**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（均给定），所以对于当前这种变量的取值，理应有约束和，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，我们先要将二值变量编码到量子比特上。采取如下编码方式：



即：。一共用到了个量子比特。

然后我们需要写出该系统的哈密顿量，预计它是一个阶方阵。

**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（逻辑与），则有：



**考察四变量函数的哈密顿量：**

例如，这等价于，则有：

（阶方阵）

为了表示更简单，规定相同的张量做张量积运算前后保持不变，例如：

（当时）

则可以统一得到，函数的哈密顿量为：



（当时矩阵维数除以，当时矩阵维数除以）

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，指标始终代表维度的哈密顿量，指标始终代表维度的哈密顿量。

注意到，都是对角矩阵，所以**必定是一个对角矩阵**，记为：



又注意到，都是阶矩阵，且只有最右下角位置为非零元素元素，这可推得：**对角上只会在的位置有非零元素，其他位置全为。**记：



根据的具体表达式，可通过如下算法求得的所有非零对角元素，复杂度：

（求得的在后续操作中都当成已知数来用，不必再进行复杂的计算）



由此我们完整得出了原问题的哈密顿量：。

**下面进行QAOA算法的设计：**

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可以得到所求问题的解。

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：



为了对进行基础逻辑门分解，我们需要不断尝试，注意到：





……





所有的这些门乘起来，可得：



其中：



虽然这里并没有写出具体的量子逻辑门组合形式，但可以肯定的是：一定可以分解为一系列基本逻辑门的乘积，从而指导实际量子线路的搭建——这在问题二中会进行。

**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，实现初态到末态的酉变换
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