面向最大割问题的量子近似优化算法设计*

王云江[1)2)3)] 习汇明[1)2)] 肖卓彦[1)] 王增斌[4)] 石莎[1)†]

1) (西安电子科技大学通信工程学院, 西安 710071)

2) (西安电子科技大学杭州研究院, 杭州 311231)

3) (西安电子科技大学广州研究院, 广州 510555)

4) (北京量子体系科技股份有限公司, 北京 100095)

(2024 年 9 月 1 日收到; 2025 年 2 月 1 日收到修改稿)

量子近似优化算法 (QAOA) 作为含噪的中等规模量子 (NISQ) 计算时代的重要算法, 在最大割问题上展现了极大的优势和潜力. 然而由于缺乏量子纠错的支持, 在 NISQ 体系中计算的可靠性会随着算法的线路深度增加而急剧下降. 这样, 如何针对最大割问题设计高效的浅层低复杂度 QAOA, 是当前 NISQ 时代展现量子计算优势所面临的一个重要挑战. 本文在标准 QAOA 算法解决最大割问题的目标哈密顿量线路中引入泡利 Y 旋转门, 通过提高量子试探函数在单次迭代中的操控灵活性和希尔伯特空间的检索效率, 显著提升了 QAOA 在最大割问题上的性能表现. 基于 MindSpore Quantum 平台的模拟实验表明, 与标准 QAOA 及当前其主流变体 MA-QAOA 和 QAOA+等相比, 本文提出的 QAOA 新变体——RY 层辅助 QAOA 在可降低线路深度、减少 CNOT 双比特量子逻辑门数量的同时, 依然可达到更优的逼近率, 具备更高可靠性的潜力.

关键词: 量子近似优化算法, 最大割, 量子计算, 量子线路

PACS: 03.67.Ac, 03.67.Lx, 02.60.–x **DOI:** 10.7498/aps.74.20241223

CSTR: 32037.14.aps.74.20241223

1 引 言

最大割问题 (MCP)[1] 作为组合优化领域的一个经典问题, 在包括统计物理、图像处理等诸多领域有重要应用. 然而, 除了一些特殊情形, 最大割问题仍是一个非确定性多项式时间 (NP) 完全问题, 目前没有已知的高效经典算法可以在多项式时间内完成求解. 针对最大割问题常见的解决策略是采用近似优化算法去逼近最优解, 并通过逼近率来衡量算法的有效性. 现有研究普遍认为, 即使不要求精确得到最优解, 取得逼近率超过 16/17 (近似为 0.9412) 的解仍是 NP 难问题[2]. 目前相对最有效的经典策略是 Goemans-Williamson 算法, 可实现约 0.878 的逼近率, 但距理论上限仍有相当距离[3].

另一方面, 以量子计算为代表的先进算力正在为许多经典难题提供新的解决方案, 并在诸多有重大价值的关键领域, 如新型材料、医药研发、信息安全、人工智能等方面展现了巨大的应用潜力. 然而, 受限于当前操控水平, 量子计算体系正处于所谓含噪的中等规模量子 (NISQ)[4] 时代, 其特点是缺乏量子纠错应对噪声的干扰, 计算规模有限, 适用于浅层低复杂度的量子算法线路的模拟. 为此, 如何在 NISQ 时代, 探索与之相适应的量子算法[5–8], 发挥量子计算的优势成为一个重大的挑战. 这其中, 量子近似优化算法 (QAOA)[9] 作为一种新兴的量子算法, 在组合优化问题上展现了巨大潜力, 引起了广泛的关注.

* 国家自然科学基金 (批准号: 62471368)、广东省自然科学基金 (批准号: 2023A1515010671)、陕西省重点研发计划 (批准号: 2023-YBGY-206, 2024GX-YBXM-069) 和陕西高校青年创新团队资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sshi@xidian.edu.cn

QAOA 算法的基本思路是通过量子态的迭代演化逐渐逼近问题的最优解. 由于具备在多项式时间内找到近似全局最优解的潜力, QAOA 在处理部分复杂的优化问题时尤有价值. 有鉴于此, 近年来借助 QAOA 算法解决最大割问题, 实现超经典算法的量子优势成为当前研究的热点. 然而, QAOA 解决最大割问题面临的一个关键挑战是其使用的量子线路往往较深, 需要的双比特量子逻辑门个数也较多 (如受控非门)[10–15]. 这使得其在缺乏量子纠错保护的 NISQ 设备上的实际运行效果大打折扣, 特别是随着量子线路深度的增加, 噪声累积问题变得尤为严重, 极大地限制了 QAOA 的性能表现[16–19].

近年来, 为了提升 QAOA 在 NISQ 体系中的实际性能, 研究人员开发了多种变体. 这些变体主要分为两大类. 第一类是通过将 QAOA 与特定结构相结合来增强性能. 例如, Chandarana 等[20]提出的 DC-QAOA 在传统 QAOA 中加入了与问题相关的反绝热驱动项, 这一策略不仅加快了算法的收敛速度, 而且减少了所需的线路深度. 同样, Magann 等[21]提出的 FALQON+通过针对性的 QAOA 初始化过程, 有效改进了 8—14 个节点的非同构图上标准 QAOA 的初始化效果. 此外, Chalupnik 等[22]通过增加一个多参数的问题无关层而提出的 QAOA+, 实现了对多种问题的泛化能力, 尤其是在处理随机正则图上的最大割问题时显著提升了逼近率. Sun 等[23]考虑到平移不变性对 QAOA 性能的影响, 从而在应用 QAOA 时, 使量子线路与待求解问题的对称性保持一致, 可以有效提升其效率和准确度.

第二类变体旨在优化 QAOA 的线路模型结构来提升低深度 QAOA 的逼近比. 例如, Wurtz 和 Love[24]提出的 ST-QAOA 利用经典近似解来构建特定问题的量子线路, 实现了与经典算法相当的性能, 并在低深度条件下超越了传统 QAOA. Wang 等[25]通过引入 Quantum Dropout, 并选择性地精简部分量子线路来维持总损失函数不变, 在一些组合优化问题上提升了 QAOA 的性能表现. 此外, Herrman 等[26]提出的 MA-QAOA 线路模型通过为问题哈密顿量和混合哈密顿量中的每个元素分配独立的参数, 提高了算法的灵活性和逼近率.

尽管现有研究在一定程度上提高了低深度 QAOA 的逼近率, 但在追求高逼近率的情况下, 线路的深度仍然是一个挑战. 本文面向最大割问题, 设计了一种浅层低复杂度的 QAOA 线路模型. 特别地, 与 QAOA+在完整的 QAOA 层之后引入与 X 旋转门的形式引入问题无关层不同, 本文通过在最大割问题的 QAOA 目标哈密顿量中引入泡利 Y 旋转门, 改善了单层 QAOA 的逼近率. 在至多 15 个节点的最大割问题上验证了该线路. 结果显示, 与标准 QAOA 算法相比, 尽管增加了经典优化参数的数量, 但逼近率获得显著提升, 这意味着达到更接近最优解所需的层数和双比特量子逻辑门个数显著降低, 从而显著降低了量子噪声对量子线路的影响, 更适用于当前 NISQ 计算设备. 进一步地, 将这一方法与其他 QAOA 及其变体, 包括 MA-QAOA 和 QAOA+进行了对比, 发现在全连接图、正则图和随机图的最大割问题上, 本文提出的方法在相似复杂度的情况下, 能够实现更高的逼近率.

2 背 景

2.1 最大割问题

最大割问题[1]是图论中的一个经典 NP 难问题, 其目标是求一种分割方法, 将一个图的节点分割成两个互不相交的子集, 以使得被切断的边数量最大. 具体来讲, 在一个无向图 $G=(V,E)$ 中, V 表示图 G 的节点集, E 表示图 G 的边集. 那么该图上的割是指将图的节点集 V 分割成两个互不相交的集合 $(V1,V2)$ 的一种划分方式, 其中每个割对应一个边集合, 这些边的两个节点被划分在不同的节点集合中. 割的大小可定义为这个边集合的大小, 即被割开边的条数. 最大割问题即找到一个割开边数最多的分割方法.

令 z_u 表示节点 u ($u\in V$) 所处的集合 (集合 0、集合 1), 即 $z_u\in\{0,1\}$. 当 $(u,v)\in E$ 时, 用 $p_{(u,v)}$ 的值表示边 (u,v) 是否为被割边, 0 代表不是被割边, 1 代表是, 即 $p_{(u,v)}\in\{0,1\}$, 则有

$$p_{(u,v)}=2z_uz_v-z_u-z_v. \tag{1}$$

这样, 一个割的被割边的条数 C 为

$$C=\sum_{(u,v)\in E}p_{(u,v)}=\sum_{(u,v)\in E}2z_uz_v-z_u-z_v. \tag{2}$$

最大割问题的目标就是最大化 C, 此时图 G 的节点划分就是问题的解.

2.2 量子近似优化算法 (QAOA)

QAOA(量子近似优化算法) 是一种受绝热量子计算启发的量子算法, 其核心思想是将经典优化问题映射到量子哈密顿量上, 并通过一系列参数化的酉变换优化量子态, 使得该量子态的期望值尽可能接近优化问题的最优解. 完整起见, 本文将其过程概述如下 (详情可参见文献 [9]). QAOA 算法的量子演化线路由两个交替出现的酉算符组成: 问题酉算符和混合酉算符, 一个问题酉算符和一个混合酉算符对应 QAOA 的一层 (层数一般用 p 表示, 单层则 $p=1$), 框图如图 1 所示. 其中, 问题酉算符一般定义为

$$U\left(H_{\mathrm{C}}, \gamma\right)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i} \gamma H_{\mathrm{C}}}, \tag{3}$$

其中, H_{C} 表示问题哈密顿量; γ 表示角度, 为问题酉算符的参数, $\gamma \in \mathbb{R}$. 混合酉算符定义为

$$U\left(H_{\mathrm{B}}, \beta\right)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i} \beta H_{\mathrm{B}}}, \tag{4}$$

其中, $\beta \in[0, \pi]$, H_{B} 是所有单比特泡利 X 算子的和, 也称为混合哈密顿量, 即

$$H_{\mathrm{B}}=\sum_{v=0}^{n-1} X_{v}. \tag{5}$$

若 QAOA 量子线路层数为 p, 则对于任意整数 $p>1$ 和 $2p$ 个角度 $\gamma_{1}, \cdots, \gamma_{p} \equiv \boldsymbol{\gamma}$ 和 $\beta_{1}, \cdots, \beta_{p} \equiv \boldsymbol{\beta}$, 可定义角度依赖的量子态为

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}\rangle= & U\left(H_{\mathrm{B}}, \beta_{p}\right) U\left(H_{\mathrm{C}}, \gamma_{p}\right) \\ & \cdots U\left(H_{\mathrm{B}}, \beta_{1}\right) U\left(H_{\mathrm{C}}, \gamma_{1}\right)|s\rangle,\end{aligned} \tag{6}$$

其中, γ 和 β 的下标代表量子线路的层数, $|s\rangle$ 表示所有基态的均匀叠加态, 即

$$|s\rangle=\frac{1}{\sqrt{2^{n}}} \sum_{z}|z\rangle. \tag{7}$$

通过经典优化器优化参数 $(\boldsymbol{\gamma}^{*}, \boldsymbol{\beta}^{*})$, 使 (6) 式中量子态 $|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}\rangle$ 对应的 H_{C} 期望值 $\langle C\rangle$ 尽可能接近优化问题的最优解, 即完成 QAOA 的求解, 如图 1 所示.

2.3 QAOA 的变体

最初提出的 QAOA 算法并非对于任何特定类别的优化问题都是最优的. 事实上, 越来越多的研究表明, 针对不同的问题, QAOA 变体往往有更好的性能表现. 下面简单介绍两种常用的主流 QAOA 变体, 方便后续做对比.

1) 多角度 QAOA

Herrman 等 [26] 提出了多角度 QAOA (MA-QAOA) 来改进 QAOA. MA-QAOA 通过增加可变参数来提高逼近率, 量子线路结构如图 1(c) 所示. 该变体在量子线路的问题酉算符层和混合酉算符层增加了角度参数. 传统的 QAOA 可视为 MA-QAOA的特例. Herrman 等 [26] 的研究表明, 相同逼近率下, MA-QAOA 与标准 QAOA 相比所需要的量子线路更浅.

2) QAOA+

Chalupnik 等 [22] 提出了一种称为 QAOA+的 QAOA 变体. 该变体在传统的 $p=1$ 的 QAOA 基础上, 增加了一个额外的多参数、问题无关的层. QAOA+可以在保持线路深度低于 $p=2$ QAOA 的情况下, 获得比 $p=1$ QAOA 更高的逼近率, 该量子线路图如图 2 所示.

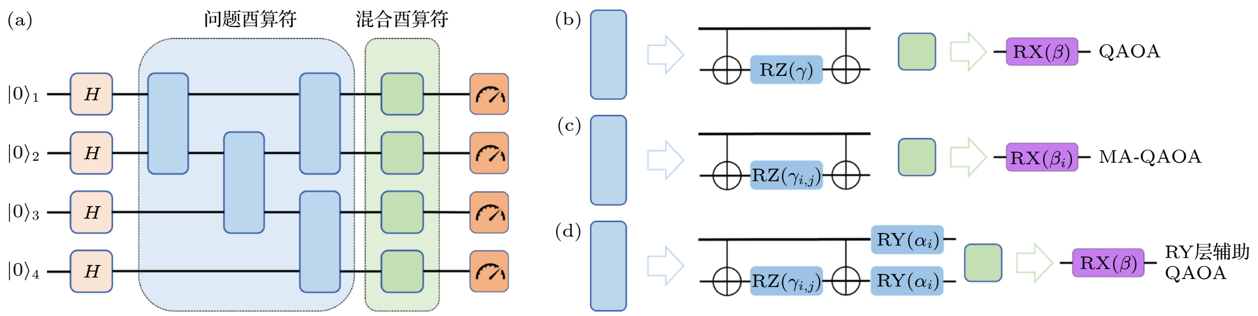

图 1 (a) 由问题酉算符和混合酉算符构成的单层 QAOA 量子线路框图; (b) 标准 QAOA 的问题酉算符 (蓝色) 和混合酉算符 (紫色) 的分解; (c) MA-QAOA 问题酉算符 (蓝色) 和混合酉算符 (紫色) 的分解; (d) RY 层辅助 QAOA 问题酉算符 (蓝色) 和混合酉算符 (紫色) 的分解

Fig. 1. (a) Single-layer QAOA quantum circuit diagram composed of problem and mixing operators; (b) decomposition of the problem operator (blue) and mixing operator (purple) in standard QAOA; (c) decomposition of the problem operator (blue) and mixing operator (purple) in MA-QAOA; (d) decomposition of the problem operator (blue) and mixing operator (purple) in RY-layer-assisted QAOA.

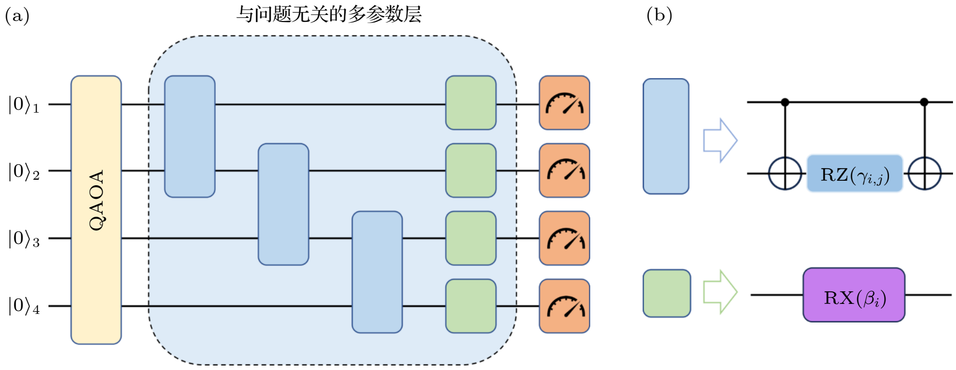

图 2 (a) 增加了问题无关层的 QAOA+的量子线路框图 [22]; (b) QAOA+问题无关层的分解

Fig. 2. (a) The QAOA+ quantum circuit includes a standard QAOA layer and an additional problem-independent multi-parameter layer[22]; (b) the decomposition of the problem-independent multi-parameter layer.

3 RY 层辅助 QAOA

QAOA 通常采用梯度下降法进行参数优化, 其参数量将随着 QAOA 层数的递增而显著增长. 同时, 伴随梯度下降时出现的指数级衰减现象, 整个线路的参数优化复杂度急剧上升, 这成为 QAOA 在实际应用中所面临的重要挑战. 另外, QAOA 的层数增多也会给 NISQ 硬件平台带来巨大的实现压力. 这是因为 NISQ 硬件通常具有有限的相干时间和较高的双比特量子逻辑门错误率, 难以应对过多的线路层数. 因此, 如何在现有硬件条件下实现 QAOA 的有效利用就显得尤为关键. 这促使我们设计一种既能够充分利用 NISQ 体系的计算能力, 又能够避免由于层数过多带来的错误累积问题, 高效解决最大割问题的 QAOA 策略, 由于引入了绕 Y 轴的旋转操作, 我们称之为 RY 层辅助 QAOA.

在标准的 QAOA 单层线路中, 通常在问题层后使用一层 RX 门 (即泡利 X 旋转门) 进行混合操作. 考虑到组合优化问题的特征, 每个问题层可以进一步细分为多个问题单元. 我们提出的 RY 层辅助 QAOA, 将混合操作具体化到每个问题单元上. 具体来讲, 就是在问题酉算符层引入包含独立参数的 RY 门 (即泡利 Y 旋转门), 如图 1(d) 所示. 在每个量子比特实现了任意的幺正操作, 从而扩大了希尔伯特探索空间, 显著提升了单层算法的性能. 以最大割问题为例, RY 层辅助 QAOA 策略如下.

1) 制备初始量子态: 根据问题图的大小确定量子线路的量子比特个数 n. 从 n 个 $|0\rangle$ 量子比特出发, 对每个量子比特进行 H 门操作可以得到系统初始量子态 $|s\rangle$, 其中 $|s\rangle$ 如 (7) 式所示.

2) 问题哈密顿量的构建: 将 $z=(Z+I)/2$ 代入 (2) 式中 (I, Z 分别为单位算子和泡利 Z 算子), 并省略式中单位算子, 可得到最大割问题目标函数对应的问题哈密顿量 H_{C} [9]:

$$H_{\mathrm{C}}=\sum_{(u,v)\in E}\frac{Z_uZ_v}{2}. \tag{8}$$

3) 构造 RY 层辅助 QAOA 量子线路: 根据问题哈密顿量构造 QAOA 问题层量子线路, 在问题层线路后面引入 RY 层. 这样, 问题层酉算符可以表示为

$$U\left(H_{\mathrm{C}},\gamma_k,t_k\right)=\exp\left[-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sum_{(a,u,v)}^{E}\gamma_kZ_uZ_{mv}+t_{k,2a-1}Y_u+t_{k,2a}Y_v\right] \tag{9}$$

$$\approx\exp\left[-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sum_{(a,u,v)}^{E}\gamma_kZ_uZ_v\right]\times\exp\left[-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sum_{(a,u,v)}^{E}t_{k,2a-1}Y_u\right]\times\exp\left[-\mathrm{i}\frac{1}{2}\sum_{(a,u,v)}^{E}t_{k,2a}Y_v\right] \tag{10}$$

$$\approx\prod_{(a,u,v)\in E}\exp\left[-\mathrm{i}\gamma_k\frac{Z_uZ_v}{2}\right]\times\prod_{(a,u,v)\in E}\exp\left[-\mathrm{i}t_{k,2a-1}\frac{Y_u}{2}\right]\times\prod_{(a,u,v)\in E}\exp\left[-\mathrm{i}t_{k,2a}\frac{Y_v}{2}\right]. \tag{11}$$

(10) 式和 (11) 式是应用 Trotter 分解法 (即 $\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} \approx \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}$) 得到的, 式中 E 表示问题图边, 序号集合 $\boldsymbol{t_k} = (t_{k,1}, t_{k,2}, \cdots, t_{k,2m})$, k 为 QAOA 线路中的层数, m 是问题图边的数量, Y 是泡利 Y 算子. 酉算子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k Z_u Z_v}$ 可以由 CNOT 门和 RZ 门 (即泡利 Z 旋转门) 组合实现. 推导如下:

$$\boldsymbol{Z}_u \boldsymbol{Z}_v = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{12}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k Z_u Z_v} &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_k} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathrm{CNOT}\,(u, v)\,\mathrm{RZ}\,(v, 2\gamma_k)\,\mathrm{CNOT}\,(u, v)\,. \end{aligned} \tag{13}$$

因此, $U\,(H_{\mathrm{C}}, \gamma_k, t_k)$ 可以表示为

$$\begin{aligned} & U\,(H_{\mathrm{C}}, \gamma_k, t_k) \\ =& \prod_{(a,u,v)\in E} \mathrm{CNOT}\,(u, v)\,\mathrm{RZ}\,(v, \gamma_k)\,\mathrm{CNOT}\,(u, v) \\ & \times \prod_{(a,u,v)\in E} \mathrm{RY}\,(u, t_{k,2a-1}) \times \prod_{(a,u,v)\in E} \mathrm{RY}\,(v, t_{k,2a}). \end{aligned} \tag{14}$$

对于混合酉算符, H_{B} 为生成元, β_k 为旋转角度参数, 将 $U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_k)$ 的值代入, 可以得到

$$\begin{aligned} U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_k) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta_k H_{\mathrm{B}}} \\ &= \exp\left(-\mathrm{i}\beta_k \sum_{k=0}^{n-1} x_v\right) = \prod_{v=0}^{n-1} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta_k x_v}, \end{aligned} \tag{15}$$

其中, X 是泡利 X 算子. 酉算子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta_k X_v}$ 可以由 RX 门实现, $U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_k)$ 可以表示为

$$U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_k) = \prod_{v=0}^{n-1} \mathrm{RX}(v, 2\beta_k). \tag{16}$$

4) 求解期望值: 初始量子态通过 p 层 QAOA 量子线路得到输出量子态:

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t\rangle =& U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_p)\,U\,(H_{\mathrm{C}}, \gamma_p, t_p) \\ & \cdots U\,(H_{\mathrm{B}}, \beta_1)\,U\,(H_{\mathrm{C}}, \gamma_1, t_1)\,|s\rangle, \end{aligned} \tag{17}$$

通过对 $|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t\rangle$ 进行测量, 得到 H_{C} 在 $|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t\rangle$ 上的期望值 $\langle C\rangle$,

$$\langle C\rangle = \langle \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t | H_{\mathrm{C}} | \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t\rangle\,. \tag{18}$$

5) 参数优化: 优化量子线路中的参数, 使得 H_{C} 在对 $|\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t\rangle$ 上的期望值尽可能大.

6) 重复执行: 重复进行步骤 4) 和 5), 直到结果收敛, 得到最佳参数 $(\boldsymbol{\gamma}^*, \boldsymbol{\beta}^*, t^*)$.

$$(\boldsymbol{\gamma}^*, \boldsymbol{\beta}^*, t^*) = \arg\max_{\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}, t} \langle C\rangle. \tag{19}$$

7) 输出结果: 初始量子态通过 RY 层辅助 QAOA 后得到输出量子态, 经多次测量取最优解输出.

在最大割问题中, CNOT-RZ-CNOT 门的数量与问题图边的数量有关. 每多一条边, 需要在每层量子线路中, 增加两个 RY 旋转门, 引入两个参数. 虽然增加的 RY 门会加深单层线路的深度, 增加参数优化的计算量, 但由于其会显著增加单层算法的学习和模拟性能而降低线路层数, 对整体量子线路而言, 深度反而会降低, 同时整个线路所实现的逼近率也会获得显著提升.

4 实验结果与对比分析

本文使用 MindSpore Quantum [27] 量子计算框架, 实现了标准 QAOA 及其主流变体 MA-QAOA 和 QAOA+, 并与本文提出的 RY 层辅助 QAOA 进行了对比实验. 选取的最大割问题涵盖了多种图结构, 包括完全图、3-正则图、4-正则图, 以及边概率在 0.3—0.5 之间的随机图, 如图 3 所示. 完全图代表了节点之间密集连通的系统, 3-正则图和 4-正则图则提供了更为统一的网络拓扑, 而随机图则模拟了较为不可预测的情况. 受经典计算机模拟能力所限, 与当前主流实验一样, 本文所用图的规模设定为从 5 节点到 15 节点不等, 考察不同图复杂情况下的算法性能. 并通过节点数不断上升变化的过程对比分析本文提出的量子线路与标准 QAOA

及其变体在随着问题复杂性而展现的可拓展性. 本文采用的进行参数优化的优化器为 Adam, 学习率设为 0.05, 迭代次数为 200 次.

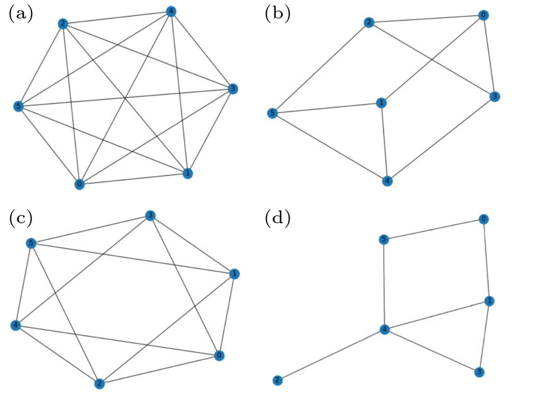

图 3 实验采用的四类图 (a) 完全图; (b) 3-正则图; (c) 4-正则图; (d) 边概率在 0.3—0.5 之间的随机图

Fig. 3. The four types of graphs adopted in the experiments: (a) Complete graphs; (b) 3-regular graphs; (c) 4-regular graphs; (d) random graphs with edge probabilities between 0.3 and 0.5.

本节评估了本文所提出的 QAOA 新变体与标准 QAOA 及其现有的主流变体 (均为单层) 在不同图类型和规模下的平均逼近率. 对不同类型的问题图以及节点数量, 均采用 50 张图进行实验, 结果如图 4 所示.

由图 4 易见, 随着图规模的增加, 平均逼近率呈下降趋势. 同时, 上述量子优化策略对图的类型有很强的依赖关系. 下面对图的类型、图的规模对不同 QAOA 变体性能的影响进行详细分析.

首先看各 QAOA 变体在不同图类型下的性能, 如图 4 所示, 图的类型 (完全图、正则图或随机图) 显著影响了 QAOA 变体实现的逼近率. 在节点数小于 10 时, 所有变体在应用于完全图时展现出优秀的平均逼近率 (0.98). 应用于正则图以及随机图时, 标准 QAOA, MA-QAOA 和 QAOA+性能下降明显, QAOA 的平均逼近率下降到了 0.85 以下, MA-QAOA 和 QAOA+的平均逼近率降到了 0.9 左右. 值得注意的是, 本文提出的 RY 层辅助 QAOA 性能受到的影响较小, 平均逼近率仍能保持在 0.98 以上. 随着节点数量的增加, 这种趋势变得更加明显. 在完全图中, 大多数变体在 10—15 个节点时能够保持相当高的性能, 平均逼近率超过 0.98. 然而, 在具有 10—15 个节点的正则图和随机图中, 标准 QAOA, MA-QAOA 和 QAOA+的性能显著下降, QAOA 的平均逼近率在 0.65—0.8 之间, MA-QAOA 的逼近率在 0.75—0.9 之间, QAOA+的逼近率在 0.8—0.9 之间. RY 层辅助

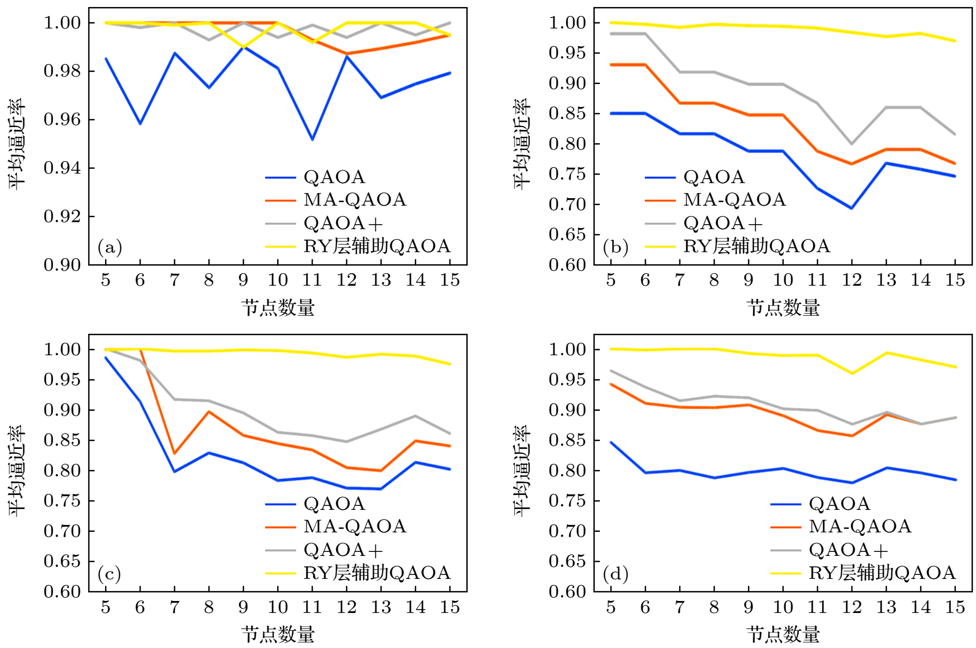

图 4 单层 QAOA, MA-QAOA, QAOA+和 RY 层辅助 QAOA 分别在四类图上的平均逼近率 (a) 完全图; (b) 3-regular 图; (c) 4-regular 图; (d) 随机图. 这里的问题图由 NetworkX 库随机生成

Fig. 4. Average approximation ratios of single-layer QAOA, MA-QAOA, QAOA+, and RY-layer-assisted QAOA on the four types of graphs: (a) Complete graphs; (b) 3-regular graphs; (c) 4-regular graphs; (d) random graphs. The problem instances are randomly generated using the NetworkX library.

QAOA 的逼近率虽然有所浮动, 但仍能保持在 0.96 以上. 可见, 本文的 RY 层辅助 QAOA 相比其他几种变体, 受不同图类型的影响最小, 鲁棒性最强.

从图的规模来看, 图 4 显示出, 随着正则图和随机图中图节点数量的增加, 平均逼近率有减少的趋势. 在完全图中, 平均逼近率减少的程度较小. 特别地, 随着图规模的增长, QAOA 变体的平均逼近率显著降低. 值得注意的是, RY 层辅助 QAOA 在图节点数量增加时表现出更强的稳健性. 例如, 对于 MA-QAOA, 逼近率从 5 个节点的 0.99 (4-正则图) 和 0.94 (随机图) 下降到 15 个节点的 0.84 (4-正则图) 和 0.88 (随机图). 同样, RY 层辅助 QAOA 的逼近率从 5 个节点的 0.997 (4-正则图) 和 0.995 (随机图) 到 15 个节点时, 仍保持 0.985 (4-正则图) 和 0.97 (随机图) 的高逼近率.

随后, 对比本文提出的 RY 层辅助 QAOA 与其标准版及目前已有的各主流变体在最大割问题上的资源消耗情况. 实验以 8 节点图为例, 结果如图 5 所示. 和标准单层 QAOA 量子线路相比, RY 层辅助 QAOA, MA-QAOA 和 QAOA+都通过添加额外参数来提高算法性能 (QAOA+额外又添加了 CNOT 门, 又会增加错误产生风险). 而在性能方面, 对于正则图, RY 层辅助 QAOA 的平均逼近率显著优于标准的 QAOA 及其主流变体 MA-QAOA 和 QAOA+. 特别地, 对于边较少的 3-正则图而言, RY 层辅助 QAOA 通过少量的参数增加, 即获得了显著的性能增益, 在逼近率和资源使用方面取得了更好的均衡.

值得注意的是, 由于 RY 层辅助 QAOA 和 QAOA+都添加了额外的门来提高性能, 所以在 $p=1$ 时它们的线路深度会大于 $p=1$ 的标准 QAOA, 但小于 $p=2$ 的 QAOA. 由图 5 可以看出, $p=1$ 的 QAOA+平均逼近率略优于 $p=2$ 的标准 QAOA, 而 $p=1$ 的 RY 层辅助 QAOA 的平均逼近率则明显优于 $p=2$ 的标准 QAOA. 所以, $p=1$ 的 RY 层辅助 QAOA 虽然单层线路深度相比 $p=1$ 的标准 QAOA 深, 但后者想要获取相同的平均逼近率则需要更多的层数, 导致整体深度反而更高, 同时 CNOT 门数量也会大幅增多. 如表 1 所列, 在相同逼近率下, RY 层辅助 QAOA 相比其他变体线路深度更低, CNOT 门数量也更少, 也将更适应于实际含噪声的量子体系.

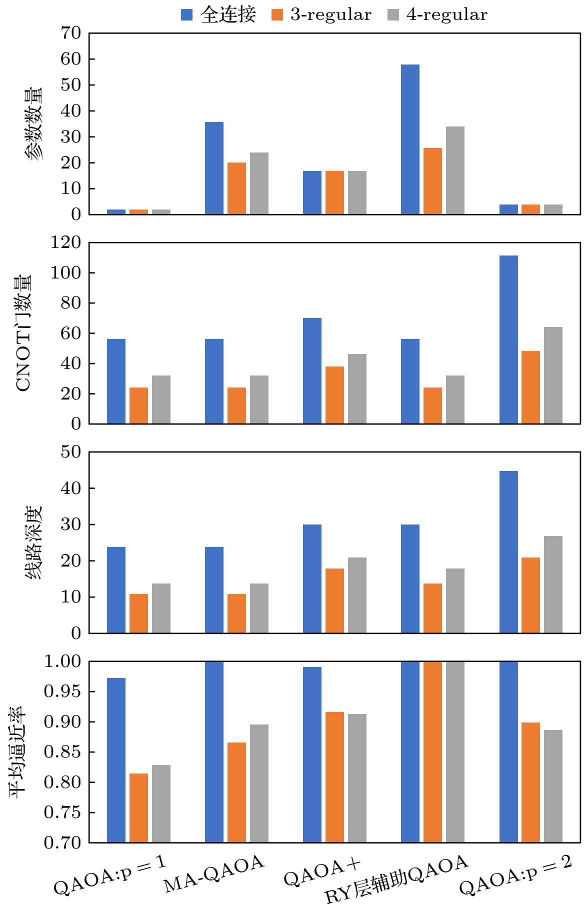

图 5 标准 QAOA(包括单层和双层) 及其各变体在 8 节点各类型图上的资源消耗及性能表现

Fig. 5. Resource consumption and performance of standard QAOA (including single-layer and double-layer) and its variants on 8-node graphs of various types.

表 1 100 个 8 节点随机问题图上, 各变体达到 0.9 的逼近率需要的平均线路深度、参数数量及 CNOT 门数

Table 1. The average circuit depth, number of parameters, and number of CNOT gates required for each variant to achieve an approximation ratio of 0.9 on 100 random 8-node problem graphs.

变体	线路深度	参数数量	CNOT门数量
QAOA	61.09	7.54	104.96
MA-QAOA	31.76	84.61	53.73
QAOA+	50.09	38.52	89.54
RY层辅助QAOA	21.92	29.84	27.84

为了进一步验证 RY 层辅助 QAOA 在 NISQ 情形下的鲁棒性, 在 MindSpore Quantum 量子计算框架下添加了随机噪声, 并对双层 QAOA 与 RY 层辅助 QAOA 进行了比较实验. 其中噪声参数的设置参照近年来 IBM 处理器的噪声参数[28], 具体为: 双比特量子门发生错误概率 $p=2.848\times10^{-3}$ 的去极化噪声, 而单比特量子门上为

$p = 4.43 \times 10^{-4}$ 的去极化噪声. 受篇幅所限, 这里给出 5—10 节点的 4-正则图下, 两种网络模型的实验仿真结果, 具体如图 6 所示. 容易看到, 本文所提出的 RY 层辅助 QAOA 在噪声情况下具有更好的鲁棒性. 以图 6 中的 7 节点 4-正则图为例, 双层标准的 QAOA 在 7 节点正则图上的平均逼近率由约 0.91 下降至约 0.83, 降幅为 0.08; 而 RY 层辅助 QAOA 的平均逼近率由约 1 下降至约 0.975, 仅降低了 0.025.

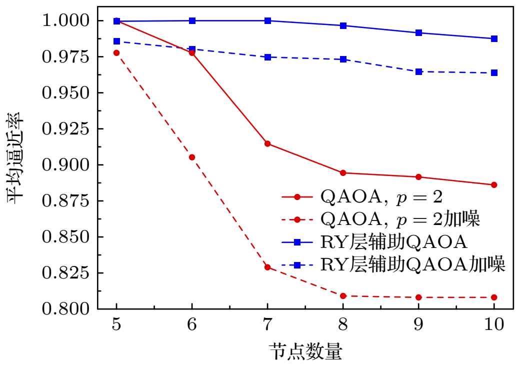

图 6 噪声条件下, 标准 QAOA(双层) 及 RY 层辅助 QAOA 在 5—10 节点 4-正则图上的平均逼近率
Fig. 6. Average approximation ratios of standard QAOA (two-layer) and RY-layer-assisted QAOA on 4-regular graphs with 5 to 10 nodes under noisy conditions.

5 结 论

本文通过在标准 QAOA 算法中针对最大割问题的目标哈密顿量线路中引入泡利 Y 旋转门, 提高了量子试探函数在单次迭代中的操控灵活性和希尔伯特空间的检索效率, 显著提升了 QAOA 在最大割问题上的性能表现. 在完全图、3-正则图、4-正则图和边概率在 0.3—0.5 之间的随机图等不同的问题图上, 基于 MindSpore Quantum 平台将本文提出的 RY 层辅助 QAOA与标准的 QAOA 及其现有的主流变体 MA-QAOA和 QAOA+进行了对比实验. 结果表明, 本文提出的 QAOA 线路新变体 RY 层辅助 QAOA 在降低深度、减少 CNOT 双比特量子逻辑门数量的同时, 依然达到更优的逼近率, 具备更高可靠性的潜力.

参考文献

[1] Adjiman C S, Schweiger C A, Floudas C A1998 *Mixed-Integer Nonlinear Optimization in Process Synthesis* // Du D Z, Pardalos P M *Handbook of Combinatorial Optimization* (Boston: Springer) pp1–12
[2] Håstad J 2001 *JACM* **48** 798
[3] Goemans M X, Williamson D P 1995 *JACM* **42** 1115
[4] Preskill J 2018 *Quantum* **2** 79
[5] Cruz D, Fournier R, Gremion F, et al. 2019 *Adv. Quantum Technol.* **2** 1900015
[6] Zhang J, Hegde S S, Suter D 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 030501
[7] Wernsdorfer W, Godfrin C, Balestro F 2019 *Bulletin of the American Physical Society* Boston, USA, pS36
[8] Borle A, Elfving V, Lomonaco S J 2021 *SciPost Phys. Core* **4** 031
[9] Farhi E, Goldstone J, Gutmann S 2014 arXiv: 1411.4028 [quant-ph]
[10] Guerreschi G G, Matsuura A Y 2019 *Sci. Rep.* **9** 6903
[11] Herrman R, Ostrowski J, Humble T S, Siopsis G 2021 *Quantum Inf. Process.* **20** 1
[12] Wurtz J, Lykov D 2021 *Phys. Rev. A* **104** 052419
[13] Akshay V, Philathong H, Morales M E, Biamonte J D 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 090504
[14] Wurtz J, Love P 2021 *Phys. Rev. A* **103** 042612
[15] Farhi E, Gamarnik D, Gutmann S 2020 arXiv: 2005.08747 [quant-ph]
[16] Xue C, Chen Z Y, Wu Y C, Guo G P 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 030302
[17] Wang S, Fontana E, Cerezo M, Sharma K, Sone A, Cincio L, Coles P J 2021 *Nat. Commun.* **12** 6961
[18] Marshall J, Wudarski F, Hadfield S, Hogg T 2020 *IOPSN* **1** 025208
[19] Alam M, Ash-Saki A, Ghosh S 2019 arXiv: 1907.09631[quant-ph]
[20] Chandarana P, Hegade N N, Paul K, Albarrán-Arriagada F, Solano E, Del Campo A, Chen X 2022 *Phys. Rev. Res.* **4** 013141
[21] Magann A B, Rudinger K M, Grace M D, Sarovar M 2022 *Phys. Rev. Lett.* **129** 250502
[22] Chalupnik M, Melo H, Alexeev Y, Galda A 2022 *2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)* Broomfield, USA, Sept. 18–23, 2022 p97
[23] Sun Z H, Wang Y Y, Cui J, Fan H 2023 *NJP* **25** 013015
[24] Wurtz J, Love P J 2021 *TQE* **2** 1
[25] Wang Z D, Zheng P L, Wu B, Zhang Y 2023 *Phys. Rev. Research* **5** 023171
[26] Herrman R, Lotshaw P C, Ostrowski J, Humble T S, Siopsis G 2022 *Sci. Rep.* **12** 6781
[27] Xu X, Cui J, Cui Z, et al. 2024 arXiv: 2406.17248[quant-ph]
[28] AbuGhanem M 2024 arXiv: 2410.00916[quant-ph]

Design of quantum approximation optimization algorithm for the maximum cut problem*

WANG Yunjiang [1)2)3)] XI Huiming [1)2)] XIAO Zhuoyan [1)]

WANG Zengbin [4)] SHI Sha [1)†]

1) (*School of Telecommunications Engineering, Xidian University, Xi'an* 710071 *China*)

2) (*Hangzhou Institute of Technology, Xidian University, Hangzhou* 311231 *China*)

3) (*Guangzhou Institute of Technology, Xidian University, Guangzhou* 510555, *China*)

4) (*Beijing Quantum Systems Technology Co., Ltd., Beijing* 100095, *China*)

(Received 1 September 2024; revised manuscript received 1 February 2025)

Abstract

The max-cut problem (MCP) is a classic problem in the field of combinatorial optimization and has important applications in various fields, including statistical physics and image processing. However, except for some special cases, the MCP still encounters a non-deterministic polynomial complete problem (an NP-complete problem), and there is currently no known efficient classical algorithm that can solve it in polynomial time. The quantum approximate optimization algorithm (QAOA), as a pivotal algorithm in the noisy intermediate-scale quantum (NISQ) computing era, has shown significant potential for solving the MCP. However, due to the lack of quantum error correction, the reliability of computations in NISQ systems sharply declines as the circuit depth of the algorithm increases. Therefore, designing an efficient, shallow-depth, and low-complexity QAOA for the MCP is a critical challenge in demonstrating the advantages of quantum computing in the NISQ era.

In this paper, according to the standard QAOA algorithm, we introduce Pauli Y rotation gates into the target Hamiltonian circuit for the MCP. By enhancing the flexibility of quantum trial functions and improving the efficiency of Hilbert space exploration within a single iteration, we significantly improve the performance of QAOA on the MCP.

We conduct extensive numerical simulations using the MindSpore quantum platform, and compare the proposed RY-layer-assisted QAOA with standard QAOA and its existing variants, including MA-QAOA and QAOA+. The experiments are performed on various graph types, including complete graphs, 3-regular graphs, 4-regular graphs, and random graphs with edge probabilities between 0.3 and 0.5. Our results show that the RY-layer-assisted QAOA achieves higher approximation ratios in all graph types, particularly in regular and random graphs, where traditional QAOA variants are difficult to implement. Moreover, the proposed method exhibits strong robustness as the graph size increases, and can maintain high performance even for larger graphs. Importantly, the RY-layer-assisted QAOA requires fewer CNOT gates and has a lower circuit depth than the standard QAOA and its variants, making it more suitable for NISQ devices with limited coherence times and high error rates.

In conclusion, the RY-layer-assisted QAOA provides a promising approach for solving MCP in the NISQ era. By improving the approximation ratio while reducing circuit complexity, this method demonstrates significant potential for practical quantum computing applications, thus paving the way for developing more efficient and reliable quantum optimization algorithms.

Keywords: quantum approximate optimization algorithm, max-cut, quantum computing, quantum circuit

PACS: 03.67.Ac, 03.67.Lx, 02.60.–x **DOI:** 10.7498/aps.74.20241223

CSTR: 32037.14.aps.74.20241223

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62471368), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2023A1515010671), the Key Research and Development Project of Shannxi Province, China (Grant Nos. 2023-YBGY-206, 2024GX-YBXM-069), and the Young Innovation Team in Colleges and Universities of Shannxi Province, China.

† Corresponding author. E-mail: sshi@xidian.edu.cn

物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

面向最大割问题的量子近似优化算法设计

王云江 习汇明 肖卓彦 王增斌 石莎

Design of quantum approximation optimization algorithm for the maximum cut problem

WANG Yunjiang XI Huiming XIAO Zhuoyan WANG Zengbin SHI Sha

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 74, 080301 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241223
CSTR: 32037.14.aps.74.20241223
在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.74.20241223
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn
