

## 组合优化中的量子计算

崔巍、汪皓 华南理工大学自动化科学与工程学院

### 一、前言

2023 年新春伊始,《流浪地球》凭借其超硬核的科幻火爆全球,而影片中几乎无所不能的智能量子机器人 550W (如图 1(a) 所示) 也受到了广泛讨论。与此同时,如图 1(b) 和 1(c) 所示,我国第一条量子芯片生产线“悟空芯”也在安徽合肥面世。量子计算一跃而成为千家万户热议的话题。那么什么是量子计算呢?

所谓量子计算,不过是一种遵循量子力学规律的新型的计算模式。而量子计算机,也不过是一类遵循并利用量子力学规律进行数学计算和信息存储的装置。量子计算可以求解经典计算不擅长的问题,比如大数分解、智能调度等。虽然,现实中量子计算仍停留在中等规模含噪量子 (Noisy Intermediate-Scale Quantum, NISQ) 时代 [1],

距离 550W 仍有很长的路要走。但是,量子计算早已不是一个停留在纸皮上的想法,量子及其各种衍生算法已经涉足金融、医疗、生物制药各个领域。那到底量子计算有多能干呢? 本文接下来将从组合优化问题的视角,介绍量子计算的广大神通。

### 二、组合优化——简单而又复杂

组合优化问题是一类离散变量的优化问题,其目的是从一组离散或不连续的可行解集中寻找最优解。通俗点说,就是从一大堆的组合中挑选出一个最优的组合出来。常见的组合优化问题有旅行商问题、图着色问题、最大割 (MAXCUT) 问题、0-1 背包问题等等。大多数组合优化问题属于 NP 问题,即目前没有多项式时间内的算法可以精确求解。接下来,我们以最大割问题为例,



图1 量子计算 (图片来源百度, 部分有删改)

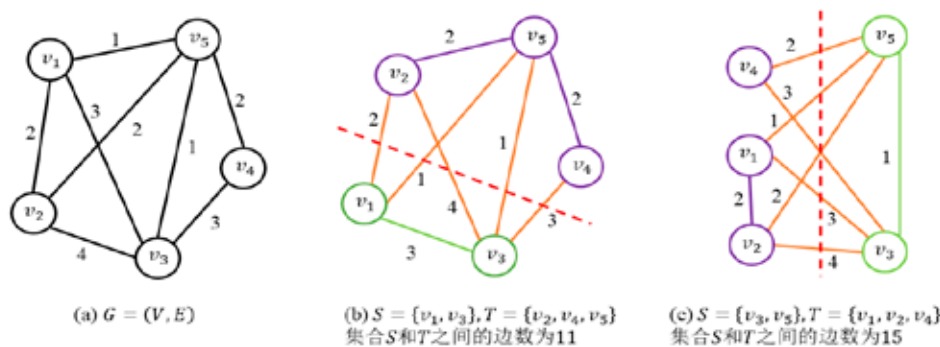


图2 最大割问题

让大家看看组合优化问题到底难在何处。

如图 2(a) 所示, 一个图  $G=(V, E)$  可由顶点集合  $V$  和边集合  $E$  表示, 最大割问题探究的是如何将图  $G$  的顶点集  $V$  划分成两个非空互补子集  $S$  和  $T$  (即满足  $S \cap T = \emptyset$  和  $S \cup T = V$ ), 使得子集  $S$  和  $T$  之间的边数最大。图 2(b) 是图  $G$  的任意一个割, 使得两集合  $S$  和  $T$  间的边数为 11, 而图 2(c) 是图  $G$  的最大割, 使得  $S$  和  $T$  间的边数最大。很显然, 对于有  $n$  个节点的图一共存在  $2^{n-1}-1$  种割法。由于牛顿法、梯度下降法这些针对连续优化问题设计

的方法在此处毫无用武之地, 若想从这么多可行解中寻找最优解, 一个很直观的想法是“试”, 也就是枚举法或者隐枚举法。但随着  $n$  增大, 可行解呈指数增长, 枚举法显然并不现实。即使是使用贪婪算法或者其他算法, 也难以在多项式时间内找到最优解。

不过, 如果我们放低要求, 寻求该问题的近似解, 难度会降低不少。近似解是组合优化问题接近于全局最优解的局部最优解。虽然不能得到最优解, 但组合优化问题的近似解已经可以为我



图3 组合优化问题的实际应用  
(图片来源于百度, 部分有删改)

们带来很多利益。无论是生物制药、交通运输、信息通讯、金融投资, 都离不开组合优化问题。以药物发现为例, 一款新药的研发从发现药物分子到进入临床应用平均需要 13 年的时间, 成本高达 20 亿美元, 而量子计算 (见图 3) 的引入则有望缩短时间并降低成本。

### 三、量子计算——天然的组合优化求解器

量子计算是一种遵循量子力学规律的新型计算模式。全球最大的信息技术和业务解决方案公司 IBM 称量子计算是 “a rapidly-emerging technology that harnesses the laws of quantum mechanics to solve problems too complex for classical computers”。换句话说, 量子计算在某种程度上是为了解决经典计算难以有效解决的问题——例如组合优化问题——而诞生的。

为什么这么说呢? 我们首先看看经典计算是如何近似求解组合优化问题的。以模拟退火算法为例, 如图 4(a) 所示, 它是受到固体退火的启发: 在温度较高时, 固体内粒子处于无序态, 系统内

能较大; 随着温度缓慢降低, 系统内能逐渐降低, 粒子趋近有序; 当温度趋近于常温时, 系统内能降为最低, 而粒子也处于基态。如图 4(b) 所示, 优化问题可以看做是在势能面上寻找势能最低点。在模拟退火中, 蒙特卡罗算法被用于搜索近似解: 温度较高时, 算法会在不同局部最小值之间跳跃以搜索全局最小值; 随着温度降低, 近似解逐渐趋近于最优解。简单来说, 模拟退火就像是在模拟固体退火这个过程, 企图通过不断的打乱原有排列来提升势能, 然后再任其自由运动来得到一个稳定的解, 而通过一定的引导, 则可以很大概率上得到一个近似最优解。但模拟退火算法存在两方面的问题: 一是求解过程中需要跨越能量势垒, 较高的势垒需要较大的动力去爬升, 但同时意味着更容易错过最小值; 二是为满足细致平衡条件, 大部分蒙特卡罗算法的搜索迭代需要在单变量上进行, 而这大大限制了算法的并行求解。跨越能量势垒和并行求解是组合优化求解的两个难点, 而量子计算则恰好在这两个方面被认为优于经典计算。

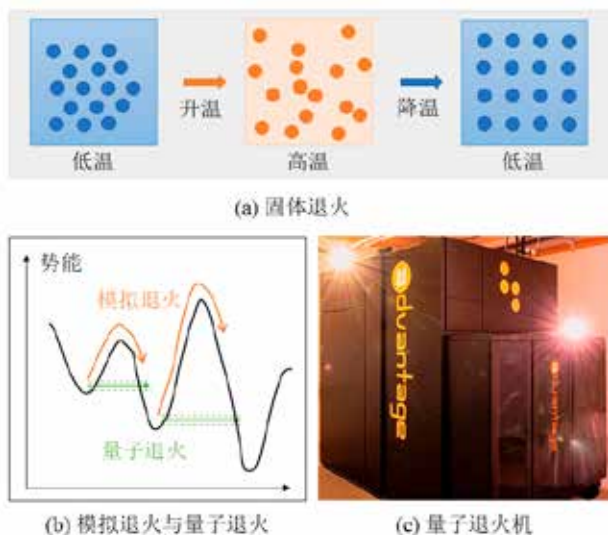


图4 经典退火与量子退火（部分图片来自百度，有删改）

一方面，量子计算天生便具有并行性。在经典计算中，算力随着逻辑比特数量的增长呈线性增长。但对于量子计算而言，由于叠加态的存在，其算力随量子比特数量增加呈指数增长。也就是说，每增加一个量子比特，量子计算机的算力就增加一倍——这是经典计算望尘莫及的。另一方面，如图 4(b) 所示，量子力学中的隧穿效应使得求解过程中，有一定几率“穿”过窄而高的势垒，从而快速找到最优解。也就是说，模拟退火需要一遍遍地打乱再任其一遍遍地趋于稳定，而量子计算只需要打乱一次，便可以同时得到相同甚至更优的结果，何乐不为呢？

于是，通过引入量子计算的叠加性和隧穿效应，量子退火（Quantum Annealing, QA）算法<sup>[2]</sup>和绝热量子计算<sup>[3]</sup>（Adiabatic Quantum Computation, AQC）被提出用于求解组合优化问题。

## 1. 量子退火机

量子退火算法是模拟退火算法的一种延伸，它使用物理中的伊辛模型来描述问题哈密顿量（即优化目标），而利用横向磁场作为量子涨落项来代替模拟退火中的热涨落，其总体的哈密顿量形式如下式：

$$H_{\text{ising}} = \frac{A(t)}{2} \left( \sum_i \hat{\sigma}_x^{(i)} \right) + \frac{B(t)}{2} \left( \sum_i h_i \hat{\sigma}_z^{(i)} + \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} \right)$$

其中，等式右边的第一项是横向磁场，第二部分是问题哈密顿量， $\hat{\sigma}_{x,z}^{(i)}$  是作用于第  $i$  个量子比特的泡利矩阵， $J_{ij}$  和  $h_i$  分别是耦合系数和偏置项， $A(t)$  和  $B(t)$  分别是只与时间有关的增函数和减函数。量子绝热定理表明：一个量子体系由初值哈密顿量  $\hat{H}_i$  缓慢演化到末值  $\hat{H}_f$ ，也就是从第二项演化到第一项，若体系开始处于  $\hat{H}_i$  的第  $n$  个本征态，则演化结束后，体系处于  $\hat{H}_f$  的第  $n$  个本征态。于是，当横向磁场较强时，即等式右边第一项处于主导地位时，整个量子系统的基态已知；随着横向磁场减弱， $A(t)$  逐渐减弱，而  $B(t)$  逐渐增强，从而第二项中的问题哈密顿量逐渐占主导地位；当横向磁场趋于 0 时，整个量子系统的基态趋于第二部分的基态。

实际上，上述等式的第一项对应着一个解已知的问题，而第二项对应着待求解的组合优化问题，问题的解则对应着能直接测量得到的基态。而量子退火的过程中，就是从第一项向第二项转移的一个动态平衡的过程。在这个转移的过程中，系统从第一项逐渐向第二项过渡，而其表示的问题也从一个已知解的问题向待求解的组合优化问题过渡，相应地，我们测量的结果也就从已知问题的解逐渐向待求解组合优化问题的解过渡。如图 4(c) 所示，基于量子退火算法，D-Wave 公司实现了商用量子退火机，在工业生产等各个领域已发挥了不小的作用<sup>[4]</sup>。

## 2. 通用量子计算

量子退火机是一种专用量子计算机，只能用于求解组合优化问题。至于求解其他问题和部署其他算法，则需要以量子逻辑门电路为基础的通用量子计算机。如图 5(a) 所示，量子逻辑门类似于经典可逆逻辑门。如果说，经典门直接操纵比特来进行计算，那么量子门操作的则是量子态。量子系统可以认为是希尔伯特空间中一类线性系统，其演化满足薛定谔方程。因此，一个如图 5(c) 所示的由量子门构成的量子电路，就是一个在酉矩阵操作下的线性系统，也是一个绝热量子系统。于是，量子电路也可以被用于求解组合优化问题。

量子近似优化算法<sup>[5]</sup> (Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)，是一种在通用量子计算框架下考虑最大割问题的算法。它首先将最大割问题编码成问题哈密顿量，然后不断利用酉矩阵对某个初态  $|s\rangle$  进行操作。根据量子绝热定理，当操作完成时，对整个系统进行测量即可得到最大割问题的解。这里所说的初态  $|s\rangle$ ，也正扮

演着量子退火算法中横向磁场基态的作用。唯一不同的是，最大割问题实际上是求伊辛能量的最大值，故而初态  $|s\rangle$  并非横向磁场的基态，而是对应能量最高的本征态。

更进一步，如图 5(b)(d) 所示，利用变分量子计算，量子线路可实现简单的神经网络，从而可以通过实现量子玻尔兹曼机等完成对组合优化问题的求解<sup>[6,7]</sup>。

然而，无论是量子退火还是通用量子计算，都面临着技术和实现上的难题。NISQ 时代下，通用量子计算仍然只是个设想，目前的量子比特很难长时间稳定存在；量子退火机的实现需要依赖于超导体，而目前超导的实现仍需极端的温度环境。虽然量子计算让大家看到了快速求解组合优化问题的希望，但这些技术和实现上的难题却也让量子求解算法的应用受到了很大限制。那么，能否在维持量子计算优势的同时，又可以避免这些实现上的难题呢？或者说，能否结合量子计算和经典计算的优势，在其中做一个“中庸”的选择呢？

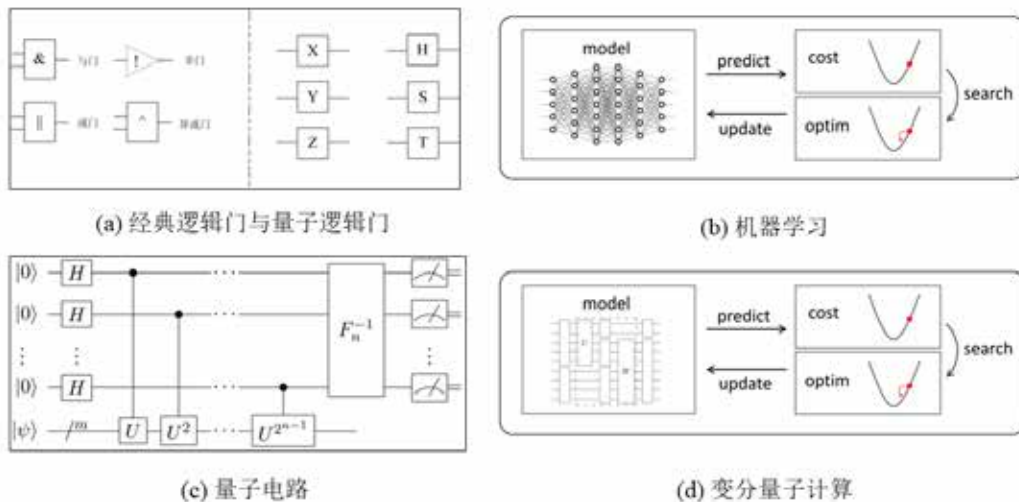


图5 经典计算与通用量子计算 (图片来自百度, 有删改)

## 四、量子启发式计算——“中庸”之道

### 1、伊辛机

借助叠加态和隧穿效应，量子退火机在组合优化问题的求解中取得了很大的成功，但超导体的实现以及拓扑结构限制了量子退火的应用。一种“中庸”的想法是以伊辛机代替超导的实现。

相干伊辛机<sup>[8]</sup> (Coherent Ising Machine, CIM) 的核心是简并光参量振荡器 (Degenerate Optical Parametric Oscillator, DOPO)。如图6所示，DOPO可以将一个频率为 $\omega$ 的输入激光通过二阶非线性光学相互作用转换成两个频率为 $\omega/2$ 的偏振方向相同的输出光。当输入光较弱时，两束输出光处于“真空压缩态”，其相位难以辨别；但当输入光强于某个阈值时，输出光发生量子相变并处于“相干态”，光的相位分为两个状态。简单来说，我们先把一束光分成两份相同的光，然后这两束光可以用来表示组合优化问题里的0和1两个状态。而不同振荡器的光耦合在一起便可以通过一定条件转化并表达出我们要求解的组合优化问题。于是，我们可以将组合优化问题中的伊辛问题部署到振荡器上，当整个系统稳定下来后，通过测量振荡器的光的相位，便得到了问题的解。不过，CIM的难点在于精确控制大量光延迟线以产生光的耦合，因此当其规模变大时，所需光纤的长度也在增加。

量子世界中的另一种分岔现象——量子分叉 (Quantum Bifurcation)，也被用

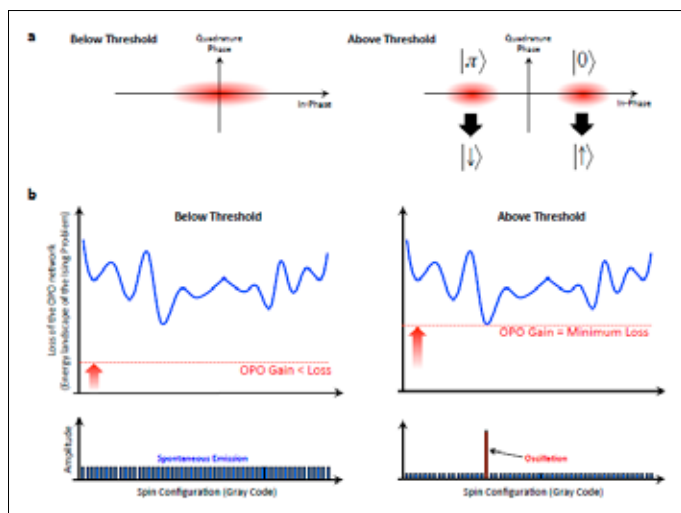


图6 相干伊辛机的工作原理<sup>[8]</sup>

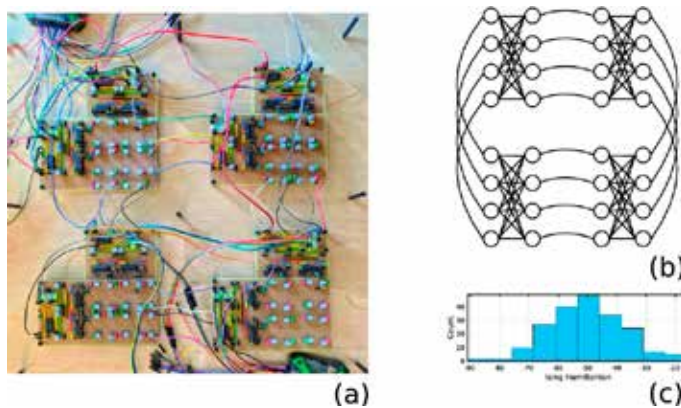


图7 LC振荡电路网络<sup>[11]</sup>

于求解伊辛问题。类似于相干伊辛机中的简并光参量振荡器，Kerr非线性参量振荡器可以发生量子分叉<sup>[9]</sup>。受该现象启发提出的模拟分叉机<sup>[10]</sup> (Simulated Bifurcation Machine, SBM)，可部署于任意传统硬件设备，且在性能上可与CIM媲美。虽然方法变了，但实际上还是利用分叉来表示组合优化问题中0和1两个不同的状态，也还是通过将组合优化问题转化为系统的耦合振荡来间接求解。

SBM的出现，使得求解组合优化问题的赛道从量子设备又转回到经典硬件。但SBM并非毫无缺陷。实际上，

CIM 所利用的是光的注入锁定 (Injection Locking)。而这一现象在很多非线性振荡器中都存在，即使是在最简单的 LC 振荡电路网络中 (如图 7 所示)。而实验表明，这些非线性系统均可被用于求解伊辛问题，只需要找到一个合适的转化条件：即将系统和组合优化问题通过一个李雅普诺夫函数相连即可。但大多数伊辛机，都需要对系统状态变量的幅值进行精确控制，而这正是伊辛机的难点之一<sup>[12]</sup>。

## 2. 量子启发式退火机

实际上，在经典赛道上还有另一类“中庸”算法。这类算法来源于模拟退火，但同时受到量子退火的启发，从而形成了真正意义上的量子启发式退火机。量子退火算法有两大优势：一是叠加态带来的并行性，二是量子随机涨落带来的全

局收敛性。量子启发式退火机正是从这两个角度，对模拟退火算法进行改进。

一方面，传统的模拟退火算法利用蒙特卡罗算法采样 (如 Gibbs 采样) 来搜索求解。为了满足细致平衡条件，采样每次只能对单变量或是相互独立的变量进行。伊辛模型复杂的耦合关系使得模拟退火难以并行化求解。为了实现并行采样，一个简单的想法是对伊辛模型进行解耦<sup>[13]</sup>。比如图 8 所示的一个 5 个变量的伊辛问题，我们首先将图 8(c) 中的伊辛模型视为一个如图 8 (a) 所示的图，然后通过节点复制来降低图中节点的连接度，得到图 8 (e)，实际上对应了图 8(g) 所示的模型。图 8(c) 中相邻节点不同时更新，而不相邻节点则可以并行更新，从而只需要较少周期就可以完成对所有维度的 Gibbs 采样，加速基态的搜索。从图 8(d) (h) 中可以看到，原问题的解和转化后的问

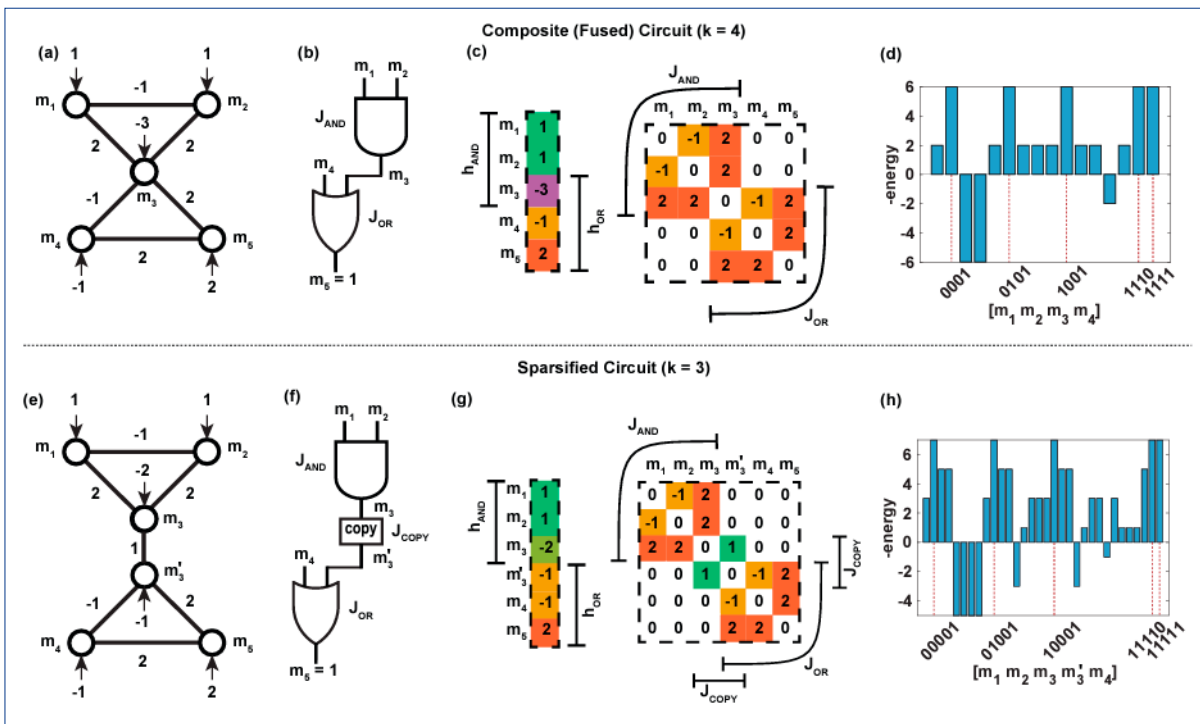


图8 经典逻辑电路模拟求解伊辛问题<sup>[14]</sup>

题的解,也就是两幅图中能量最低点(图中最高点)对应的点是相同的。

另一方面,传统的模拟退火中不存在隧穿效应,但可以通过对比特的随机翻转来模拟这一过程。例如,可以利用现场可编程门阵列(Field Programmable Gate Array, FPGA)中的随机数生成器实现概率比特<sup>[14]</sup>,以一定概率翻转比特,以达到隧穿的效果。或者利用动态偏移<sup>[15]</sup>,当系统陷入局部最小值时,在不违背MCMC采样平衡条件的前提下增加系统能量以逃离局部最小值。

## 五、结束语

量子计算是一种新型的计算模式,但它同遗传算法、蚁群算法一样,不过是人们对自然的改造与利用。当然,人们对于量子计算的了解还远远不够——无论是量子退火机还是通用量子计算,亦或是伊辛机、量子启发式退火,都仍然面临着不少挑战和机遇。

在量子赛道中,如550W那般智能且通用的量子计算机,对处于NISQ时代的我们而言,令人神往却又遥不可及。也许百年之后,我们仍不能拥有可靠的量子计算机;也许十年之内,我们便可以实现大规模容错量子计算。在经典赛道中,经典计算机毕竟不是量子计算机,并行和隧穿的模拟也许是神来之笔,也许只能是东施效颦。

但这并不影响人们深入研究的热情。面对科技的历史,我们可以感叹人类的智慧;面向科技的未来,我们却很难做出预言。但只有怀着对星空的想象和憧憬,才能脚踏实地,在星空的指引下走出我们的历史。

## 参考文献

- [1] Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond[J]. *Quantum*, 2018, 2: 79.
- [2] Finnila A B, Gomez M A, Sebenik C, et al. Quantum annealing: A new method for minimizing multidimensional functions[J]. *Chemical Physics Letters*, 1994, 219(5–6): 343–348.
- [3] Albash T, Lidar D A. Adiabatic quantum computation[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(1): 015002.
- [4] Yarkoni S, Raponi E, Bäck T, et al. Quantum annealing for industry applications: Introduction and review[J]. *Reports on Progress in Physics*, 2022.
- [5] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S. A quantum approximate optimization algorithm[OL]. arXiv:1411.4028, 2014.
- [6] Cerezo M, Arrasmith A, Babbush R, et al. Variational quantum algorithms[J]. *Nature Reviews Physics*, 2021, 3(9): 625–644.
- [7] Amin M H, Andriyash E, Rolfe J, et al. Quantum Boltzmann machine[J]. *Physical Review X*, 2018, 8(2): 021050.
- [8] Wang Z, Marandi A, Wen K, et al. Coherent Ising machine based on degenerate optical parametric oscillators[J]. *Physical Review A*, 2013, 88(6): 063853.
- [9] Goto H. Quantum computation based on quantum adiabatic bifurcations of Kerr–nonlinear parametric oscillators[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2019, 88(6): 061015.
- [10] Goto H, Endo K, Suzuki M, et al. High–performance combinatorial optimization based on classical mechanics[J]. *Science Advances*, 2021, 7(6): eabe7953.
- [11] Wang T, Roychowdhury J. Oscillator–based Ising machine[OL]. arXiv:1709.08102, 2017.
- [12] Böhm F, Vaerenbergh T V, Vershaffelt G, et al. Order–of–magnitude differences in computational



- performance of analog Ising machines induced by the choice of nonlinearity[J]. Communications Physics, 2021, 4(1): 149.
- [13] Yamamoto K, Ikebe M, Asai T, et al. FPGA-based annealing processor with time-division multiplexing[J]. IEICE Transactions on Information and Systems, 2019, 102(12): 2295-2305.
- [14] Aadit N A, Grimaldi A, Carpentieri M, et al. Massively parallel probabilistic computing with sparse Ising machines[J]. Nature Electronics, 2022, 5(7): 460-468.
- [15] Tsukamoto S, Takatsu M, Matsubara S, et al. An accelerator architecture for combinatorial optimization problems[J]. Fujitsu Sci. Tech. J, 2017, 53(5): 8-13.



【作者简介】崔巍，华南理工大学教授，博士生导师，于2006年在贵州大学获得数学与应用数学专业学士学位，于2011年在中国科学院数学与系统科学研究院获得复杂系统与控制专业博士学位。2011年7月至2015年4月在日本理化学研究所（Riken）任FPR特别研究员，曾在芬兰图尔库大学、澳大利亚新南威尔士大学等高校做访问学者。主要学术兼职包括IEEE Senior Member，中国自动化学会高级会员，中国计算机学会高级会员，中国工业与应用数学学会区块链专业委员会委员，中国计算机学会量子计算专业组执行委员，《控制理论与应用》期刊青年编委等。主要研究领域为量子计算与单光子视觉感知，区块链安全与数据要素治理等。主持国家自然科学基金3项，在国内外重要学术刊物上发表论文60余篇，其中被SCI收录40余篇，出版专著1部，申请发明专利16项，其中已授权7项。



【作者简介】汪皓，2020年毕业于华南理工大学获自动化专业学士学位，目前是华南理工大学在读博士生。主要研究量子启发式计算以及单光子视觉，已经发表研究论文3篇。