

# 基于量子哈密顿下降的增广拉格朗日方法用于约束非凸非线性优化问题

Mingze Li<sup>1,2</sup>, *Student Member, IEEE*, Lei Fan<sup>1,2</sup>, *Senior Member, IEEE*, and Zhu Han<sup>1</sup> *Fellow, IEEE*  
*Dept. of Electrical and Computer Engineering<sup>1</sup> and Dept. of Engineering Technology<sup>2</sup>*  
*University of Houston, TX, USA*  
*Emails: mli44@cougarnet.uh.edu; lfan8@central.uh.edu; zhan2@central.uh.edu*

**摘要**—非线性规划 (NLP) 在电力能源系统、化学工程、通信网络和金融工程等领域中起着关键作用。然而，由于解空间的复杂性和非凸非线性约束的存在，解决大规模非凸 NLP 问题仍然是一个重大挑战。本文开发了一种基于量子哈密顿下降的增广拉格朗日方法 (QHD-ALM) 框架来解决大规模受约束的非凸 NLP 问题。增广拉格朗日方法 (ALM) 可以将一个有约束的 NLP 转换为无约束的 NLP，可以通过使用量子哈密顿下降 (QHD) 来进行求解。为了在经典机器上运行 QHD，我们建议使用模拟分岔算法作为引擎来模拟动态过程。我们将我们的算法应用于一种 Power-to-Hydrogen 系统，并且仿真结果验证了我们算法的有效性。

**Index Terms**—非线性规划，量子哈密顿下降，增广拉格朗日方法，模拟分岔，电制氢系统。

## I. 介绍

由于其广泛性和建模灵活性，非线性规划 (NLP) 已经成为跨多个应用领域的重要工具。在电力和能源系统中，它在最优潮流、机组承诺以及可再生能源整合中扮演着核心角色 [1]。各种求解器如 IPOPT、Gurobi 和 CPLEX 已被开发出来以解决特定的 NLP 问题实例。然而，这些经典算法只能确保非凸问题中的局部收敛性。在大规模非凸环境中保证可扩展性、鲁棒性和跳出局部极小值的能力仍面临许多挑战。

为了克服经典求解器在处理非凸和高维优化景观中的局限性，最近的研究转向了量子计算方法。一个有前景的方向是量子退火技术，它利用量子隧穿效应来逃离局部最小值并更有效地探索目标景观的全局结构 [2], [3]。量子退火器已被用于解决各种优化问题，包括离散和组合优化问题。将这一概念扩展到连续领域，提出了量子哈密顿下降 (QHD) 算法以求解有盒约束的连续非线性优化问题 [4], [5]。通过利用波函数演化和类似隧穿

的动力学等量子机制，QHD 在某些情况下可以优于经典求解器，特别是在传统梯度基方法容易陷入不良局部最小值的非凸问题上表现更佳。此外，哈密顿嵌入技术的最新进展显著增强了在近期量子设备上实现量子模拟的可能性 [6]。QHD 已被实现在名为量子哈密顿下降优化器 (QHDOPT) 的软件包中 [7]。该软件包可以与各种量子硬件后端进行交互以求解有盒约束的非线性非凸优化问题。QHDOPT 能够将原始问题编码为伊辛模型，然后通过量子退火机来求解。

尽管量子绝热过程具有理论优势，当前的量子硬件仍面临显著的实际限制。可用的量子位数量仍然有限，噪声、退相干以及缺乏完全可编程性制约了可以实际解决的问题的规模和复杂度。为了克服这些硬件障碍同时保留量子动力学的优势，研究人员提出了模仿量子行为的经典算法。一种方法是模拟分岔 (SB) 算法，它使用经典非线性振荡器网络 [8] 模拟哈密顿系统的绝热演化。SB 可以被视为一种哈密顿下降形式，捕捉了量子退火的关键特性——如由分岔驱动的向低能态过渡——而无需量子硬件。与经典模拟退火相比，SB 在大规模组合问题上表现出更好的性能，通过集体动力学有效探索复杂的能量景观。其内在并行结构和利用物理类比的能力使 SB 尤其适合集成到诸如 QHDOPT 的量子优化求解器中。

尽管 QHDOPT 非常适合解决无约束或箱形约束的非线性问题，但许多实际应用涉及更一般的等式或不等式约束，这些约束超出了这一范围。在本文中，我们将 QHDOPT 集成到增广拉格朗日方法 (ALM) 框架中。在 ALM 框架中，通过将拉格朗日乘子和惩罚项引入目标函数，将一个有约束的优化问题重新表述为箱形约束

问题。这使得可以通过间接方式强制执行原始约束，因为违反约束的情况会在优化过程中受到处罚。通过逐步更新拉格朗日乘子并增加惩罚参数，算法逐渐收敛到同时满足最优性和可行性的解。新提出的基于 QHD 的 ALM 框架能够处理更广泛的有约束非线性规划问题，同时保持利用量子启发动态进行全局优化的能力。

在第 II 节中，我们介绍了 NLP 问题的一般形式，并讨论了求解非凸大规模实例所面临的挑战。第 III 节引入了量子优化框架 QHDOPT，该框架将连续盒约束的 NLP 问题建模为量子动力学系统。第 IV 节结合了 SB 算法，这是一种经典启发式方法，使 QHDOPT 能够在经典机器上运行。在第 V 节中，我们介绍了 QHD-ALM 框架。在第 VI 节中，我们将提出的 QHD-ALM 应用于解决氢能生产管理问题。

## II. 非线性规划 (NLP) 介绍

非线性规划是一种数学优化框架，用于解决目标函数和约束涉及非线性关系的问题。与假设线性结构的线性规划不同，NLP 允许更灵活地表示实际工业系统。然而，非线性模型内在的复杂性通常会导致计算挑战，特别是在处理非凸性问题时，此时存在多个局部最优解，使得找到全局解变得困难。

一个一般的自然语言处理问题可以表述如下：

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad (1)$$

$$\text{s.t. } g_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i \in \mathcal{I}, \quad (2)$$

$$h_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j \in \mathcal{J}, \quad (3)$$

其中  $\mathbf{x}$  是一组连续决策变量， $f(\mathbf{x})$  是非线性目标函数，而  $g_i(\mathbf{x})$  和  $h_j(\mathbf{x})$  分别代表非线性等式和不等式约束。这些函数中的非线性可能来源于物理关系、效率曲线或系统中不同组件之间的相互作用。如果目标函数或约束是非凸的，则问题将变得显著难以求解，因为经典的优化技术不再保证能找到全局最优解。为了解决这些问题，需要先进的计算方法。量子算法，如 QHD，利用隧穿等量子力学特性来逃离局部最小值并探索更广泛的解空间。

鉴于传统求解器在处理大规模非凸 NLP 问题方面的局限性，本文介绍了一种旨在提升解决方案过程的高级算法框架。通过整合 QHD 和 ALM，我们希望提高解决具有非线性和非凸约束的 NLP 问题的效率和可靠性。

## III. QHDOPT 简介

QHDOPT 是一个开源的优化求解器，它实现了 QHD 来解决具有边界约束的连续 NLP 问题。QHD 背后的关键思想是将优化过程建模为受时间依赖哈密顿量支配的量子波函数演化。与依赖梯度搜索的传统优化方法不同，QHD 引入了一个动力系统，在该系统中动能和势能分量共同引导优化轨迹。这种量子表述使得 QHD 能够利用量子隧穿效应，提供了一种有效的方法来逃离高度非凸问题中的局部最小值 [4], [5], [7]。

QHDOPT 设计用于处理如下形式的优化问题 [7]：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \sum_{i=1}^n g_i(x_i) + \sum_{j=1}^m p_j(x_{k_j}) q_j(x_{\ell_j}), \quad (4)$$

受箱形约束条件限制：

$$L_i \leq x_i \leq U_i, \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (5)$$

这里，目标函数包含一元项  $g_i(x_i)$  和二元交互项  $p_j(x_{k_j}) q_j(x_{\ell_j})$ 。为了将目标函数编码到哈密顿量中，QHD 构造了如下形式的哈密顿量：

$$H(t) = e^{\varphi t} \left( -\frac{1}{2} \Delta \right) + e^{x t} f(x), \quad (6)$$

其中  $x$  表示优化变量， $\Delta$  表示拉普拉斯算子。时间相关的缩放因子  $e^{\varphi t}$  和  $e^{\lambda t}$  控制量子系统的总能量分布。这一机制使得 QHD 能够作为增强的量子优化过程运作，在避免陷入局部最小值的同时动态调整其探索与开发之间的平衡。

为了在离散时间域中实现 QHD，QHDOPT 应用空间离散化来表示连续波函数在  $\mathbb{R}^n$  中的有限网格。每个变量区域被离散化为  $N$  个网格点，并且差分算子如拉普拉斯算子使用有限差分方案进行近似。目标函数编码为作用于离散空间上的势能算子。所得的 QHD 哈密顿量是一个大型厄米特矩阵，它支配着有限维状态空间中的量子演化。

$$\hat{H}(t) = e^{\varphi t} \left( -\frac{1}{2} L_d \right) + e^{x t} F_d, \quad (7)$$

其中

$$L_d = \sum_{i=1}^n I \otimes \dots \otimes L \otimes D(g_i) \otimes \dots I,$$

$$F_d = \sum_{i=1}^n I \otimes \dots \otimes D(p_j) \otimes \sum_{j=1}^m I \otimes \dots \otimes D(q_j) \otimes \dots I. \quad (8)$$

这里,  $I$  是  $N$  维的单位算子,  $L$  和  $D(*)$  表示  $N$  维矩阵。

为了进一步加快该哈密顿量在量子硬件或经典模拟器上的仿真, QHDOPT 采用了将高维 QHD 哈密顿量转换为适合量子机器的伊辛型表示 [6] 的嵌入策略。

离散化的 QHD 哈密顿量是一个具有明确张量积分解结构的厄米特矩阵。这种结构使得可以应用哈密顿嵌入技术来构造一个代理哈密顿量。通过将每个离散化变量映射到二进制编码, 并将二进制变量转换为自旋变量  $s_i \in \{-1, 1\}$ , 代理哈密顿量可以被嵌入到伊辛模型中, 该模型可以通过量子求解器进行求解。

#### IV. 哈密顿量模拟中的模拟分岔算法在 QHDOPT 中的应用

在早期的 QHDOPT 实现中, 量子退火机被用于求解出现在 QHD 框架内的伊辛模型。然而, 当前的量子硬件仍受限于噪声、有限的量子位数量和缺乏容错性, 这给可扩展部署带来了实际挑战。为了克服这些限制同时保持基于哈密顿下降的量子启发式理念, 我们用模拟分岔 (SB) 算法替换了量子退火步骤——这是一个纯粹的替代方案。

SB 算法是一种受量子绝热演化启发但完全在经典框架中实现的启发式方法。它通过利用耦合杜芬振荡器网络及其分岔动力学高效地解决了伊辛模型问题。虽然量子退火依赖于隧穿效应来克服能量障碍, SB 则利用非线性振荡器的经典分岔机制穿越复杂的能量景观。这使得在现代经典硬件如 GPU 上能够进行高度并行和可扩展的执行。在 QHDOPT 中, 我们使用 SB 替代量子退火以高效地执行哈密顿下降, 同时保留了量子启发优化的优势并增强了计算访问性。

SB 将目标编码为非线性振荡器的哈密顿系统, 从对称初始状态演化到一个分岔状态, 该状态表示最优解。这种方法基于使用克尔非线性参量振荡器 (KPO) 的量子绝热优化, 其中伊辛模型中的每个二进制变量对应一个 KPO。SB 算法由简化哈密顿量控制:

$$H_q(t) = \hbar \sum_{i=1}^N \left[ \frac{K}{2} a_i^\dagger a_i^2 - \frac{p(t)}{2} (a_i^\dagger + a_i) + \Delta_i a_i^\dagger a_i \right] - \hbar \xi_0 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N I_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad (9)$$

其中  $\hbar$  是约化普朗克常数,  $a_i^\dagger$  和  $a_i$  分别是第  $i$  个振荡器的产生和湮灭算符,  $K$  是 Kerr 系数,  $\Delta_i$  是失谐量,

$p(t)$  是时间依赖的泵浦幅度, 而  $\xi_0$  控制通过 Ising 相互作用矩阵  $I_{ij}$  介导的振荡器间的耦合强度。

随着系统演化, 振幅  $p(t)$  从零缓慢增加, 每个 KPO 从真空态过渡到具有正或负振幅的相干态。根据量子绝热定理, 系统保持在其瞬时基态, 最终相干振幅的符号编码了伊辛自旋。这一机制为解决伊辛问题提供了量子动力学途径。

为了在经典硬件上实现这一点, 通过用连续值的期望变量替换量子算子来进行经典近似。具体来说, 每个算子  $a_i$  被复振幅  $x_i + iy_i$  近似, 其中  $x_i$  和  $y_i$  被解释为规范位置和动量变量。这导致了在 SB 算法中使用的经典力学哈密顿量。通过这种近似, SB 方法保留了量子启发的分岔动力学, 同时能够在经典架构上进行高效的模拟。

SB 算法演化了一组由以下简化哈密顿量控制的耦合振荡器系统:

$$H_{SB}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \sum_{i=1}^N \frac{\Delta}{2} y_i^2 + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{K}{4} x_i^4 + \frac{\Delta - p(t)}{2} x_i^2 \right] - \frac{\xi_0}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N I_{ij} x_i x_j, \quad (10)$$

其中,  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{y}$  分别表示位置变量和动量变量。矩阵  $I$  编码了特定问题的相互作用, 而  $p(t)$  是一个在模拟过程中增加的分叉驱动参数。所有失谐都被假定为相同的值  $\Delta$ 。系统根据哈密顿方程 [8] 演化:

$$\dot{x}_i = \Delta y_i, \quad (11)$$

$$\dot{y}_i = - \left[ K x_i^3 - (p(t) - \Delta) x_i + \xi_0 \sum_{j=1}^N I_{ij} x_j \right]. \quad (12)$$

这些方程使用显式辛欧拉方法进行数值积分, 这确保了数值稳定性并允许较大的时间步长。所有振荡器状态初始化为接近零, 并且当  $p(t)$  增加时, 系统经历分岔。在最终时间步长处, 自旋配置由每个振荡器位置的符号决定。

SB 算法高效地探索多个最小值并摆脱较差的局部最优。其简单性使得计算速度加快, 并且可以通过其结构实现并行化。通过用 SB 替换量子退火, QHDOPT 获得了可扩展性、稳定性和灵活性, 能够解决当前量子设备难以处理的大规模非线性优化问题。

## V. QHD 与增广拉格朗日方法的集成

在本节中，我们将介绍如何将 QHDOPT 集成到 ALM 框架中。

### A. ALM 的一般公式化

我们考虑一个既有等式约束又有不等式约束的一般 NLP 问题，以标准形式写成如 (1)，(2) 和 (3) 所示。为了处理不等式约束，我们引入非负松弛变量  $s_j \geq 0$ 。这将原问题重新公式化为一个仅有等式约束的问题，其中所有不等式约束都被重写为

$$g_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{I}, \quad (13)$$

$$h_j(x) + s_j = 0, \quad s_j \geq 0, \quad j \in \mathcal{J}. \quad (14)$$

增广拉格朗日函数定义为：

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_A(x, s, \lambda, \mu, \rho) = & f(x) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i g_i(x) + \sum_{j \in \mathcal{J}} \mu_j (h_j(x) + s_j) \\ & + \sum_{i \in \mathcal{I}} \frac{\rho_i}{2} g_i(x)^2 + \sum_{j \in \mathcal{J}} \frac{\rho_j}{2} (h_j(x) + s_j)^2, \end{aligned} \quad (15)$$

其中  $\lambda_i$  和  $\mu_j$  分别是等式约束和变换后的不等式约束的拉格朗日乘子，而  $\rho_i, \rho_j > 0$  是惩罚参数。

ALM 算法通过求解一系列无约束问题来进行：

$$(x^{(k)}, s^{(k)}) = \arg \min_{x, s} \mathcal{L}_A(x, s, \lambda^{(k)}, \mu^{(k)}, \rho^{(k)}),$$

然后在每次迭代后使用 [9] 更新乘子：

$$\lambda_i^{(k+1)} = \lambda_i^{(k)} + \rho_i^{(k)} g_i(x^{(k)}), \quad i \in \mathcal{I}, \quad (16)$$

$$\mu_j^{(k+1)} = \mu_j^{(k)} + \rho_j^{(k)} (h_j(x^{(k)}) + s_j^{(k)}), \quad j \in \mathcal{J}. \quad (17)$$

惩罚参数  $\rho^{(k)}$  在迭代过程中可选地增加以提高收敛性。

此框架使得可以使用带约束或无约束的求解器，如 QHDOPT 或 IPOPT，有效地解决重新形式化的问题。特别是对于高度非线性或非凸问题，在 ALM 框架中使用 QHD 可以提高收敛性和解决方案质量，同时保持原始约束的有效性。

### B. 使用 QHD-ALM 的优势

图 1 和算法 1 描述了 QHD-ALM 框架。为了与量子求解器兼容，该方法首先初始化拉格朗日乘子和惩罚参数，准备将问题转换为通过 ALM 的盒约束形式。这个盒约束模型然后传递给 QHDOPT 求解器，它生成一个

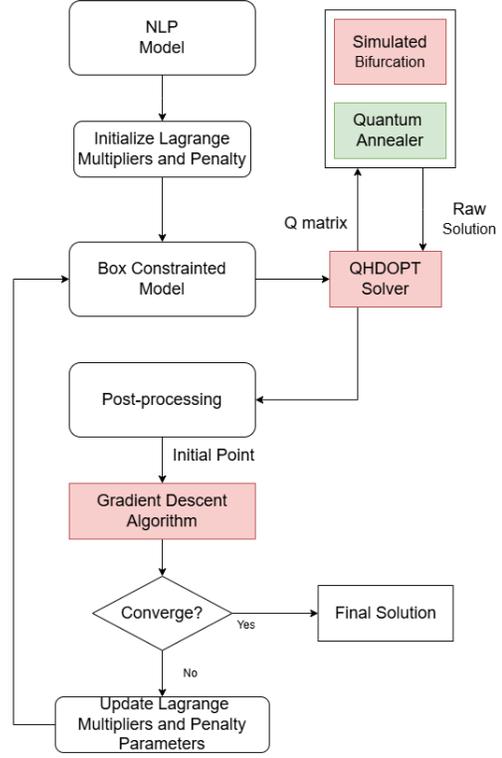


图 1. QHD-ALM 方法的流程图

系数矩阵表示离散化的优化景观。为了求解这种二进制编码的表示，QHDOPT 可以与量子退火机或经典算法（如模拟分支方法）进行接口操作。这些求解器返回原始候选解决方案，然后在后处理步骤中进一步精炼以提高可行性并提取一个适合的初始点用于进一步的局部优化。这个初始点被用来预热一个经典的求解器，比如 IPOPT，在原始约束问题上执行精细的数值优化。如果解决方案尚未收敛到可接受的阈值，则该框架更新拉格朗日乘子和惩罚参数，并重复此过程进行迭代。这种混合循环持续直到满足收敛标准，此时返回高质量最终解决方案。

## VI. 案例研究

在本节中，我们将提出的 QHD-ALM 应用于解决氢气生产问题。

### A. 数学模型

优化问题的目标是最小化氢气生产的运营成本。在目标函数 (18a) 中，规划期间的总电费被惩罚，而最终

---

**Algorithm 1** QHD-ALM 框架

---

- 1: **输入:** 带约束的非线性规划模型
  - 2: **步骤 1: 初始化**
  - 3: 设置初始拉格朗日乘子  $\lambda^{(0)}, \mu^{(0)}$  和惩罚项  $\rho^{(0)}$
  - 4: 设置迭代计数器  $k = 0$
  - 5: **repeat**
  - 6:   **步骤 2: 箱约束模型重新制定**
  - 7:   构建增广拉格朗日函数 (15)
  - 8:   **步骤 3: 用 QHDOPT 求解**
  - 9:   从盒约束模型中构建 Q 矩阵
  - 10:   使用 QHDOPT 结合模拟分歧或量子退火器获得原始解
  - 11:   **步骤 4: 后处理**
  - 12:   将原始解映射到原可行空间
  - 13:   作为初始点使用
  - 14:   **步骤 5: 使用梯度下降算法进行优化**
  - 15:   使用梯度下降算法从初始点求解无约束 NLP 问题
  - 16:   **步骤 6: 检查收敛性**
  - 17:   **if** convergence criterion is met **then**
  - 18:     **输出:** 最终解
  - 19:     **断裂**
  - 20:   **else**
  - 21:     **步骤 7: 更新参数**
  - 22:     更新  $\lambda^{(k+1)}, \mu^{(k+1)}$
  - 23:     增加惩罚项  $\rho^{(k+1)} = \gamma\rho^{(k)}$ , 其中  $\gamma > 1$
  - 24:      $k \leftarrow k + 1$
  - 25:   **end if**
  - 26: **until** convergence is achieved
- 

气的市场价值,  $C_t^{\text{power}}$  表示时间步长  $t$  的电价。

$$\max C^{\text{hyo}}(s_N - s_0) - \sum_{t=0}^{N-1} C_t^{\text{power}} p_t^{\text{buy}}, \quad (18a)$$

$$\text{s.t. } p_t^{\text{buy}} + p_t^{\text{R}} = m^{\text{AC}} p_t^{\text{el}} + k^{\text{AC}}, \quad (18b)$$

$$s_{t+1} = s_t + s_t^{\text{el}} - s_t^{\text{d}}, \quad (18c)$$

$$S^{\text{min}} \leq s_t \leq S^{\text{max}}, \quad (18d)$$

$$0 \leq p_t^{\text{el}} \leq P^{\text{max}}, \quad (18e)$$

$$p_t^{\text{buy}} \geq 0, \quad (18f)$$

$$s_t^{\text{el}} = \Delta t \cdot \frac{p_t^{\text{el}}}{HHV_{H_2}} \cdot \lambda_{el}, \quad s_t^{\text{el}} \geq 0. \quad (18g)$$

约束条件 (18b) 捕捉了电解槽的功率平衡, 其中功率需求由电网电源  $p_t^{\text{buy}}$  和可再生能源  $p_t^{\text{R}}$  满足。系数  $m^{\text{AC}}$  和  $k^{\text{AC}}$  是反映损耗或辅助负载的线性转换参数。存储动态在 (18c) 中确保氢气存储水平  $s_t$  根据生产和消耗  $s_t^{\text{el}}$  和  $s_t^{\text{d}}$  演变。约束条件 (18d) 和 (18e) 分别对存储和电解槽功率容量施加上限和下限。约束条件 (18g) 将产生的氢能量  $s_t^{\text{el}}$  与电解槽的输入功率  $p_t^{\text{el}}$  相关联, 该关系通过氢的高发热值  $HHV_{H_2}$ 、时间持续  $\Delta t$  和电解槽效率  $\lambda_{el}$  进行缩放。

效率  $\lambda_{el}$  是一个关键的非线性因素, 受到电解槽的操作点 (如输入功率和温度) 的影响。虽然 (18g) 为了简化使用了一个通用的固定效率, 但随后的部分将开发一个包含非线性特性的详细模型动态效率模型。这个改进的模型通过捕捉  $\lambda_{el}$  随关键物理和操作参数的变化来提高保真度, 从而增强整体优化框架的准确性和现实感。

我们已经调查了功率与效率之间的关系, 展示了在不同运行条件下的性能特征。我们进行了曲线拟合, 并获得了拟合后的电压和电流 [10]:

$$\bar{I}_{cell} = i_1 - i_2 \cdot \exp(i_3 \cdot p_t^{\text{el}}) + i_4 \cdot p_t^{\text{el}}, \quad (19)$$

$$\bar{U}_{cell} = u_1 + u_2 p_t^{\text{el}} - u_3 (p_t^{\text{el}})^2 + u_4 (p_t^{\text{el}})^3 - u_5 (p_t^{\text{el}})^4. \quad (20)$$

然后将效率建模为:

$$\lambda_{el} \leq m_1 + m_2 \cdot P^{\text{max}} + m_3 \cdot \exp(m_4 \cdot (100 \cdot p_t^{\text{el}} / P^{\text{max}})), \quad (21)$$

$$\lambda_{el} \leq \left( n_1 + n_2 \cdot \exp\left(\frac{n_3 + n_4 T + n_5 T^2}{\bar{I}_{cell}}\right) \right) / \bar{U}_{cell}, \quad (22)$$

时间步长存储的氢气价值则得到奖励。这里,  $C^{\text{hyo}}$  是氢

其中  $i, u, m, n, T$  是动态效率函数的参数。

为使用有界约束求解器解决非线性约束氢调度问题，我们采用 ALM 方法。ALM 结合了拉格朗日乘子和惩罚项，这些惩罚项会因违反约束而进行处罚，从而使该问题可以被视为无约束优化任务。这种方法的关键优势在于它允许我们将有界约束求解器应用于复杂的受约束优化问题，通常这种求解器更高效且广泛可用。

在我们的案例中，我们处理的是一个非线性约束氢气调度问题，其中涉及非线性和多个约束。为了应用有界约束求解器，我们需要将这些约束转换为惩罚项，这就是 QHD 算法发挥作用的地方。QHD 算法专门设计用于解决有界约束的非凸问题，因此它是我们问题的一个合适选择。然而，要有效地应用 QHD，我们必须首先通过将原始约束转化为惩罚项来重新制定问题。

令  $x = \{p_t^{el}, p_t^{buy}, s_t, \lambda_t\}_{t=0}^N$  表示决策变量。我们在标准 NLP 格式下定义以下约束：

$$g_{1,t}(x) = s_{t+1} - s_t - \frac{\Delta t}{HHV_{H_2}} p_t^{el} \cdot \frac{\lambda_t}{100} + s_t^d. \quad (23)$$

$$h_{1,t}(x) = \lambda_t - \frac{n_1 + n_2 \cdot \exp\left(\frac{n_3 + n_4 T + n_5 T^2}{I_{cell}}\right)}{\bar{U}_{cell}}, \quad (24)$$

$$h_{2,t}(x) = \lambda_t - \left( m_1 + m_2 P^{\max} + m_3 \exp\left( m_4 \cdot \frac{100 p_t^{el}}{P^{\max}} \right) \right). \quad (25)$$

为了将  $h_i(x) \leq 0$  转换为等式，我们引入松弛变量  $sl_{i,t} \geq 0$ 。结果得到的增广拉格朗日函数变为：

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_A = & -C^{\text{hyo}}(e_N - e_0) + \sum_{t=0}^{N-1} C_t^{\text{power}} p_t^{\text{buy}} \\ & + \sum_{t=0}^{N-1} \lambda_{1,t} g_{1,t}(x) + \frac{\rho_1}{2} g_{1,t}(x)^2 \\ & + \sum_{t=0}^{N-1} \mu_t (h_{1,t}(x) + sl_{1,t}) + \frac{\rho_2}{2} (h_{1,t}(x) + sl_{1,t})^2 \\ & + \sum_{t=0}^{N-1} \mu_t (h_{2,t}(x) + sl_{2,t}) + \frac{\rho_3}{2} (h_{2,t}(x) + sl_{2,t})^2, \end{aligned} \quad (26)$$

其中目标函数包括氢气生产成本、电力购买成本以及约束条件的惩罚项。优化问题受以下边界限制：

$$\begin{aligned} 0 \leq p_t^{el} \leq P^{\max}, S^{\min} \leq s_t \leq S^{\max}, p_t^{\text{buy}} \geq 0, \\ 0 \leq \lambda_t \leq 100, sl_{i,t} \geq 0. \end{aligned} \quad (27)$$

此公式可以通过 QHDOPT 求解，QHDOPT 适合解决非线性、非凸优化问题，并利用量子优化优势，如增强探索复杂解决方案空间的能力。

## B. 仿真结果

在案例研究中，我们评估了四种优化方法，这些方法适用于不同规模的问题实例，分别对应 6、24、168 和 720 个时间槽。这些情况反映了问题维度和计算复杂度的增加。比较的方法包括：(1) 纯 IPOPT，从单个随机初始点求解问题；(2) 带有多个初始点的 IPOPT，其中从 1,000 个随机初始化中选择最佳解决方案；(3) 经典的增广拉格朗日方法；以及 (4) 我们提出的 QHD-ALM 算法。对于每种情况，我们都比较了达到的目标值和所需的计算时间，强调了解的质量和效率。

表 I  
不同方法的最优目标值

Case	Pure-IPOPT (\$)	IPOPT 1k 样本 (\$)\$	ALM (\$)	QHD-ALM (\$)
1	6.42	892.06	6.42	893.8
2	6.33	2312.92	6.33	2333.4
3	-760.23	14153.52	10124.05	13877
4	3040.31	19368.54	17423.74	18840.1

表 II  
不同方法的计算时间

Case	Pure-IPOPT	IPOPT 1k 样本	ALM	QHD-ALM
1	0.089s	73s	1.31s	6.82s
2	0.289s	257s	3.18s	11.28s
3	1.767s	16 min	61.1s	78.2s
4	3.184s	52 min	351.58s	369.38s

表 I 说明了不同方法在各种问题规模下获得的目标值。如所示，IPOPT 求解器经常难以应对非凸性，从单个随机点初始化时经常会收敛到较差的局部最小值。尽管通过不同的初始化运行 IPOPT 1,000 次可以提高解决方案的质量，但这种暴力方法计算密集且低效。

表 II 比较了四种优化方法在增加问题规模时的总运行时间。如预期，纯 IPOPT 最快，因为它仅从一个随机起点执行单次局部搜索。然而，为了可靠地找到非凸问题的高质量解决方案，IPOPT 必须多次以不同的初始化执行——导致显著更高的总计算时间。相比之下，QHD-ALM 在计算成本远低于 1,000 次重启的 IPOPT 的情况下，实现了相当或更好的目标值，提供了更具时间效率的全局探索策略。

## VII. 结论

本文提出了一种名为 QHD-ALM 的新型混合优化框架，该框架将 QHD 集成到了 ALM 中。所提出的算法改进了经典 ALM 框架的收敛性。我们的算法应用于氢气生产管理中的应用验证了其效率和最优性。

## 参考文献

- [1] M. Li, W. Ren, L. Fan, and Y. Guan, "A preprocessing method for security-constrained unit commitment with AC power flows," in *2025 IEEE Texas Power and Energy Conference (TPEC)*, College Station, TX, USA, Feb. 2025, pp. 1–5.
- [2] M. Li, S. Wang, L. Fan, and Z. Han, "Quantum assisted combinatorial Benders' algorithm for the synergy of hydrogen and power distribution systems with mobile storage," *IEEE Transactions on Power Systems*, pp. 1–12, Jan. 2025.
- [3] Z. Zhao, L. Fan, and Z. Han, "Hybrid quantum Benders' Decomposition for mixed-integer linear programming," in *IEEE Wireless Communications and Networking Conference (WCNC)*, Austin, TX, Apr. 2022, pp. 2536–2540.
- [4] J. Leng, E. Hickman, J. Li, and X. Wu, "Quantum Hamiltonian descent," 2023. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2303.01471>
- [5] J. Leng, Y. Zheng, Z. Jia, L. Fan, C. Zhao, Y. Peng, and X. Wu, "Quantum Hamiltonian descent for non-smooth optimization," 2025. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2503.15878>
- [6] J. Leng, J. Li, Y. Peng, and X. Wu, "Expanding Hardware-Efficiently manipulable Hilbert space via Hamiltonian embedding," Jan. 2024. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/2401.08550>
- [7] S. Kushnir, J. Leng, Y. Peng, L. Fan, and X. Wu, "QHDOPT: A software for nonlinear optimization with quantum Hamiltonian descent," *INFORMS Journal on Computing*, vol. 37, no. 1, pp. 107–124, Nov. 2024.
- [8] H. Goto, K. Tatsumura, and A. R. Dixon, "Combinatorial optimization by simulating adiabatic bifurcations in nonlinear Hamiltonian systems," *Science Advances*, vol. 5, no. 4, p. eaav2372, Apr. 2019.
- [9] M. V. Afonso, J. M. Bioucas-Dias, and M. A. T. Figueiredo, "An augmented Lagrangian approach to the constrained optimization formulation of imaging inverse problems," *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 20, no. 3, pp. 681–695, Sep. 2011.
- [10] M. Li, S. Wang, L. Fan, and Z. Han, "Integrated quantum Hamiltonian descent with interior point method for optimal schedule of hybrid electricity-to-hydrogen system," in *2025 IEEE Kansas Power and Energy Conference (KPEC)*, Apr. 2025, pp. 1–5.