



计算机科学

COMPUTER SCIENCE

基于Grover算法的图着色问题求解

刘晓楠, 刘正煜, 谢浩山, 赵晨言

引用本文

刘晓楠, 刘正煜, 谢浩山, 赵晨言. 基于Grover算法的图着色问题求解[J]. 计算机科学, 2023, 50(6): 351-357.

LIU Xiaonan, LIU Zhengyu, XIE Haoshan, ZHAO Chenyan. Solving Graph Coloring Problem Based on Grover Algorithm [J]. Computer Science, 2023, 50(6): 351-357.

相似文章推荐 (请使用火狐或 IE 浏览器查看文章)

Similar articles recommended (Please use Firefox or IE to view the article)

基于“嵩山”超级计算机系统下HHL算法的模拟实现

Simulation Implementation of HHL Algorithm Based on Songshan Supercomputer System

计算机科学, 2023, 50(6): 74-80. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.220500108>

混沌自适应量子萤火虫算法

Chaotic Adaptive Quantum Firefly Algorithm

计算机科学, 2023, 50(4): 204-211. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.220100242>

基于OpenMP并行模型下HHL算法的经典模拟实现

Classical Simulation Realization of HHL Algorithm Based on OpenMP Parallel Model

计算机科学, 2022, 49(11A): 211200028-5. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.211200028>

图着色问题禁忌搜索改进算法

Improved Algorithm for Tabu Search of Graph Coloring Problems

计算机科学, 2022, 49(11A): 211000128-5. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.211000128>

Shor整数分解算法的线路优化

Optimization for Shor's Integer Factorization Algorithm Circuit

计算机科学, 2022, 49(6A): 649-653. <https://doi.org/10.11896/jsjcx.210600149>

基于 Grover 算法的图着色问题求解

刘晓楠¹ 刘正煜² 谢浩山¹ 赵晨言¹

¹ 数学工程与先进计算国家重点实验室(信息工程大学) 郑州 450000

² 郑州大学计算机与人工智能学院 郑州 450000

(prof. liu. xn@foxmail.com)

摘要 Grover 量子搜索算法是针对非结构化搜索问题设计的著名量子算法,可用于解决图着色、最短路径排序等问题,也可以有效破译密码系统。图着色问题是最著名的 NP-完全问题之一,文中首先将图着色问题转化为数学上的无向图;然后采用布尔表达式将其转换为布尔可满足性问题,介绍了量子线路图解决布尔表达式的步骤原理以及图着色问题向布尔可满足性问题的转换过程;最后在 IBMQ 云平台上,对三节点的 2-着色问题以及 4-着色问题进行模拟仿真。实验结果验证了使用 Grover 算法求解图着色问题的可行性,在搜索空间为 8 的 2-着色问题和搜索空间为 64 的 4-着色问题中,分别以近 82% 和 97% 的成功概率搜索到目标项。文中使用 Grover 算法解决了 4-着色问题,拓展了该算法在此问题领域上的实验规模,且改进了现有实验的量子线路,使量子位成本更低,结果的成功率更高,展示了 Grover 算法在大型搜索问题中显著的加速效果。

关键词: Grover 算法;图着色问题;量子线路;IBMQ;布尔可满足性问题

中图法分类号 TP385

Solving Graph Coloring Problem Based on Grover Algorithm

LIU Xiaonan¹, LIU Zhengyu², XIE Haoshan¹ and ZHAO Chenyan¹

¹ State Key Laboratory of Mathematical Engineering and Advanced Computing, PLA Information Engineering University, Zhengzhou 450000, China

² School of Computer and Artificial Intelligence, Zhengzhou University, Zhengzhou 450000, China

Abstract Grover quantum search algorithm is a famous quantum algorithm designed for unstructured search problems. It can be used to solve problems such as graph coloring and shortest path sorting, and can also effectively decipher cryptosystems. Graph coloring problem is one of the most famous NP complete problems. In this paper, the graph coloring problem is transformed into an undirected graph in mathematics, and then it is transformed into a Boolean satisfiability problem by using Boolean expression. The steps and principles of solving Boolean expression in quantum circuit diagram and the transformation process from graph coloring problem to Boolean satisfiability problem are introduced. Finally, on the IBMQ cloud platform, for the three nodes, 2-coloring problem and 4-coloring problem are simulated. Experimental results verify the feasibility of using Grover algorithm to solve the graph coloring problem. In the 2-coloring problem with search space of 8 and the 4-coloring problem with search space of 64, the target items are searched with nearly 82% and 97% success probability respectively. In this paper, Grover algorithm is used to solve the 4-coloring problem, expand the experimental scale of the algorithm in this problem field, and improve the quantum circuit of the existing experiments, so that the qubit cost is lower and the result success rate is higher, which shows the remarkable acceleration effect of Grover algorithm in large-scale search problems.

Keywords Grover algorithm, Graph coloring problem, Quantum circuit, IBMQ, Boolean satisfiability problem

1 引言

量子计算是一种遵循量子力学规律调控量子信息单元进行计算的新型计算模式^[1]。量子力学态叠加原理使得量子信息单元的状态可以处于有多种可能性的叠加状态,从而使量子计算机具有强大的并行性,在处理问题时速度比传统的通用计算机更快。以 n 比特输入为例,量子计算机能够通过一步运算完成对 2^n 个输入的计算,在输出运算结果时,每个

结果都以一定的概率输出。

1996 年, Grover 提出了量子搜索算法。该方法通过放大目标解的出现概率,实现了对无序数据库搜索的平方根加速,因其极大地推动了量子计算的发展,成为最经典的算法之一^[2]。

本文将 Grover 算法应用于实际的图着色问题求解^[3]。先将图着色问题转换为布尔可满足性问题,再采用 Grover 算法模拟求解^[4],模拟实现了经典的 4-着色问题求解,并且与现有实验^[5-8]相比,本文的实验结果更优,量子位成本更低。

到稿日期:2022-04-06 返修日期:2022-09-22

基金项目:国家自然科学基金(61972413,61701539)

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China(61972413,61701539).

通信作者:刘正煜(704676894@qq.com)

2 图着色问题与布尔可满足性问题

2.1 图着色问题

图着色问题(Graph Coloring Problem, GCP)又被称为着色问题,是最著名的 NP-完全问题之一,目的是将图上的各个板块涂色,且相邻板块颜色不相同^[9]。如图 1 所示,将一个图着色问题,转换成数学上的无向图。

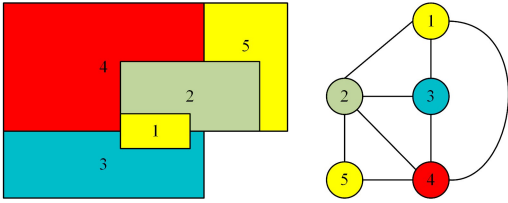


图 1 图着色问题转换无向图

Fig.1 Transformation of graph coloring problem into undirected graph

数学定义:给定一个无向图 $G=(V,E)$,其中 V 为顶点集合, E 为边集合,图着色问题即将 V 分为 K 个颜色组,每个组形成一个独立集,即其中没有相邻的顶点。

图的 m -着色判定问题是给定无向连通图 G 和 m 种不同的颜色,用这些颜色为图 G 的各顶点着色,每个顶点着一种颜色,是否有一种着色法能使 G 中任意相邻的两个顶点着不同颜色。目前,经过大规模的科学计算,可以得出,无论图多么复杂,4 种不同的颜色即可满足着色条件,使相邻节点颜色不同,这就是图论中著名的四色问题。

2.2 布尔可满足性问题

可满足问题(Satisfiability Problem, SAT)指给布尔表达式中的布尔变量赋值,使得由这些布尔变量组合起来的布尔表达式结果为真。这些布尔变量的赋值组合成为可满足问题的解^[10]。可满足问题的一个形象的比喻是:布尔变量相当于电灯的一系列开关,每个开关可以选择“开”(True)或“不开”(False)。然后,这些开关的组合通过黑盒子(布尔表达式)来控制电灯“亮”(True)或“不亮”(False)。可满足问题要解决的就是调整这这些开关,最终使得电灯亮起来。给定公式, SAT 检查它是否可满足。这个决策问题在计算机科学的各个领域都至关重要,包括理论计算机科学、复杂性理论、算法、密码学和人工智能。

2.3 图着色问题转化为 SAT 问题

图着色问题可以转化为数学上的无向图。图上每个板块是一个节点,相邻板块之间的连接关系,在无向图中用节点间的连线表示,再利用布尔关系式,转化为布尔可满足性问题。

以 2-着色问题为例,如图 2 所示,设计一个简单的图,并将其转换成无向图。

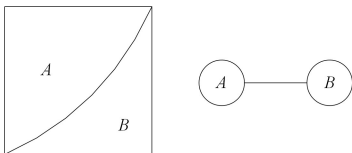


图 2 双节点问题

Fig.2 Two-node problem

两个颜色分别编码为 0 和 1,可以用一个比特表示。

一个节点的颜色用 a 表示,另一个用 b 表示,则这两个节点之间的着色问题可以用异或操作来求解。当结果为 1 时,此时的输入组合满足求解条件,如式(1)、式(2)所示。异或门的真值表如表 1 所列。

$$a \oplus b = 1 \tag{1}$$

展开后为:

$$a \oplus b = (\neg a \wedge b) \vee (a \wedge \neg b) = 1 \tag{2}$$

表 1 异或门真值
Table 1 XOR gate truth value

x	y	$x \oplus y$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

同理,扩展到四色问题时,4 种颜色的编码分别为 00,01,10,11。对于每个节点,需要使用两个比特来构建所有可能的情况。比如节点 A 的颜色用 a_1 和 a_2 表示,节点 B 的颜色用 b_1 和 b_2 表示,那么这两个节点之间,只要两组对应的比特位 ($a_1 b_1$ 与 $a_2 b_2$) 满足至少一组不相同,则此时的颜色组合即为满足这两个节点之间 4-着色判定的目标结果。对应的表达式及展开如下:

$$(a_1 \oplus b_1) \vee (a_2 \oplus b_2) = [(\neg a_1 \wedge b_1) \vee (a_1 \wedge \neg b_1)] \vee [(\neg a_2 \wedge b_2) \vee (a_2 \wedge \neg b_2)] = 1 \tag{3}$$

3 量子计算与 Grover 算法

本节将介绍如何用量子线路实现布尔操作以及 Grover 算法的相关知识。

3.1 布尔操作的量子线路实现

基本的布尔操作有 3 种,分别是“与”“或”“非”,这 3 种布尔操作可以通过量子门实现。

如图 3(a)所示, X 门作用在单量子比特上,做一个简单的“位翻转”,类似于经典计算中的 NOT 门,可以将 0 翻转为 1,将 1 翻转为 0,因此 X 门可用于实现布尔运算中的“非”操作。Toffoli 门,也被称为受控非(CCNOT),是一个三量子比特门,如图 3(b)所示,其中前两个量子位是控制量子位,最后一个是目标量子位。如果两个控制位都是 $|1\rangle$,目标量子位就会翻转。基于此特性,Toffoli 门可用于实现布尔运算中的“与”操作,两个控制量子位代表输入,目标量子位用于存储输出结果。



(a) X 门

(b) Toffoli 门

图 3 量子 X 门与量子 Toffoli 门

Fig.3 Quantum X gate and quantum Toffoli gate

上述两种量子门^[11]已经包含了布尔运算中的“与”和“非”问题,对于“或”问题,不能通过单一的量子门实现,但可以参照布尔基本公式中的求反律,先将两个输入做“非”运算,

再做“与”操作,最后对结果做“非”运算,通过量子门的组合,来实现“或”操作。求反律如式(4)所示,量子线路如图 4 所示。

$$A+B=\overline{\overline{A+B}}=\overline{\overline{A}\cdot\overline{B}} \quad (4)$$

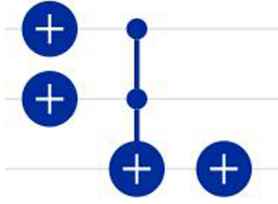


图 4 组合量子门实现“或”运算

Fig. 4 Combining quantum gates to realize “Or” operation

以上这些量子门,都是解决 SAT 问题所需要的。此外,当对一组量子位应用两次相同量子门时,目标量子比特会进行两次相同效果的翻转,从而恢复到原来的状态。根据这一特性,某些量子比特可以重复使用。

3.2 Grover 搜索算法

Grover 量子搜索算法主要是通过变换量子基态的概率幅,从而令所查询目标项对应的量子基态的概率幅达到最大^[12]。图 5 给出了一个完整的 Grover 算法量子线路框架,其中涵盖了初始化至等权叠加态、中间的 Oracle(U_w)、平均反演算子(U_s)和最终的测量模块。Oracle 和平均反演算子组成一个完整的 G 迭代,可通过重复 G 迭代来改变所有量子态的概率^[13]。

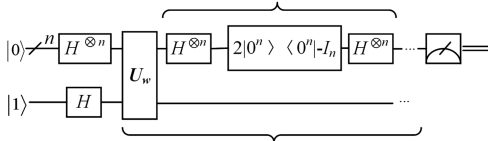


图 5 Grover 算法框架线路图

Fig. 5 Grover algorithm framework circuit diagram

G 迭代可以被看作一个黑匣子^[14],叠加态输入到这个黑匣子后,通过量子纠缠,让符合搜索要求的组合纠缠变相,再经过数学翻折以及振幅干涉抵消。那些变过相的态的振幅通过相长干涉会越来越大,最后测量时,这些态被测到的概率会增大。

下面用图表来说明量子搜索是如何工作的。与许多其他量子算法类似,量子搜索首先使用 Hadamard 门将所有量子比特均匀叠加,如式(5)所示。该过程为所有可能的状态(包括目标)赋予相同的振幅,如图 6 所示,其中所有的条表示集合中每个项目的振幅,深色条表示搜索目标。

$$|s\rangle = H^{\otimes n} |00\dots 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \quad (5)$$

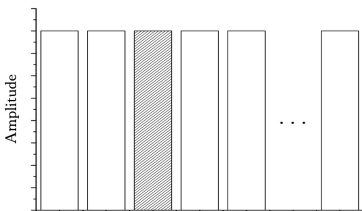


图 6 初始化

Fig. 6 Initialization

然后在均匀叠加的基础上构建 Oracle,通过构造一个映射 U_w 使得目标项的相位反转,但任何与目标项正交的其他项的符号不变^[15]。若 $|a\rangle$ 为目标项,则 $U_w |a\rangle = -|a\rangle$,对于非目标项 $|v\rangle, U_w |v\rangle = |v\rangle$ 。图 7 给出了目标的振幅符号取反(翻转)。然而,如果在这一阶段进行测量,所有项目作为结果的概率仍然相等,因为在计算其概率时,目标振幅的负号将被平方,但目标的翻转振幅略微降低了所有振幅的平均值,如图 7 中的虚线所示。

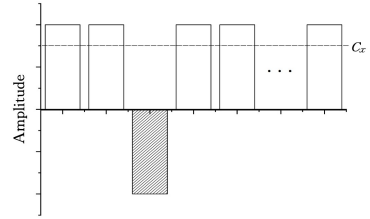


图 7 Oracle 操作后

Fig. 7 After Oracle operation

量子搜索的下一步是构建平均反演算子 U_s ,该操作可将目标状态振幅相对于平均振幅 C_x 做翻转,从而达到增大搜索到目标项概率的目的^[16],其中 C_x 是所有态的平均振幅。

$$U_s = 2|s\rangle\langle s| - I \quad (6)$$

$$C_x = \frac{1}{N} \sum_x C_x \quad (7)$$

图 8 给出了 U_s 操作后的结果振幅。由于非目标(占大多数)比目标更接近平均值,因此它们的振幅在反射后略有降低。相反,目标的振幅离平均值却很远,在反射后,振幅增加的幅度更大。因此,反射的净效应是目标的振幅被放大,而非目标的振幅被缩小^[17]。

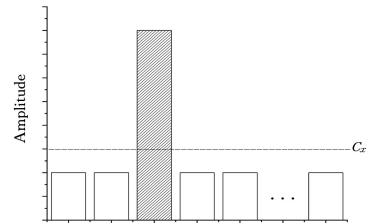


图 8 平均反演算子操作后

Fig. 8 After average inversion operator operation

4 基于 Grover 的图着色问题求解

在本节中,使用 IBMQ 对图着色问题进行模拟仿真。IBMQ 是一个云应用程序,用于对真实的量子硬件和高性能模拟器进行编程,可通过两种方式在量子计算机上运行。第一种是使用 Circuit composer 对经典量子算法进行可视化创建。Circuit composer 是一种图形量子编程工具,用户可以通过拖放指令来构建量子电路并在真实的量子硬件上运行。第二种是使用 Qiskit。Qiskit 是一个用于编程量子计算机的开源框架,可以通过 Qiskit 代码实现量子算法。本文使用 Circuit composer 方法来求解图着色问题。文中实验所使用的量子门均已在上文中介绍。

如图 9 所示,根据 Grover 算法的原理,求解过程可以分为 3 个模块,分别是初始化模块、G 迭代模块和测量模块。其中 G 迭代模块又可以分为 Oracle 模块(U_w)和平均

反演算子模块(U_s)。

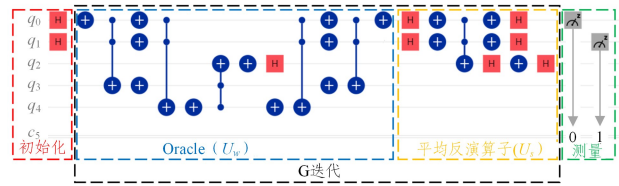


图9 Grover算法解决图着色问题的模块划分

Fig. 9 Module partition of Grover algorithm to solve graph coloring problem

(1)初始化(构建叠加态)

解决一个具有 n 个节点、 e 条边、 k 种颜色的图着色问题,需要 3 种量子寄存器。

输入寄存器:用来存储每个节点的颜色信息,其所需的量子比特数量与节点个数 n 和颜色种类 k 有关,因为每个量子比特被测量塌缩后的状态有两种,故表示所有节点所需的量子位总数为 $n \times \lceil \log_2 k \rceil$ 。

输出寄存器:若公式为真,将包含结果 1;若不为真,将包含结果 0,需要一个量子位。

辅助寄存器:用来存储每条边在计算过程中产生的临时变量,故其所需的量子比特数量与边数 e 以及颜色种类 k 有关。

在本文设计的实验方法中,对于图着色问题中的一条边,需要 $2 \times \lceil \log_2 k \rceil + 1$ 个量子比特来存储计算过程中产生的临时变量,例如 2-着色问题的一条边需要 3 个量子比特,4-着色问题的一条边需要 5 个量子比特。在这种情况下,若图中存在 e 条边,则需要 $e(2 \times \lceil \log_2 k \rceil + 1)$ 个量子比特。但根据 3.1 节中重置量子比特的方法,可以将辅助量子比特进行多次重置,从而让多条边使用相同的辅助量子比特,降低量子位成本,此时需要的量子比特数量为 $2 \times \lceil \log_2 k \rceil + e$ 。

上述两种方法分别确定了辅助量子比特数量的下限和上限,对辅助量子比特的多次重复使用,会导致量子线路变长。在解决实际问题时,可以根据具体问题,将两种方案适当结合,以平衡量子位成本和量子线路长度。

综上所述,算法中消耗的量子比特位与节点数 n 和边数 e 有关,总体的空间复杂度为 $O(n+e)$,为线性复杂度。

首先初始化量子线路,对输入寄存器中的量子比特,进行 Hadamard 操作,构建所有输入组合的等权重叠加态。

(2)构建 Oracle(U_w)

根据具体的图着色问题,将其转换为布尔可满足性问题,

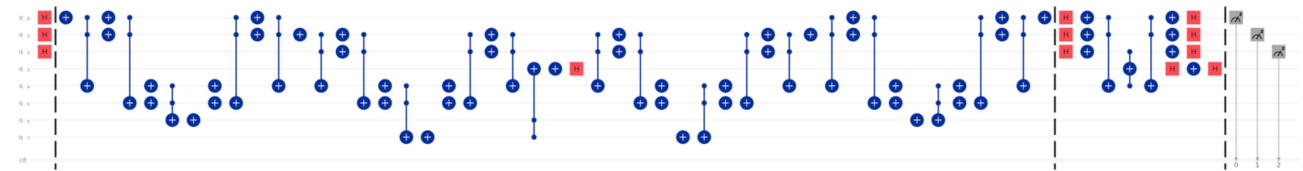


图11 2-着色问题的 Grover 搜索线路

Fig. 11 Grover search circuit for 2-coloring problem

4.2 4-着色问题(三节点三角形)

模拟如图 12 所示的四色问题,先将着色问题转换成无向图,图中共有 3 个节点、3 条边。根据之前的公式推导,每个节点需要两个量子比特来表示颜色信息,代表 4 种颜色的组合分别为 00,01,10 和 11,一共需要 $a_1, a_2,$

用代表“与”“或”“非”3 种操作的量子门,在量子线路中对输入量子比特进行等价的布尔操作,将计算过程中的中间结果作用到辅助量子比特中,且一些辅助比特可以重复使用,从而降低量子位成本,最终将结果作用到输出量子比特中。通过此操作,让输入量子比特产生量子纠缠,让符合搜索要求的组合纠缠变相。

(3)构建平均反演算子(U_s)

该操作是通过对所有 q 输入量子位应用 Hadamard 门和 X 门,然后将所有的输入量子比特共同作用到输出量子比特,达到目标结果的振幅翻转并增强的效果。

(4)测量

最后,对输入量子比特进行测量。此时,使布尔表达式结果为真的组合,其测量概率会增大;对使表达式结果为假的组合,测量概率会减小。

下面将根据此原理,对 3 个节点的 2-着色问题以及 4-着色问题在 IBM 量子云平台上进行仿真模拟。

4.1 2-着色问题(三节点直线型)

对于如图 10 所示的 2-着色问题,先将其转换为无向图。图中共 3 个节点、2 条边。A, B, C 3 个节点的颜色分别用 a, b, c 3 个量子比特来表示。然后根据边与节点的对应关系,构建如式(8)所示的布尔表达式,使公式结果为 1 的组合,即为解决此 2-着色问题的目标组合。

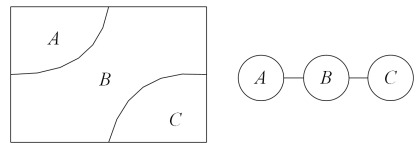


图10 三节点无向图(直线型)

Fig. 10 Three-node undirected graph(linear)

$$(A \oplus B) \wedge (B \oplus C) = [(\neg a \wedge b) \vee (a \wedge \neg b)] \wedge [(\neg b \wedge c) \vee (b \wedge \neg c)] = 1 \tag{8}$$

接着构建量子线路图,用 Grover 算法解决此 SAT 问题,如图 11 所示。在量子线路图中, q_0, q_1, q_2 3 个量子比特代表 A, B, C 3 个节点的颜色; q_3 是输出量子比特,布尔运算的最终结果会作用到 q_3 上; $q_4 - q_7$ 为辅助量子比特,用来存储计算过程中产生的中间数据。一共两条边,采用多边共用辅助量子比特的方法,辅助量子比特数量为 4,其中 q_4, q_5 两个量子比特被多次重复使用, q_6, q_7 分别存储两条边的计算结果,符合 $2 \times \lceil \log_2 k \rceil + e$ 的数量级关系。

b_1, b_2, c_1, c_2 6 个量子比特,分别表示 A, B, C 3 个节点的颜色。然后根据无向图中边与节点的关系,构建出对应的布尔操作,最终得出如式(9)所示的布尔表达式,使此布尔表达式结果为 1 的颜色组合,即为此 4-着色问题的解决方案。

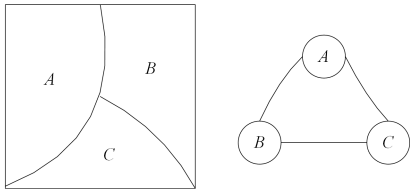


图 12 三节点无向图(三角形)

Fig. 12 Three-node undirected graph(triangular)

$$\begin{aligned}
 & (A \oplus B) \wedge (A \oplus C) \wedge (B \oplus C) \\
 &= [(a_1 \oplus b_1) \vee (a_2 \oplus b_2)] \wedge [(a_1 \oplus c_1) \vee (a_2 \oplus c_2)] \wedge \\
 & \quad [(b_1 \oplus c_1) \vee (b_2 \oplus c_2)] \\
 &= \{ [(\neg a_1 \wedge b_1) \vee (a_1 \wedge \neg b_1)] \vee [(\neg a_2 \wedge b_2) \vee (a_2 \wedge \neg b_2)] \} \wedge \{ [(\neg a_1 \wedge c_1) \vee (a_1 \wedge \neg c_1)] \vee [(\neg a_2 \wedge c_2) \vee (a_2 \wedge \neg c_2)] \} \wedge \{ [(\neg b_1 \wedge c_1) \vee (b_1 \wedge \neg c_1)] \vee [(\neg b_2 \wedge c_2) \vee (b_2 \wedge \neg c_2)] \}
 \end{aligned}$$

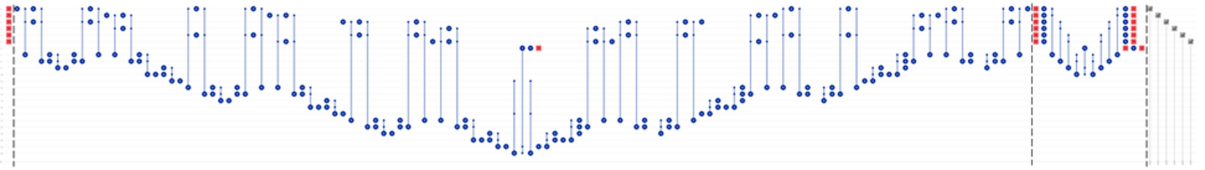


图 13 4-着色问题的 Grover 搜索线路

Fig. 13 Grover search circuit for 4-coloring problem

5 实验结果

本次实验的后端均是基于 IBM 量子云平台的 ibmq_qasm_simulator, 运行次数设定为 16384。

图 14 给出了 2-着色问题(三节点直线型)的结果频率图, 其中, 搜索空间为 8, 着色方案为 0-1-0 和 1-0-1 的两种结果是正确的着色方案, 其概率增大, 符合实际情况, 且如图 15 所示, 经过一次迭代后, 算法正确率达到了 81.58%。

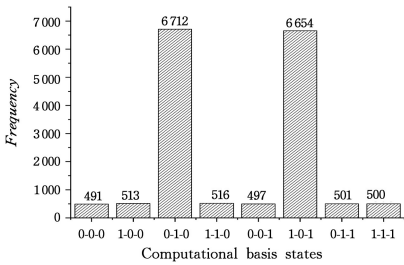


图 14 2-着色问题结果频率图

Fig. 14 2-coloring problem result frequency diagram

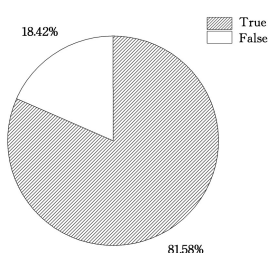


图 15 2-着色问题结果概率图

Fig. 15 2-coloring problem result probability diagram

图 16 给出了 4-着色问题(三节点三角形)的计算结果, 共 64 种输入方案, 其中正确的着色方案有 24 种, 经过 G 迭代与

$$[(\neg b_2 \wedge c_2) \vee (b_2 \wedge \neg c_2)] = 1 \tag{9}$$

在图 13 的量子线路中, q_0, q_1 代表节点 A 的颜色, q_2, q_3 代表节点 B 的颜色, q_4, q_5 代表节点 C 的颜色, 这 6 个量子比特构成输入寄存器; q_6 为输出量子比特; $q_7 - q_{22}$ 为辅助量子比特。图中共 3 条边, 为减少量子线路长度, 每条边都使用 5 个辅助量子比特, 共用 15 个辅助量子比特, 符合 $e(2 \times \lceil \log_2 k \rceil + 1)$ 的数量级关系。其中, $q_7 - q_{11}$ 用于辅助 $A \oplus B$ 这条边的计算过程, 结果存储在 q_{11} 中; $q_{12} - q_{16}$ 用于辅助计算 $A \oplus C$ 的过程, 结果存储在 q_{16} 中; $q_{17} - q_{21}$ 用于辅助计算 $B \oplus C$ 的过程, 结果存储在 q_{21} 中。在此过程中, 有一些辅助量子比特, 例如 $q_7 - q_8, q_{12} - q_{13}$ 及 $q_{17} - q_{18}$ 等, 仍会在重置后被重复使用, 从而降低量子位成本。最终存储在 q_{11}, q_{16} 以及 q_{21} 中的 3 个结果借助量子比特 q_{22} , 将布尔表达式的最终结果作用到输出量子比特 q_6 。

测量之后, 其概率增大, 且如图 17 所示, 经过一次迭代后, 算法的正确率达到了 96.23%。

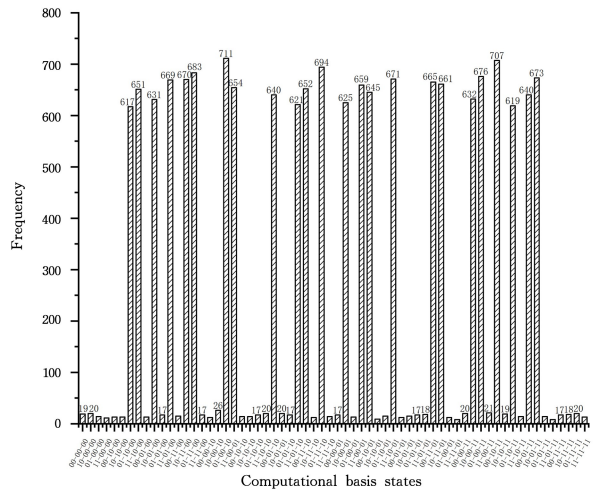


图 16 4-着色问题结果频率图

Fig. 16 4-coloring problem result frequency diagram

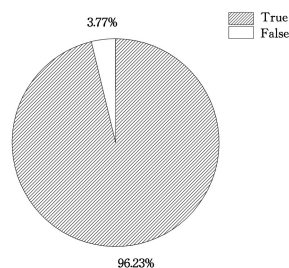


图 17 4-着色问题结果概率图

Fig. 17 4-coloring problem result probability diagram

需要说明的是, 相同的图着色问题转换成的无向图可能并不唯一, 但不同的图结构并不会影响算法的准确率。因为

Grover 算法的特点是增大正确结果的出现概率、降低错误结果概率, 所以其正确率大小主要和问题规模有关, 适合处理大规模数据。在解决图着色问题时, 无向图和布尔表达式作为媒介, 将图着色问题转换为 Grover 算法可以解决的形式, 只要这两个媒介的构造是正确的, 那么 Grover 算法便能以很高的准确率解决具体图着色问题。

在包含 N 个元素的无序列表中找到一个特定元素, 是一个常见的搜索问题。经典算法中需要对无序列表中的所有元素逐一进行判断, 运气最好的情况下只需搜索一次, 运气最差的情况下则需要判断 N 次, 平均时间复杂度为 $O(N/2)$ 。而量子计算在解决这一问题时有着巨大优势, 其利用 Grover 算法的时间复杂度为 $O(\sqrt{N})$, 这是非常显著的加速。

对于图着色问题的求解, 经典算法领域中大多采用回溯算法^[18]。对于节点个数为 n 的 m -着色问题, 回溯算法的平均时间复杂度为 $O(m^n)$, 空间复杂度为 $O(n)$, 而 Grover 搜索算法对此问题的时间复杂度为 $O(\sqrt{m^n})$, 空间复杂度为 $O(n+e)$ 。量子搜索算法与经典搜索算法级别相同, 但时间复杂度相较于经典搜索具有多项式量级的加速, 且 Grover 算法并不局限于搜索目标只有一个的情况, 可以一次性搜索出所有符合要求的目标。从以上方面可以衡量和体现出量子搜索算法相比经典算法的优越性。

近年来, 文献[5-7]作者所在的印度加尔各答大学和文献[8]作者所在的 IBM 托马斯·J·沃森研究中心对 Grover 算法求解图着色问题这一研究领域有较多的研究。在文献[7-8]中, 研究者分别用两种量子线路, 实现了搜索空间为 27 的 3-着色问题求解, 这两种线路的区别主要体现在平均反演算子的构建上。文献[7]的研究中, 在平均反演算子构建阶段, 采用前 $n-1$ 个输入比特, 共同控制第 n 个输入比特的方法。文献[8]采用了 n 个输入比特共同控制输出比特的平均反演算子构建方法, 但因其 Oracle 模块构建复杂, 因此实验所需的量子比特数过多。

本文在现有研究的基础上, 根据对一组量子位应用两次相同量子门时会恢复到原来的状态的原理, 通过对辅助量子比特的多次使用, 优化改进了 Oracle 模块的量子线路, 改善了现有实验中量子比特位数过多的问题, 且将改进后的 Grover 量子线路应用到经典的 4-着色问题中。和现有研究相比, 具体的实验结果如表 2 所列。

表 2 结果对比

Table 2 Results comparison

Source	Problem type	Search space	Number of qubits	Success rate/%
Saha et al. ^[7]	3-coloring problem	27	—	28.60
Hu et al. ^[8]	3-coloring problem	27	50	—
This Work	2-coloring problem	8	8	81.58
This Work	4-coloring problem	64	23	96.23

如表 2 所列, 相比文献[7], 本文采取的 Grover 线路设计

方法的搜索成功率显著提高, 且在问题规模大、输入组合多的情况下, 这种优势更加明显, 更适合处理大规模问题。在文献[8]中, 为了解决搜索空间为 27 的 3-着色问题, 共使用了 50 个量子比特, 而在本文采用的量子线路中, 仅用 23 个量子比特便可以解决问题规模为 64 的 4-着色问题, 降低了量子位的消耗, 且搜索成功率较高。

结束语 量子计算是量子力学和计算机科学相结合的一个前沿领域, 其依靠纠缠和叠加的量子现象来进行运算, 相比经典计算方法在许多方面都具有明显的优势。量子算法是量子计算发展的主要推动力, 与量子计算的加速能力息息相关。量子计算速度快的优势也为处理复杂经典问题提供了新的方向, 从而实现了性能上的飞跃。

本文针对 Grover 搜索算法, 深入探讨了其在求解图着色问题中的具体过程, 包括图着色问题向布尔可满足性问题的转化以及应用 Grover 算法进行仿真模拟等。相比已有研究, 本文优化了量子线路, 将实验规模扩展到了经典的 4-着色问题, 搜索成功率更高, 但依旧存在辅助量子比特数量多, 以及处理更大规模问题时量子线路图过于复杂等问题。以后可对量子线路进行进一步优化, 且在处理大规模问题时, 可采用 Qiskit 代码的方式实现量子算法。

参 考 文 献

- [1] HUANG H L, WU D C, FAN D J, et al. Superconducting quantum computing: a review [J]. Science China Information Sciences, 2020, 63(8): 595-600.
- [2] LIU X N, SONG H C, WANG HON, et al. Overview of improvement and application of Grover algorithm [J]. Computer Science, 2021, 48(10): 315-323.
- [3] SHIMIZU K, MORI R. Exponential-time quantum algorithms for graph coloring problems[J]. 2022, 84(12): 3603-3621.
- [4] FERNANDES D, SILVA C, DUTRA I. Using Grover's search quantum algorithm to solve Boolean satisfiability problems, part 2[J]. Crossroads, 2019, 26(2): 68-71.
- [5] SANYAL B A, SAHA A, SAHA B, et al. Circuit design for clique problem and its implementation on quantum computer [J]. IET Quantum Communication, 2021, 3(1): 30-49.
- [6] SAHA A, CHONGDER A, MANDAL S B, et al. Synthesis of Vertex Coloring Problem Using Grover's Algorithm[C]//IEEE International Symposium on Nanoelectronic & Information Systems. IEEE, 2016.
- [7] SAHA A, SAHA D, CHAKRABARTI A. Circuit Design for K-coloring Problem and it's Implementation on Near-term Quantum Devices[C]//2020 IEEE International Symposium of Smart Electronic Systems(isEs), Chennai, India. 2020: 17-22.
- [8] HU S, LIU P, CHEN C, et al. Reduction-Based Problem Mapping for Quantum Computing [J]. Computer, 2019, 52(6): 47-57.
- [9] YANG M T. Algorithms on Graph Coloring Problem[J]. Journal of Physics: Conference series, 2020, 1634(1): 012053.
- [10] RYBALOV A N. On generic NP-completeness of the Boolean

- satisfiability problem[J]. *Prikladnaya Diskretnaya Matematika*, 2017(36):106-112.
- [11] LI G, DING Y, XIE Y. Tackling the Qubit Mapping Problem for NISQ-Era Quantum Devices[C]// the Twenty-Fourth International Conference. 2019.
- [12] SCHWABE P, WESTERBAAN B. Solving binary MQ with Grover's algorithm[J/OL]. <https://eprint.iacr.org/2019/151.pdf>.
- [13] SONG H C, LIU X N, WANG H, et al. Integer Decomposition Based on Grover search algorithm [J]. *Computer Science*, 2021, 48(4):20-25.
- [14] MAREK S, MAREK W. Recommendation systems with the quantum k-NN and Grover algorithms for data processing[J]. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 2019, 29(1):139-150.
- [15] YANG S Q, DENG Z Y, LI B. Improved Grover quantum search algorithm [J]. *Journal of Nanchang University(Science Edition)*, 2017, 41(6):581-584.
- [16] KAIN B. Searching a quantum database with Grover's search algorithm[J]. *American Journal of Physics*, 2021, 89(6):618-626.
- [17] MAGNIEZ F, SANTHA M, SZEGEDY M. Quantum Algorithms for the Triangle Problem[J]. *SIAM Journal on Computing*, 2007, 37(2):413-424.
- [18] SHARMA P C, CHAUDHARI N S. Investigation of Satisfiability Based Solution Approach for Graph Coloring Problem[J]. *International Journal of Engineering and Advanced Technology (IJEAT)*, 2016, 6(1):106-112.



LIU Xiaonan, born in 1977, Ph.D, associate professor, master's supervisor, is a member of China Computer Federation. His main research interests include quantum algorithm and high-performance parallel computation.



LIU Zhengyu, born in 1997, postgraduate, is a member of China Computer Federation. His main research interests include quantum algorithm and quantum machine learning.

(责任编辑:何杨)