**题目1 说明文档**

**问题1**

设变量代表在X类材料中是否选择了（代表选了，代表没选），代表在Y类材料中是否选择了（代表选了，代表没选），则目标优化函数可以写作：



其中为常系数，按需求给定。我们需要**求该函数的最小值点**。

解释一下函数各项的含义：

第一项为属性一得分与的差值平方，其值越小则代表属性一得分越接近，该项的系数代表该要求的权重。

第二项为属性二得分与的差值平方，其值越小则代表属性二得分越接近，该项的系数代表该要求的权重。

第三项为惩罚函数。因为题目要求在X和Y两类材料中各挑选出和种材料组成某个复合材料（均给定），所以在当前这种编码方式下，理应和，这等价于。而要转有约束问题为无约束问题，这里我们采用惩罚函数法：若不满足约束条件，则，进而，，不可能取得最小值。

对做整理得：



常数项对最值无影响，直接去掉，最终得：



可见这是一个**四次二值无约束优化问题**，属于**PUBO**。

为了用**QAOA算法**求解，我们需要写出该函数的哈密顿量。

**考察单变量函数的哈密顿量：**

例如。用代表，代表，则哈密顿量写做：



再例如，因为，所以，哈密顿量同上。

**考察双变量函数的哈密顿量：**

例如，这等价于（逻辑或），则有：



**考察四变量函数的哈密顿量：**

例如，这等价于，则有：



为了表示更简单，规定：（相同的张量做张量积运算保持不变）

（当时）

则可以统一得到，函数的哈密顿量为：



回到原问题，由哈密顿量的线性性质，可得的哈密顿量为：



其中表示对应维度的哈密顿量的张量积，指标始终代表的维度的哈密顿量，指标始终代表的维度的哈密顿量。

由此我们完整得出了原问题的哈密顿量。

**以下为相应的QAOA算法：**

根据绝热定理设计QAOA线路，使得：

初态哈密顿量：



初态哈密顿量的基态：



末态哈密顿量：



测量末态哈密顿量的基态大概率为所求问题的解。

QAOA线路是以为生成元的酉变换跟以为生成元的酉变换乘积的累积，即：



其中：





（其中不随求和符号和求积符号的指标而改变，因为中的是中的）



（时门无效，自动去掉）



相当于我们只需要用矩阵形如的门（这样的门又可以通过更基本的门和门组合得到）就可以组合出，这样的矩阵统一记为，表示对应的门，最终可得：



便可得出：。

**QAOA的工作流程：**

1. 制备初态（共个量子比特）
2. 初始化参数，用于确定上述的所有量子门
3. 根据参数生成量子线路
4. 测量末态量子状态，计算基态能量的期望
5. 将当前参数及其对应的期望值传入经典优化器进行**最小值优化**得到一组新的参数
6. 重复执行3~5步，直到满足预先设定好的结束条件
7. 最终得到的最高概率的量子态就是问题的解

**问题二**

111