125.
- [38] BHARTI K, CERVERA-LIERTA A, KYAW T, et al. Noisy intermediate-scale quantum algorithms[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2022, 94(1): 015004.
- [39] MURALI P, MCKAY D, MARTONOSI M, et al. Software mitigation of crosstalk on noisy intermediate-scale quantum computers[C]//Proceedings of the Twenty-Fifth International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems. New York: ACM, 2020: 1001-1016.
- [40] TEMME K, BRAVYI S, GAMBETTA J. Error mitigation for short-depth quantum circuits[J]. *Physical review letters*, 2017, 119(18): 180509.
- [41] ENDO S, BENJAMIN S, LI Y. Practical quantum error mitigation for near-future applications[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(3): 031027.
- [42] KWON H, BAE J. A hybrid quantum-classical approach to mitigating measurement errors in quantum algorithms[J]. *IEEE Transactions on Computers*, 2020, 70(9): 1401-1411.

附录 A

**命题 1** 当  $k = \frac{n}{2}$  时,  $C_{n-1}^{k-1} = C_{n-1}^k$ , 且式 (3) 中的  $|D_{k-1}^{n-1}\rangle \otimes |1\rangle$  和  $|D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle$  中的量子态是对称的.

**证明** 在图分割问题上,  $k = \frac{n}{2}$ , 于是  $C_{n-1}^{k-1} = C_{n-1}^{\frac{n}{2}-1}$ ,  $C_{n-1}^k = C_{n-1}^{\frac{n}{2}}$ . 由组合数的互补性质可知,  $C_{n-1}^{\frac{n}{2}-1} = C_{n-1}^{n-1-(\frac{n}{2}-1)} = C_{n-1}^{\frac{n}{2}}$ , 故  $C_{n-1}^{k-1} = C_{n-1}^k$ .

要证  $|D_{k-1}^{n-1}\rangle \otimes |1\rangle$  和  $|D_k^{n-1}\rangle \otimes |0\rangle$  中的量子态是对称的, 只需证当  $l \neq n-l$  时,  $|D_l^n\rangle$  和  $|D_{n-l}^n\rangle$  中的量子态是对称的.

数学归纳法:

当  $n=1$  时,  $|D_1^1\rangle = |1\rangle, |D_0^1\rangle = |0\rangle$ , 成立; 当  $n=2$  时,  $|D_0^2\rangle = |00\rangle, |D_1^2\rangle = |11\rangle$ , 成立; 假设当  $n=m$  时, 成立; 当  $n=m+1$  时,

$$|D_l^{m+1}\rangle = \sqrt{\frac{l}{m+1}} |D_{l-1}^m\rangle \otimes |1\rangle + \sqrt{\frac{m+1-l}{m+1}} |D_l^m\rangle \otimes |0\rangle \tag{A-1}$$

$$\begin{aligned} |D_{m+1-l}^{m+1}\rangle &= \sqrt{\frac{m+1-l}{m+1}} |D_{m-l}^m\rangle \otimes |1\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l}{m+1}} |D_{m+1-l}^m\rangle \otimes |0\rangle \end{aligned} \tag{A-2}$$

我们看到,  $|D_l^m\rangle \otimes |0\rangle$  和  $|D_{m-l}^m\rangle \otimes |1\rangle$  中的量子态满足对称,  $|D_{l-1}^m\rangle \otimes |1\rangle$  和  $|D_{m+1-l}^m\rangle \otimes |0\rangle$  同样满足. 于是, 我们可以得出, 当  $l \neq n-l$  时,  $|D_l^n\rangle$  和  $|D_{n-l}^n\rangle$  中的量子态是对称的. 故可得出,  $|D_{k-1}^n\rangle \otimes |1\rangle$  和  $|D_k^n\rangle \otimes |0\rangle$  中的量子态是对称的.

证毕

附录 B

由式 (12) 可知,  $H_B$  根据中心点的不同, 其矩阵形式也有所不同, 但是求本征值和本征态的方法是相似的. 我们使用以下形式的  $H_B$  (中心点为  $x_i$ ) 来证明式 (13).

$$H_B = \begin{bmatrix} & & x_0 & & x_i & & x_{N-2} & & x_{N-1} & & \\ & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ & \vdots & & & & & & & & & & \\ x_0 & 0 & & & 1 & & & & & & & \\ & \vdots & & & & & & & & & & \\ x_i & 0 & & 1 & 0 & & 1 & & 1 & & & \\ & \vdots & & & & & & & & & & \\ x_{N-2} & 0 & & & & & 1 & & & & & \\ & \vdots & & & & & & & & & & \\ x_{N-1} & 0 & & & & & & & 1 & & & \\ & \vdots & & & & & & & & & & \\ & 0 & & & & & & & & & & \end{bmatrix}$$

图 B1 星图所对应的  $H_B$  的一般形式

则  $H_B$  的特征方程为

$$|\lambda E - H_B| = \lambda^{2^n - N} \begin{vmatrix} \lambda & & -1 & & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ -1 & & \lambda & & -1 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_N = 0 \tag{B-1}$$

将右侧行列式的第  $i$  行和第 0 行交换, 第  $i$  列和第 0 列交换, 可得

$$\begin{vmatrix} \lambda & -1 & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ -1 & \lambda & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & \dots & -1 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_N = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -1 \\ -1 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_N \tag{B-2}$$

则  $|\lambda E - H_B|$  可变为

$$|\lambda E - H_B| = \lambda^{2^n - N} \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -1 \\ -1 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_N = 0 \tag{B-3}$$

其中,  $n$  为量子比特数,  $N$  为  $\Omega_N$  中可行解的个数,  $|\cdot|_N$  表示  $N$  阶行列式.

令  $\det(N, j) = \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -j \\ -1 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_N$ , 我们给出以下命题.

**命题 2**  $\det(N, j) = \lambda^{N-2}(\lambda^2 - j - N + 2) (N \geq 2)$ .

**证明** 数学归纳法: 当  $N=2$  时,  $\det(2, j) = \lambda^2 - j = \lambda^{2-2}(\lambda^2 - j - 2 + 2)$ , 成立; 当  $N=3$  时,  $\det(3, j) = \lambda(\lambda^2 - j - 1) = \lambda^{3-2}(\lambda^2 - j - 3 + 2)$ , 成立; 假设当  $N=k$  时, 成立, 则有  $\det(k, j) = \lambda^{k-2}(\lambda^2 - j - k + 2)$ ; 当  $N=k+1$  时,  $\det(k+$

$$\begin{aligned} 1, j) &= \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -j \\ -1 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_{k+1}, \text{ 对其进行如下变换:} \\ \det(k+1, j) &= \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -j \\ -1 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \dots & \lambda \end{vmatrix}_{k+1} \\ &= r_{k+1} - r_k \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -1 & -j \\ -1 & \lambda & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\lambda & \lambda \end{vmatrix}_{k+1} \\ &= c_{k+1} + c_k \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \dots & -1-j & -j \\ -1 & \lambda & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda \end{vmatrix}_{k+1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \cdots & -1-j \\ -1 & \lambda & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & \lambda \end{vmatrix}_k \\
&= \lambda \det(k, j+1) \\
&= \lambda \lambda^{k-2} (\lambda^2 - j - 1 - k + 2) \\
&= \lambda^{k+1-2} [\lambda^2 - j - (k+1) + 2]
\end{aligned} \tag{B-4}$$

证毕

因此,由命题2可知,

$$\begin{aligned}
|\lambda \mathbf{E} - \mathbf{H}_B| &= \lambda^{2^N - N} \begin{vmatrix} \lambda & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & \lambda & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & \lambda \end{vmatrix}_N \\
&= \lambda^{2^N - N} \det(N, 1) \\
&= \lambda^{2^N - N} \lambda^{N-2} (\lambda^2 - 1 - N + 2) \\
&= \lambda^{2^N - 2} (\lambda^2 - N + 1) = 0
\end{aligned} \tag{B-5}$$

所以,  $\mathbf{H}_B$  的非零本征值为  $\lambda = \pm \sqrt{N-1}$ .

根据本征值  $\lambda$ , 其本征态可以通过  $(\mathbf{H}_B - \lambda \mathbf{E})\mathbf{x} = 0$  进行求解. 这里以  $\lambda_+ = \sqrt{N-1}$  为例, 求解其对应的本征态  $|v_+\rangle$ . 将  $\lambda_+ = \sqrt{N-1}$  代入  $(\mathbf{H}_B - \lambda \mathbf{E})\mathbf{x} = 0$  得

$$\mathbf{H}_B - \lambda_+ \mathbf{E} = \begin{bmatrix} -\lambda_+ & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & -\lambda_+ & & 1 & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & 1 & & -\lambda_+ & & 1 & & 1 & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & 1 & & -\lambda_+ & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & 1 & & & & & & -\lambda_+ \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & & & & -\lambda_+ \end{bmatrix}$$

经过一系列矩阵行变换  
 $\rightarrow$

$$\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & 1 & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & 1 & & & & -\sqrt{N-1} & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & 1 & & -1 & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & 0 & & & & 0 & & \\ \vdots & & & & & & & & & & \\ 0 & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

于是,基础解为

$\mathbf{x} = (0, \dots, 1, \dots, \sqrt{N-1}, \dots, 1, \dots, 1, \dots, 0)^T$ , 将其进行单位化, 得

$$\mathbf{x} = \left( 0, \dots, \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}}, \dots, 0 \right)^T \tag{B-6}$$

其用标准正交基表示为

$$\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}} \mathbf{x}_0 + \cdots + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{x}_i + \cdots + \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}} \mathbf{x}_{N-1} \tag{B-7}$$

其中,  $\mathbf{x}_0 = (0, \dots, 1, \dots, 0, \dots, 0, \dots, 0, \dots, 0)^T, \dots, \mathbf{x}_{N-1} = (0, \dots, 0, \dots, 0, \dots, 0, \dots, 1, \dots, 0)^T$ , 即  $\mathbf{x}_0$  中的 1 在第  $x_0$  位,  $\mathbf{x}_{N-1}$  中的 1 在第  $x_{N-1}$  位.  $x$  的量子 Dirac 表示为

$$\begin{aligned}
|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}} |x_0\rangle + \cdots + \frac{1}{\sqrt{2}} |x_i\rangle + \cdots \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{2(N-1)}} |x_{N-1}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x_i\rangle + \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{\substack{x \in \Omega_N \\ x \neq x_i}} |x\rangle \right)
\end{aligned} \tag{B-8}$$

由于  $|x_i\rangle$  为中心点, 故  $|x\rangle$  为  $\lambda_+ = \sqrt{N-1}$  对应的本征态为

$$|v_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x^*\rangle + \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{\substack{x \in \Omega_N \\ x \neq x^*}} |x\rangle \right) \tag{B-9}$$

同理,  $\lambda_- = -\sqrt{N-1}$  对应的本征态为

$$|v_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x^*\rangle - \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{\substack{x \in \Omega_N \\ x \neq x^*}} |x\rangle \right) \tag{B-10}$$

综上, 非零本征值  $\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{N-1}$ , 对应的本征态为

$$|v_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |x^*\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{\substack{x \in \Omega_N \\ x \neq x^*}} |x\rangle \right) \tag{B-11}$$

即式(12)得证.

## 附录 C

在正文中, 我们讨论了量子算法在具体量子计算硬件上的实现所需的步骤. 根据我们的实验结果, 将复杂量子门分解为特定硬件支持的单量子门和双量子门有利于提升电路的运行结果. 下面的电路示例给出了我们使用的优化分解方法.

CCRY 门分解:

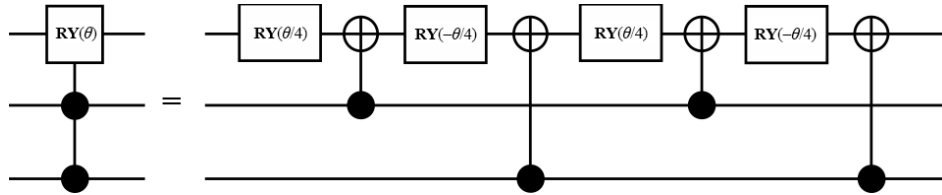


图 C1 CCRY 门转化为 RY 门和 CNOT 门

CRY 门分解:

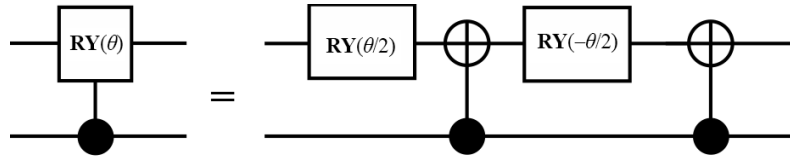


图 C2 CRY 门转化为 RY 门和 CNOT 门

RY 门分解:

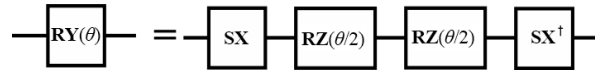


图 C3 RY 门分解为 SX 门、SX† 门和 RZ 门

CCRX 门分解:

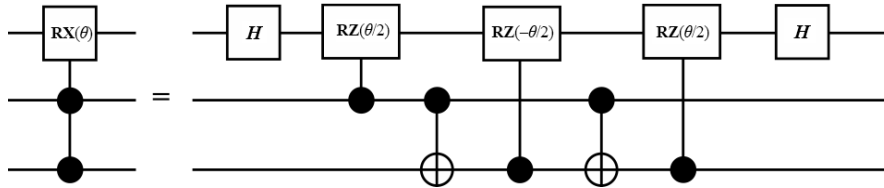


图 C4 CCRX 门分解为 H 门、CNOT 门和 CRZ 门

CRZ 门分解:

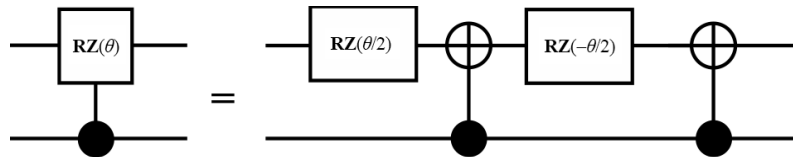


图 C5 CRZ 门分解为 CNOT 门和 RZ 门

Toffoli 门分解:

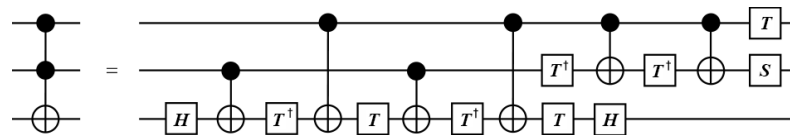
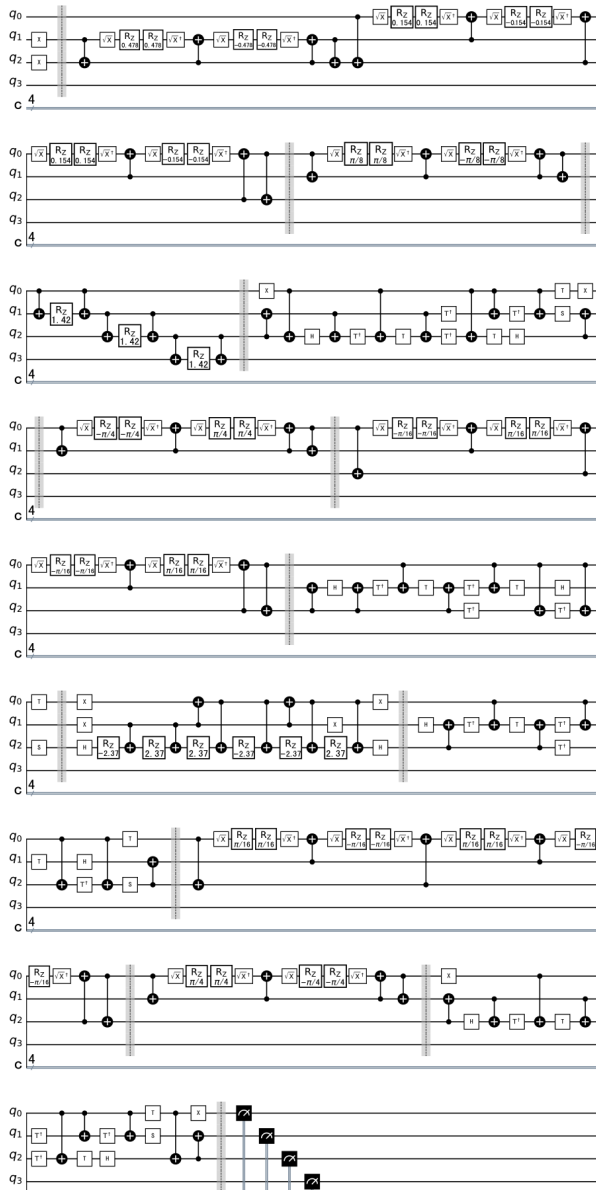


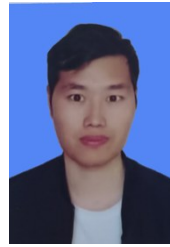
图 C6 Toffoli 门分解为 H 门、CNOT 门、T 门、T† 门和 S 门

将图7中的量子电路采用上面的方法分解为原生的量子门后,对应的量子电路如下图所示.



图C7 图7中的量子电路使用优化分解方法后得到的量子电路

作者简介



**袁志强** 男,1994年生,安徽阜阳人.现为安徽工业大学计算机科学与技术学院硕士研究生.主要研究方向为量子算法.  
E-mail: yuanzhiq1994@163.com



**陶陶** 男,1977年生,安徽无为.现为安徽工业大学计算机科学与技术学院副教授.主要研究方向为深度学习和量子算法.  
E-mail: taotao@ahut.edu.cn

**杨思春** 男,1970年生,安徽六安人.现为安徽工业大学计算机科学与技术学院教授.主要研究方向为三支概念分析、粒计算、粗糙集和自然语言处理.

**阮越** 男,1972年生,安徽马鞍山人.现为安徽工业大学计算机科学与技术学院讲师.主要研究方向为量子算法和量子图像处理.

**薛希玲** 女,1985年生,山东临沂人.现为安徽工业大学计算机科学与技术学院讲师.主要研究方向为量子计算和量子行走.