



本源量禹

用户手册

目录

1. 使用指南.....	1
1.1 用户界面.....	1
1.2 软件功能.....	1
2. 计算示例.....	6
2.1 方腔驱动.....	6
2.2 圆柱绕流.....	8
3. CFD 计算理论.....	12
3.1 控制方程.....	12
3.2 边界条件.....	13
3.3 数值方法.....	14
4. 量子算法理论.....	18
4.1 HHL 算法.....	18
4.2 量子随机存储器 (QRAM)	20
4.3 Tomography 算法.....	20
5. 矩阵预处理.....	21
5.1 对角优化.....	21
5.2 稀疏近似逆.....	22
6. 软件整体计算框架.....	23

1. 使用指南

1.1 用户界面

QCFD 软件用户界面主要分为六个区域，各区域的划分见图 1.1；

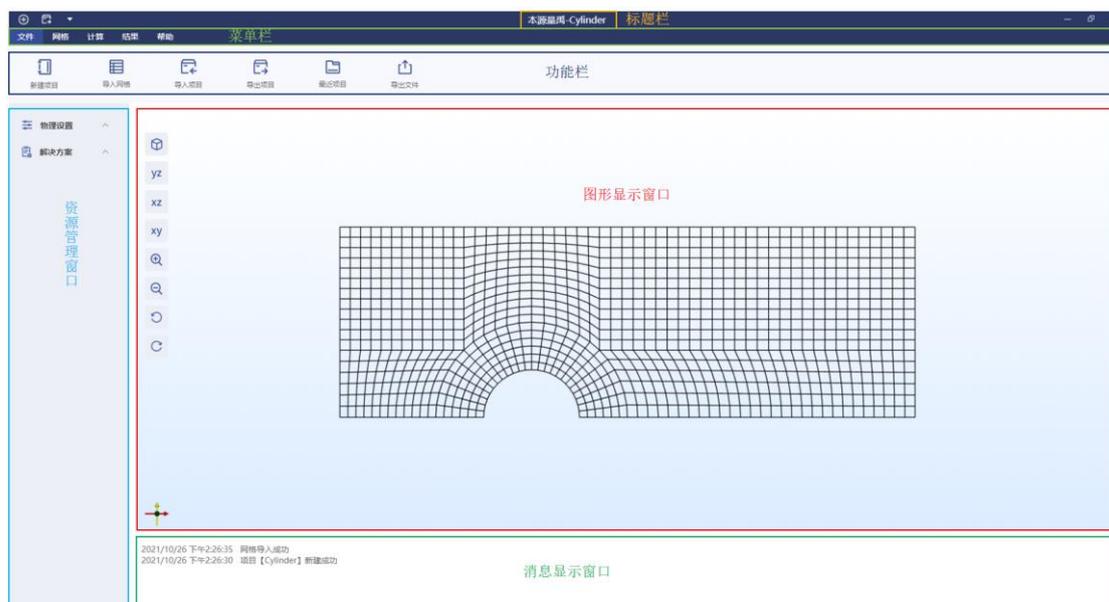


图 1.1 软件用户界面

- 1) 标题栏：显示模拟文件的名称
- 2) 菜单栏：提供 QCFD 软件的功能入口
- 3) 功能栏：展示菜单栏中每个模块的功能
- 4) 资源管理窗口：设置数值求解参数，并执行计算
- 5) 图形显示窗口：显示网格模型、残差图和标量图
- 6) 信息输出窗口：输出文件创建、网格导入、数值求解过程中的日志信息，并可在该窗口获取上述操作过程中发生的异常信息。

1.2 软件功能

该部分内容将详细介绍菜单栏和资源管理窗口提供的功能，旨在让用户详细完备地了解 QCFD 软件的功能。

1.2.1 菜单栏

菜单栏包括文件、网格、计算、结果、帮助，共五个部分，点击各菜单栏按

钮，会在功能区显示各模块功能，下面将对菜单栏中的每个模块进行介绍；

➤ “文件” 模块



- 1) **新建项目**：点击新建项目后，需要在出现的弹窗中指定文件名和文件的存储路径。
- 2) **导入网格**：点击导入网格后，需要在出现的弹框中交互选择待计算的网格文件，若重复导入网格，系统会覆盖原来的网格；目前，QCFD 支持的网格格式有 .su2 和 .msh 两种，其中 .msh 的数据结构需和 GMSH 软件生成的一致，建议使用 GMSH 生成 .msh 网格。
- 3) **导入项目**：加载已有的模拟文件。
- 4) **导出项目**：QCFD 默认不保存计算数据；需用户执行导出项目操作，以保存模拟文件，文件后缀为 .qcfd。
- 5) **最近项目**：加载最近使用的模拟文件。
- 6) **导出文件**：导出网格和计算数据(.vtk)，可以在 paraview 中处理计算数据。

➤ “网格” 模块



- 1) **网格生成**：主要分为结构网格和非结构网格两部分，目前仅支持简单结构网格的生成，后期将开放非结构网格功能。结构网格包含点和边两部分，用户可以通过输入点的坐标或者利用鼠标在界面内进行拖动来指定点的位置，以及通过给定每条边的分段数量来指定网格尺寸；在网格拓扑确定之后，用户可以对各边界进行命名，也可以对边界上的每个网格边进行单独命名；用户在给边界命名时，需要先选择边界，后输入名称，默认边界名称为 “boundary1/2/3/4”。待所有的设置好之后，点击 “确定构建”，即可生成网格。

- 2) **网格检查**: 检查网格质量, 并在信息输出窗口显示网格质量信息; 目前, QCFD 仅提供 Skewness 的检查, 其定义如下:

$$Skewness = \max \left[\frac{\theta_{\max} - \theta_e}{180 - \theta_e}, \frac{\theta_e - \theta_{\min}}{\theta_e} \right] \quad (1.1)$$

式(1.1)中, θ_{\max} 、 θ_e 、 θ_{\min} 分别为最大夹角、等角、最小夹角;

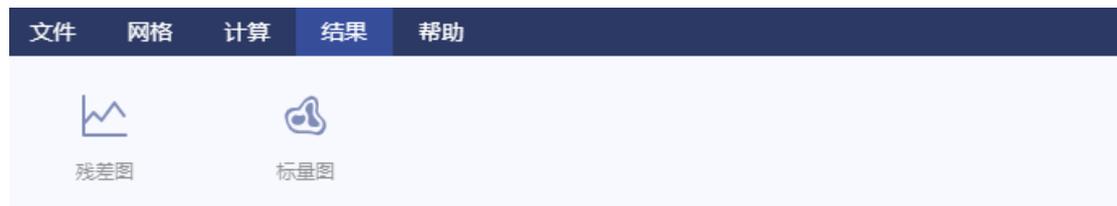
- 3) **网格显示**: 用于显示网格窗口。

➤ “计算” 模块



- 1) **计算**: 控制计算停止标准;
- 2) **计算后端**: 本地版是使用本地的经典计算机模拟量子计算机进行计算; 集群版是使用服务器进行模拟计算, 将在后期提供;
- 3) **真实量子计算机**: 使用超导量子芯片计算, 将在后期提供;

➤ “结果” 模块



- 1) **残差图**: 实时显示残差收敛曲线;
- 2) **标量图**: 显示计算后的流场分布;

1.2.2 资源管理窗口

资源管理窗口包括物理设置和解决方案两部分, 前者用于设置物理模型, 后者用于设置数值方法;

➤ 物理设置

- 1) **基础**: 该选项卡中的稳态和瞬态参数分别对应着流动的定常和非定常特性, 当选择瞬态时, 需要给定时间步长和内迭代步数; QCFD 默认不考虑重力场的影响, 若需要考虑重力, 可选择重力选项下的开启按钮。

- 2) **模型**: 粘性模型中的无粘选项表示忽略流体的粘性, 层流表示粘性流体的流动状态;



- 3) **介质**: QCFD 提供的流体介质包括水和空气, 并且支持自定义介质;

- 4) **相域**: 选择介质类型



- 5) **边界**: 该选项卡用于指定边界条件, QCFD 提供的边界条件见 3.2。

➤ 解决方案

- 1) **数值方法**: 用于设置控制方程中的空间梯度项和对流项的离散格式; 指定量子线性求解器的类型以及预处理器的类型。



- 2) **控制参数**: QCFD 支持动态控制非定常计算的时间步长, 以满足 CFL 数的要求。
- 3) **计算**: QCFD 控制计算进程的参数包括收敛误差和最大计算步数, 当残差或者计算步数达到给定的参数要求时, 计算终止。



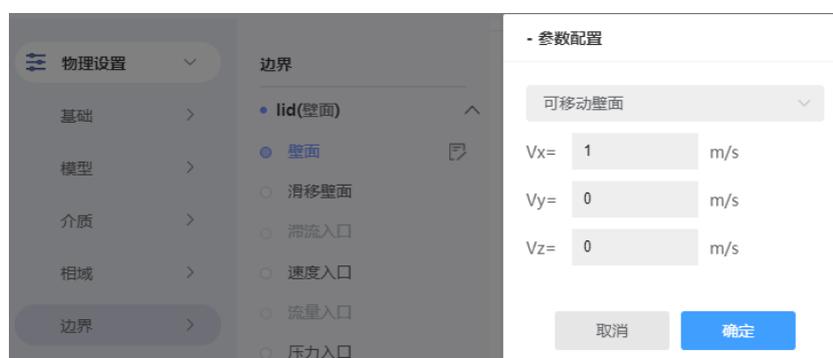
2. 计算示例

2.1 方腔驱动

1) 网格模型:

此示例计算几何尺寸为 $1m \times 1m$ 的二维方腔流动，采用的网格数量为 15×15 ，具有 lid 和 wall 两个边界，相应的边界条件分别设置如下：

lid: 壁面 \rightarrow 可移动壁面，移动速度为 $(1\ 0\ 0)m/s$



wall: 壁面 \rightarrow NONE

2) 物理设置

此示例仅求解稳态条件下的动量方程和连续性方程，不考虑重力影响；采用的流体介质为液体，将其密度和粘性系数分别为 $10\text{ kg}/m^3$ 和 $0.1\text{ Pa}\cdot\text{s}$ ，此条件下的雷诺数为 100，选择层流粘性模型：





3) 解决方案

QCFD 默认采用 EULER_EXPLICIT 时间格式；空间梯度项和对流项分别采用 GREEN_GAUSS 和 FDS 格式；量子线性求解器采用 FOM-HHL，子空间维度为 16，预处理器采用 DIAGNOAL_SCALING。



4) 计算结果

在同样的网格和配置参数下，分别采用了经典求解器和量子求解器对方腔驱动问题进行了计算；得到量子 and 经典计算的流线和速度云图，见图 2.1 和图 2.2；

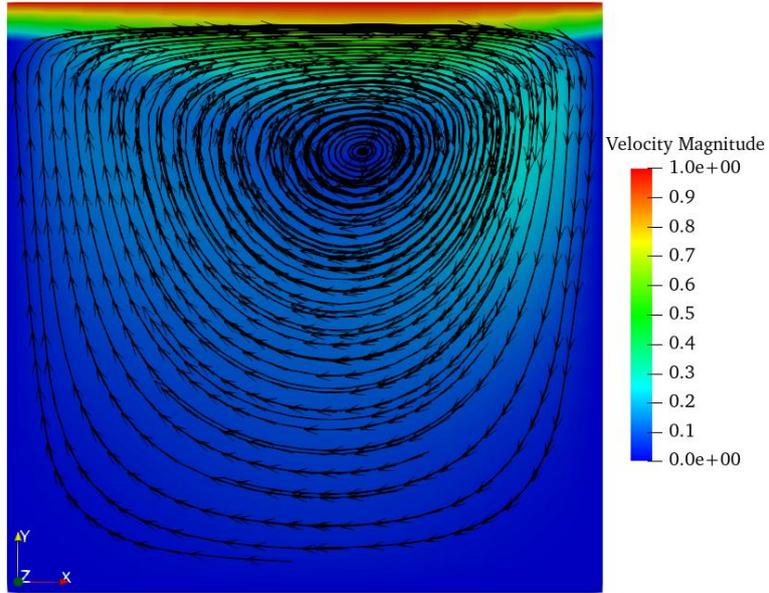


图 2.1 量子计算结果

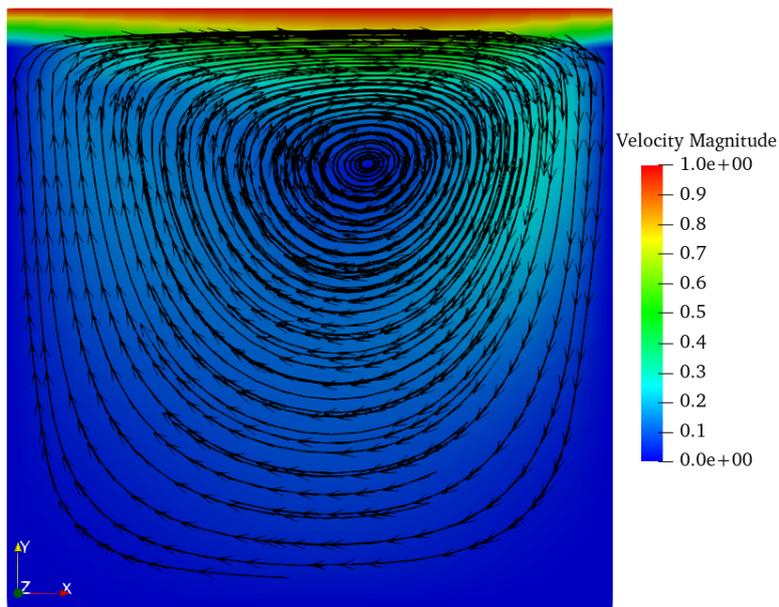


图 2.2 经典计算结果

2.2 圆柱绕流

圆柱绕流作为经典的流体力学问题，具有丰富的实验结果，常用于验证计算方法和模型的有效性；此外，圆柱绕流的研究对航空领域和海洋工程也具有非常重要的实际意义。考虑到本地虚拟机的限制，此算仅模拟二维空间内的半圆柱绕流问题，圆柱直径为 1m；

- 1) 网格模型：

采用网格的单元数为 1008，有 left、right、up、down、cylinder 五个边界，其对应的边界条件分别设置为：

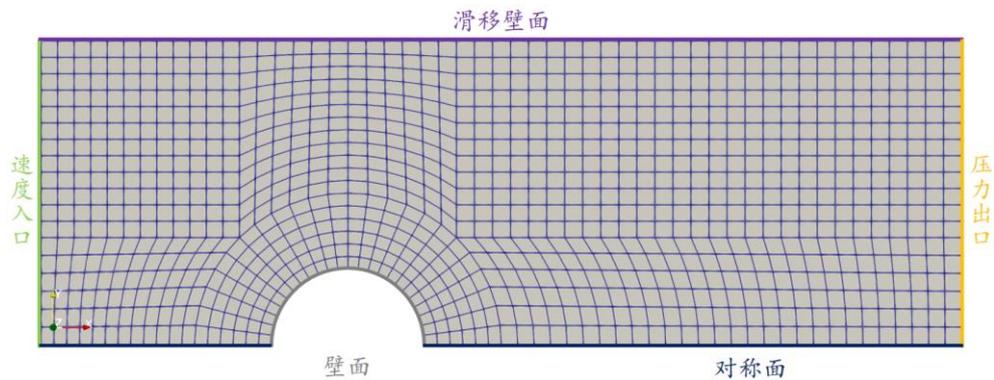
left: 速度入口，入口速度设置(1,0,0)

right: 压力出口，出口压力为 0 Pa

up: 滑移壁面

down: 对称面

cylinder: 壁面→NONE



2) 物理设置

此示例仅求解稳态条件下的动量方程和连续性方程，不考虑重力影响；采用的流体介质为液体，将其密度和粘性系数分别修改为 10 kg/m^3 和 $0.1 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ，此条件下的来流雷诺数为 100，选择层流粘性模型；





3) 解决方案

QCFD 默认采用 EULER_EXPLICIT 时间格式；空间梯度项和对流项分别采用 GREEN_GAUSS 和 JST 格式；量子线性求解器采用 FOM-HHL，子空间维度为 32，预处理器采用 DIAGNOAL_SCALING。



4) 计算结果

本实例在同样的网格和配置参数下，分别采用了经典求解器和量子求解器对半圆柱的绕流问题进行了计算；为便于分析对比，将两者的计算结果云图对称放置，上半部分和下半部分分别对应着量子求解器和经典求解器的计算结果，具体见图 2.3 和图 2.4；

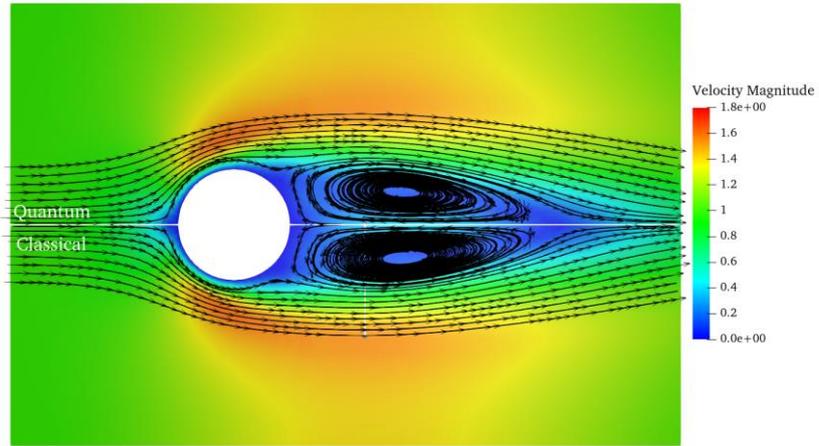


图 2.3 流线和速度云图

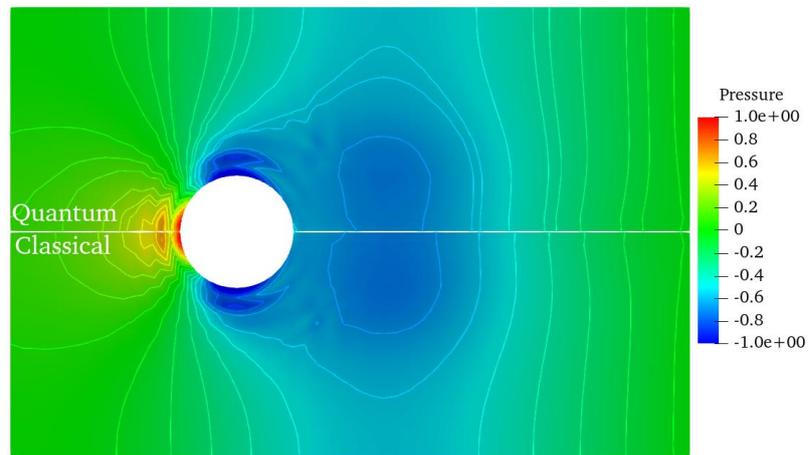


图 2.4 等值线和压力云图

3. CFD 计算理论

3.1 控制方程

欧拉描述下的守恒型控制方程^[1]为:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E(U)}{\partial x} + \frac{\partial F(U)}{\partial y} + \frac{\partial G(U)}{\partial z} = \frac{\partial E_v(U)}{\partial x} + \frac{\partial F_v(U)}{\partial y} + \frac{\partial G_v(U)}{\partial z} \quad (3.1)$$

式(3.1)中 U 为守恒性变量, E 、 F 、 G 为无粘通量, E_v 、 F_v 、 G_v 为粘性通量, 具体表达式如下:

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

其中, ρ 、 ρu_i 、 ρE 分别表示质量密度、动量密度和能量密度。

$$E(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix} \quad F(U) = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix} \quad G(U) = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ (\rho E + p)w \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

式(3.3)中 $E = (e + \frac{V^2}{2})$; e 为单位质量内能, $V^2 = u^2 + v^2 + w^2$ 。

$$E_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ k \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{i=1}^{i=3} u_i \tau_{xi} \end{bmatrix} \quad F_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ k \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{i=1}^{i=3} u_i \tau_{yi} \end{bmatrix} \quad G_v(U) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ k \frac{\partial T}{\partial z} + \sum_{i=1}^{i=3} u_i \tau_{zi} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

式(3.4)中, τ_{ij} 为粘性剪切应力, 其具体表达式为:

$$\tau_u = \begin{cases} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), & i \neq j \\ \mu \left(2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \operatorname{div} V \right), & i = j \end{cases} \quad (3.5)$$

对于完全气体，状态方程可表示为：

$$p = \rho RT \quad (3.6)$$

进一步可将能量密度 E 表示为：

$$\rho E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho V^2 \quad (3.7)$$

除 ρ 、 ρu 、 ρv 、 ρw 和 ρE 作为基本的流动变量外，压力 P 由式(3.7)得到，温度 T 由状态方程(3.6)得到，粘性系数 μ 和热传导系数 k 可以根据温度近似得到，因此上述方程组满足封闭条件。对于气体介质的粘性系数，QCFD 软件提供了常粘性系数和 Sutherland 模型两种选择；Sutherland^[2]模型给出了温度和粘性系数之间的关系，具体如下：

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^{3/2} \frac{T_{\text{ref}} + S}{T + S} \quad (3.8)$$

其中， T_{ref} 为参考温度； μ_{ref} 为参考温度下的粘性系数； S 为 Sutherland 温度；

3.2 边界条件

QCFD 提供了涵盖多种实际流动情况的一系列边界条件，依次介绍如下：

3.2.1 速度入口

速度入口条件适用于不可压缩流动问题，要求给定入口速度和其他标量参数。

3.2.2 流量入口

流量入口条件同时适用于可压缩流动和不可压缩流动问题，要求给定入口质量流量和其他标量参数。

3.2.3 压力入口

压力入口边界条件同时适用于可压缩流动和不可压缩流动问题，要求给定入口压力和其他标量参数。对于入口速度、质量流量未知或非物理自由入口情况，

推荐使用压力入口边界条件计算。

3.2.4 滞流入口

滞流入口边界条件适用于不可压缩和可压缩流动，需要给定总温、总压和流动方向。

3.2.5 压力远场

压力远场条件适用于理想气体流动问题，要求给定来流的静压和马赫数。在使用压力远场条件时，计算边界需要距离流动核心区域足够远。

3.2.6 流量出口

流量出口边界条件仅适用于不可压缩流动，需要给定出口处的质量流量。

3.2.7 压力出口

压力出口适用于可压缩和不可压缩流动问题。使用压力出口条件要求给定出口静压，当出口存在回流时需给定回流的标量参数。压力出口条件可以应用于非物理自由出口情况，且具有较好的收敛速度，推荐使用。

3.2.8 对称边界

对称边界适用于物理场是对称的情况，通过使用对称边界条件可以减少计算量，该边界无需给定参数。

3.2.9 壁面

包括无滑移壁面和滑移壁面。无滑移壁面需要给定壁面运动速度和其他标量参数；滑移壁面无需给定参数。

3.3 数值方法

将控制方程(3.1)表述成标量输运方程的通用形式：

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)dV + \int_V \nabla \cdot (\rho\phi\mathbf{u})dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi)dV + \int_V S_\phi dV \quad (3.9)$$

其中， ϕ 为特征变量， Γ 为扩散和热传导系数， S_ϕ 为源项；

3.3.1 梯度项

➤ GREEN_GAUSS^[3]

$$\nabla\phi = \frac{1}{V_0} \sum_f \phi_f S_f \quad (3.10)$$

➤ WEIGHTED LEAST SQUARES METHOD

$$(\nabla \phi) = \left[\sum_f \frac{\mathbf{ds} \otimes \mathbf{ds}}{\mathbf{ds} \cdot \mathbf{ds}} \right]^{-1} \left[\sum_f \frac{(\phi - \phi_n) \mathbf{ds}}{\mathbf{ds} \cdot \mathbf{ds}} \right] \quad (3.11)$$

其中， $\mathbf{ds} = x_n - x$ ； x_n 和 ϕ_n 表示相邻单元的重心和物理量的值；

3.3.2 对流项

可将对流项的离散方法分为中心格式和迎风格式两种，下面将以一维流动的欧拉方程为例，逐项对 QCFD 软件中提供这两类格式进行介绍，一维流动的欧拉方程可表示为：

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(w) = 0 \quad (3.12)$$

其中，

$$w = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \end{bmatrix}, \quad f = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u H \end{bmatrix}, \quad p = (\gamma - 1) \rho \left(E - \frac{u^2}{2} \right), \quad H = E + \frac{p}{\rho} \quad (3.13)$$

在间隔为 Δx 的均匀网格上，半离散有限体积格式为：

$$\Delta x \frac{dw_j}{dt} + h_{j+\frac{1}{2}} - h_{j-\frac{1}{2}} = 0 \quad (3.14)$$

其中 $h_{j+\frac{1}{2}}$ 表示单元 j 和 $j+1$ 之间的数值通量。

(1) 中心格式

➤ JST (Jameson-Schmidt-Turkel scheme)^[4]

对于 JST 格式，式(3.14)中数值通量可表示为：

$$h_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (f_{j+1} + f_j) - d_{j+\frac{1}{2}} \quad (3.15)$$

其中 $f_j = f(w_j)$ ；耗散通量 $d_{j+\frac{1}{2}}$ 为：

$$d_{j+\frac{1}{2}} = \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} \Delta w_{j+\frac{1}{2}} - \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(4)} \left(\Delta w_{j+\frac{3}{2}} - 2\Delta w_{j+\frac{1}{2}} + \Delta w_{j-\frac{1}{2}} \right) \quad (3.16)$$

其中

$$\Delta_{j+\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \rho_{j+1} - \rho_j \\ (\rho u)_{j+1} - (\rho u)_j \\ (\rho u H)_{j+1} - (\rho u H)_j \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

单元 j 处的雅可比矩阵 $\frac{\partial f}{\partial w}$ 的谱半径为 $r_j = |u| + c$, 其中 c 表示当地声速。通过

压力传感器 s_j 控制耗散系数 $\epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}$ 和 $\epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(4)}$ 的开关, 压力传感器 s_j 的定义如下:

$$s_j = \frac{|p_{j+1} - 2p_j + p_{j-1}|}{p_{j+1} + 2p_j + p_{j-1}} \quad (3.18)$$

单元交界面处的谱半径和压力传感器定义为:

$$r_{j+\frac{1}{2}} = \max(r_{j+1}, r_j), \quad s_{j+\frac{1}{2}} = \max(s_{j+1}, s_j) \quad (3.19)$$

耗散系数:

$$\epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} = k_2 s_{j+\frac{1}{2}} r_{j+\frac{1}{2}}, \quad \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(4)} = \max(0, k_4 r_{j+\frac{1}{2}} - c_4 \epsilon_{j+\frac{1}{2}}^{(2)}) \quad (3.20)$$

对于跨声速流动, 式(3.20)中的常数采用如下数值:

$$k_2 = 1, \quad k_4 = \frac{1}{32}, \quad c_4 = 2$$

➤ LAX-FRIEDRICH^[5]

对于 LAX-FRIEDRICH 格式, 式(3.14)式中的数值通量可表示为:

$$\hat{h}_{i-1/2}^n = \frac{1}{2}(f_{i-1} + f_i) - \frac{\Delta x}{2\Delta t}(w_i^n - w_{i-1}^n) \quad (3.21)$$

(2) 迎风格式

➤ ROE

ROE 格式通过局部线性化的处理方法, 将式(3.12)表示的非线性问题转化为如下的线性问题:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + A \frac{\partial w}{\partial x} = 0, \quad A \in R^{3 \times 3} \quad (3.22)$$

根据 Roe 提出的 $A(w_l, w_r)$ 构造方法, 得到 $A = R(w)\Lambda L(w)$, 其中 w 为 Roe 平均后的变量; 可以证明 Roe 格式^[6]对应的数值通量为:

$$h_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}[f(w_l) + f(w_r)] - \frac{1}{2}L^{-1}|\Lambda|L(w_r - w_l) \quad (3.23)$$

➤ AUSM

AUSM 格式将无粘通量分为对流通量和压力通量两部分, 即:

$$f = f_c + f_p, \quad f_c = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 \\ \rho u H \end{pmatrix} = M \cdot a \cdot \Phi, \quad f_p = \begin{pmatrix} 0 \\ p \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho H \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

根据文献，AUSM 格式^[7]的数值通量可表示为：

$$h_{j+\frac{1}{2}} = M_{j+\frac{1}{2}} \cdot \frac{a_{j+\frac{1}{2}}}{2} \cdot (\Phi_j + \Phi_{j+1}) - \frac{a_{j+\frac{1}{2}}}{2} \cdot \left| M_{j+\frac{1}{2}} \right| \cdot (\Phi_{j+1} - \Phi_j) + p_{j+\frac{1}{2}} \quad (3.25)$$

其中， $M_{j+\frac{1}{2}} = M_j^+ + M_{j+1}^-$ ；

$$M^\pm = \begin{cases} \frac{1}{2}(M \pm |M|) & |M| \geq 1 \\ \pm \frac{1}{4}(M \pm 1)^2 & |M| < 1 \end{cases}, \quad a_{j+\frac{1}{2}} = \min(a_j, a_{j+1}), \quad a = a^2 / \max(|w|, a) \quad (3.26)$$

$$p_{j+\frac{1}{2}} = p_j^+ p_j + p_{j+1}^- p_{j+1}, \quad p^\pm = \begin{cases} \frac{1}{2}[1 \pm \text{sign}(M)] & |M| \geq 1 \\ \frac{1}{4}(M \pm 1)^2(2 \mp M) & |M| < 1 \end{cases}$$

3.3.3 时间项

QCFD 仅提供 EULER_IMPLICIT 一种时间格式：

$$w_j^{n+1} = w_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(h_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - h_{j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \quad (3.27)$$

4. 量子算法理论

4.1 HHL 算法

HHL 算法^[8]是一种求解线性方程组的量子算法，在特定的条件下，可以实现经典算法的指数加速；具体来说，对于 s -稀疏线性方程组，使用经典算法进行求解，需要的时间复杂度为 $O(Nsk \log(\frac{1}{\epsilon}))$ ，其中 k 和 ϵ 分别表示系统的条件数和近似精度；当 A 为厄米矩阵时，采用 HHL 算法求解线性方程组，需要的时间复杂度为 $O(\log(N)s^2 \frac{k^2}{\epsilon})$ 。

在执行算法的具体步骤之前，需要对要求解的线性方程组 $A\bar{x}=\bar{b}$ 进行特定转化；不失一般性地假设 A 为厄米矩阵，否则取

$$C_A = \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^H & 0 \end{bmatrix}, \quad C_x = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}, \quad C_b = \begin{bmatrix} 0 \\ x \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

使得 $C_A \bar{C}_x = \bar{C}_b$ 成立且满足 C_A 为厄米矩阵。

将向量 \bar{x}, \bar{b} 分别归一化后采用振幅编码的方式映射到量子态 $|x\rangle, |b\rangle$ ，即将原问题转化为 $A|x\rangle=|b\rangle$ 。

对厄米矩阵 A 进行谱分解有

$$A = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|, \lambda_j \in R \quad (4.2)$$

其中 λ_j, u_j 分别为矩阵 A 的特征值和特征向量。

将 $|b\rangle$ 在矩阵 A 的特征空间中展开，得到

$$|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} b_j |u_j\rangle, b_j \in C \quad (4.3)$$

即得到原方程组的解：

$$|x\rangle = A^{-1}|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j^{-1} b_j |u_j\rangle \quad (4.4)$$

下面我们将结合图 4.1 对 HHL 算法作进一步的阐述，首先通过 QPE 量子线路将矩阵 A 的特征值提取到量子态的振幅上，对 $|0\rangle^{\otimes n}|b\rangle$ 进行一次 QPE 操作，得到：

$$QPE(|0\rangle^{\otimes n}|b\rangle) = \sum_{j=0}^{N-1} b_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \quad (4.5)$$

其中 λ_j 是对应特征值 λ_j 的近似整数。

其次通过受控旋转转移特征值，构造如下受控旋转 $CR(k)$

$$CR(k)(|a\rangle|j\rangle) = \begin{cases} RY\left(\arccos\frac{C}{k}\right)|a\rangle|k\rangle, j=k \\ |a\rangle|j\rangle, j \neq k, \end{cases} \quad (4.6)$$

式中， C 为 λ_j 的归一化系数。对 $\sum_{j=0}^{N-1} |0\rangle|\lambda_j\rangle b_j |u_j\rangle$ 进行遍历式旋转控制操作，

得到：

$$\left(\prod_{k=0}^{N-1} (CR(k) \otimes I)\right) \sum_{j=0}^{N-1} b_j |0\rangle|\lambda_j\rangle |u_j\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle \right) b_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle \quad (4.7)$$

最后通过逆 QPE 输出结果量子态，对受控旋转后的结果进行逆 QPE 操作，可以得到：

$$(I \otimes QPE^\dagger) \sum_{j=0}^{N-1} \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle \right) b_j |\lambda_j\rangle |u_j\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \left(b_j \sqrt{1 - \frac{C^2}{\lambda_j^2}} |0\rangle |0\rangle |u_j\rangle + b_j \frac{C}{\lambda_j} |1\rangle |0\rangle |u_j\rangle \right) \quad (4.8)$$

在逆 QPE 操作后，对辅助比特进行测量，当测量结果为 1 时，即得到线性方程组 $Ax = b$ 的解量子态 $|x\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j^{-1} b_j |u_j\rangle$ 。

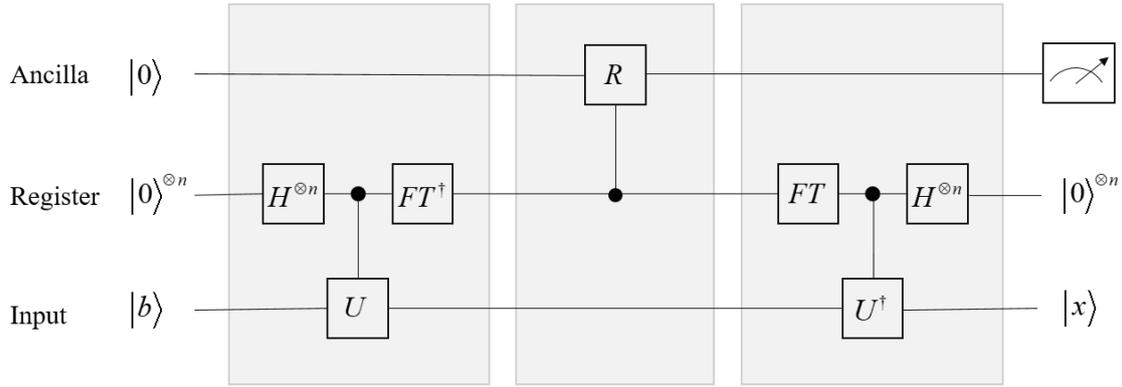


图 4.1 HHL 算法线路图

4.2 量子随机存储器 (QRAM)

量子随机存储器 (Quantum Random Access Memory) 是一种量子计算机中存储设备。该设备能够让量子计算机读取经典数据。量子随机存储器其实是提供一种么正变换：

$$\sum \alpha_i |i\rangle_A |0\rangle_D \rightarrow \sum \alpha_i |i\rangle_A |d_i\rangle_D$$

其中 $|i\rangle$ 表示一个 n 位的地址寄存器， $|i\rangle = |i_{n-1}i_{n-1} \dots i_1i_0\rangle$ 。下标 A 和 D 分别表示数据地址位和数据寄存位。 $|d_i\rangle$ 表示根据地址位索引的 1 比特的数据， α_i 表示任意的复振幅。

4.3 Tomography 算法

QCFD 软件采用 tomography 算法^[9]获得 HHL 算法得到的量子态解，具体包括两个部分，即振幅估计和符号估计。

4.3.1 振幅估计

- 在标准基下，对获得的 $N = \frac{36d \ln d}{\delta^2}$ 份量子态进行测量，估计各基态频

率 $p_i = \frac{n_i}{N}$ ，其中 n_i 表示观测到输出结果 i 的次数。

- 以 QRAM 数据结构存储 $\sqrt{p_i}$ ，以便有效地制备量子态 $|p\rangle = \sum_{i \in [d]} \sqrt{p_i} |i\rangle$

4.3.2 符号估计

➤ 使用控制量子比特制备 $N = \frac{36d \ln d}{\delta^2}$ 份量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \sum_{i \in [d]} x_i |i\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \sum_{i \in [d]} \sqrt{p_i} |i\rangle$

➤ 在第一个量子比特上应用 Hadamard 量子门，可以得到量子态：

$$\frac{1}{2} \sum_{i \in [d]} [(x_i + \sqrt{p_i}) |0, i\rangle + (x_i - \sqrt{p_i}) |1, i\rangle]$$

➤ 在标准基下，对上述的每一份量子态进行测量，得到结果 $|b, i\rangle$ 出现的次数 $n(b, j)$ ，其中 $b \in \{0, 1\}$ 。

➤ 当 $n(0, i) > 0.4 p_i N$ 时，取 $\sigma_i = 1$ ，否则取 -1

完成振幅和符号估计后，即可得到输出结果向量 $x_i = \sigma_i \sqrt{p_i}$

5. 矩阵预处理

量子计算的时间复杂度与线性方程组的条件数相关，因此为了加快量子线性求解器求解，我们在程序中加入了两类预处理方法：对角优化 (Diagonal Scaling)^[10]和稀疏近似逆 (Sparse Approximate Inverse)^[11]。下面我们将详细介绍这两类预处理器算法(以线性方程组 $A\vec{x} = \vec{b}$ 为例)。

5.1 对角优化

对角优化的主要思想是寻找两个对角阵 D , E 分解左乘、右乘上矩阵 A ，得到矩阵 $A' = DAE$ ，使得得到的矩阵 A' 条件数小于 A 。初始的线性方程组改写成 $A' \vec{x} = Db$ ，初始线性方程组的解 $x = E^{-1} \vec{x}$ 。对角阵的选取可以有多种方法，这里介绍本软件中所用到的一种方法：

- 1) 对角阵 D , E 初始为单位矩阵，令 $B = A$;
- 2) 分别取矩阵 B 每行最大值组成对角阵 d_1 ，每列最大值组成对角阵 e_1 ，矩阵 $D_1 = d_1^{-1}$ ， $E_1 = e_1^{-1}$ 。
- 3) 将得到的对角阵分别左乘、右乘上矩阵得到矩阵 $B := D_1 B E_1$ 。 $D := D_1 D$, $E := E_1 E$ 。
- 4) 如果 A_1 中最大值与 1 的插值小于误差 ϵ ，则停止计算，反之，则返回第 2 步，直至收敛。

5.2 稀疏近似逆

稀疏近似逆的主要思想是：显示构建 A^{-1} 的稀疏近似逆 M ，如何快速捕捉 A^{-1} 大元素的位置信息确定 M 稀疏结构是该类算法的关键。根据矩阵 M 的稀疏结构是否固定，可以将该方法分为两种：静态方法和动态方法。下面将介绍稀疏近似 M 的求解方法：

- 1) 当矩阵 M 是 A 的近似逆时，此时 A 和 M 应满足： $MA - I \approx 0$ 。因此可以将该问题转化成求带约束的最小化问题 $\min \|MA - I\|_F^2$ 。
- 2) 令 $M = (m_1, m_2, \dots, m_n)$ ，则有 $\|MA - I\|_F^2 = \sum_{k=1}^n \|(MA - I)e_k\|_2^2 = \sum_{k=1}^n \|Am_k - e_k\|_2^2$ 。此时将问题分解为 n 个独立的带约束的最小二乘问题： $\min \|Am_k - e_k\|_2, k = 1, 2, \dots, n$ 。
- 3) 构造稀疏矩阵结构 J 的方式有静态和动态两类：静态方法是事先给定预处理 M 的稀疏结构 J ；而动态方法是指先将 J 做简单的初始稀疏结构，例如，单位矩阵 I 的稀疏结构，继而依据某种事先规定的方法逐步进行填充或者动态调整稀疏结构 J 中的指标，直至 $\|MA - I\|_F < \epsilon$ 或者 M 中各行的非零元个数达到给定的最大值。

6. 软件整体计算框架

目前我们的量子 CFD 软件是基于经典 CFD 开源软件计算底层，利用经典 CFD 方法将控制方程离散并线性化成线性方程组，利用量子算法如 HHL 对线性方程组进行求解。其中由经典到量子数据的转化由 QRAM 完成。软件框架如图 4.1 所示：

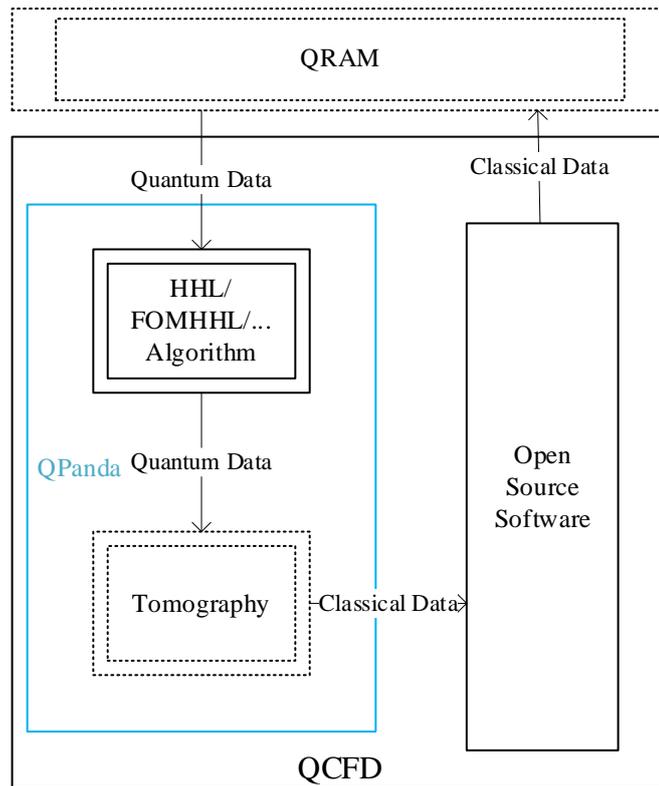


图 4.1 量子 CFD 软件计算框架

参考文献

- [1] ANDERSON J D, WENDT J. Computational fluid dynamics [M]. Springer, 1995.
- [2] LII W S. The viscosity of gases and molecular force [J]. Lond Edinb Dublin Philos Mag J Sci, 1893, 36: 507-31.
- [3] SYRAKOS A, DIMAKOPOULOS Y, GOULAS A, et al. A critical analysis of some popular methods for the calculation of the gradient in finite volume methods, with suggestions for improvements [J]. ArXiv, 2016, abs/1606.05556.
- [4] JAMESON A. Origins and further development of the Jameson–Schmidt–Turler scheme [J]. AIAA Journal, 2017, 55(5): 1487-510.
- [5] LEVEQUE R J, LEVEQUE R J. Numerical methods for conservation laws [M]. Springer, 1992.
- [6] ROE P L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes [J]. Journal of computational physics, 1981, 43(2): 357-72.
- [7] LIOU M-S, STEFFEN JR C J. A new flux splitting scheme [J]. Journal of Computational physics, 1993, 107(1): 23-39.
- [8] HARROW A W, HASSIDIM A, LLOYD S. Quantum algorithm for linear systems of equations [J]. Physical review letters, 2009, 103(15): 150502.
- [9] KERENIDIS I, PRAKASH A. A quantum interior point method for LPs and SDPs [J]. ACM Transactions on Quantum Computing, 2020, 1(1): 1-32.
- [10] Takapoui, R. and H. Javadi (2014). Preconditioning via Diagonal Scaling.
- [11] Grote, M. J. and T. Huckle (1997). Parallel Preconditioning with Sparse Approximate Inverses. SIAM Journal on Scientific Computing 18(3): 838-853.