一种基于变分量子算法的求解势流和斯托克斯流的数值方法

Y. Y. Liu[a]、Z. Chen[b]、C. Shu[a, *]、P. Rebentrost[c]、Y. G. Liu[a]、S. C. Chew[d]、B. C. Khoo[a]和 Y. D. Cui[d]

[a] 新加坡国立大学机械工程系，肯特岗弯 10 号，新加坡 119260

[b] 上海交通大学船舶与海洋工程学院，中国上海 200240

[c] 新加坡国立大学量子技术中心，科学大道 2 号 3 号，新加坡 117543，新加坡

[d] 新加坡国立大学，新加坡 117411，新加坡共和国

摘要

本文提出了一种基于变分量子算法的数值方法，用于求解势流和斯托克斯流问题。在该方法中，分别采用速度势、流函数和涡量形式，将势流和斯托克斯流的控制方程写成拉普拉斯方程和斯托克斯方程的形式。随后，采用有限差分法和广义

* 通讯作者，电子邮箱：mpeshuc@nus.edu.sg（C. Shu）。

微分求积（GDQ）法对控制方程进行离散。给定边界条件后，可得到相应的线性方程组。利用变分量子线性方程组求解器（VQLS）求解这些线性方程组，从而等效地求解势流和斯托克斯流问题。据作者所知，这是首项将 GDQ 方法（一种天然的高阶离散方法）与 VQLS 算法相结合的研究。由于 GDQ 方法能够以比有限差分法少得多的网格点实现更高精度的导数近似，因此 VQLS 算法的输入矩阵规模可以更小，从而节省计算成本。本文通过两个具有代表性的算例——圆柱绕流势流和顶盖驱动方腔中的斯托克斯流——全面评估了该方法的性能。数值结果验证了该基于 VQLS 的方法的适用性和准确性。此外，本文通过启发式标度评估其时间复杂度，结果表明，该方法在量子比特数n和精度ε方面具有良好的扩展性。本研究将量子计算引入计算流体力学领域。凭借相较于经典方法的量子优势，有望推动工程领域大规模流体力学问题求解取得进展。

关键词：《Quantum》计算、变分量子线性求解器、斯托克斯流、势流、流函数、微分求积。

1. 引言

势流和斯托克斯流是流体动力学的两大基石。作为流体流动的一种理想化模型，势流的特点是流场无黏且无旋，其中速度矢量可表示为速度势函数的梯度。对于不可压缩流，速度势满足拉普拉斯方程。斯托克斯流又称爬流，是一种特定类型的流体流动，其假设是惯性力相较于黏性力和压力可忽略不计。通常，斯托克斯流的流体速度极慢，物理黏度很大，可用极小的雷诺数来描述。斯托克斯流的运动由斯托克斯方程描述。事实上，势流的拉普拉斯方程和斯托克斯流的斯托克斯方程，都是在特定假设下对纳维-斯托克斯（N-S）方程的简化：拉普拉斯方程假设涡量和黏度为零，而斯托克斯方程假设雷诺数极低（$Re \ll 1$）。这些简化方程使许多一般情况下的流体问题变得可解，并为分析物理学、工程学和生物学中的流动问题提供了良好的实践指导。势流理论的实际应用包括飞机 [1,2]，、船舶运动 [3,4]，、水波 [5-8]，和地下水流 [9]等研究。斯托克斯流广泛用于研究自然现象 [10-13]，例如微生物游动以及流体流经微小裂缝；也用于工程应用 [14-16] ，例如涂料、

微机电系统，以及浸没在流体中的柔性细丝/纤维。

拉普拉斯方程和斯托克斯方程可以通过解析方法和数值方法求解。解析方法旨在求得精确解，而数值方法则求得近似解。后者指的是计算流体力学（CFD）技术，即使用数值算法在计算机上计算解。过去几十年来，基于 CFD 的数值研究彻底改变了对势流、斯托克斯流以及相关流体力学问题的研究。然而，人们已经察觉到经典计算机计算能力增长速度放缓；除非硬件设计取得革命性突破，否则这种趋势可能会持续下去 [17,18]。幸运的是，量子计算（QC）的出现与突破，以及量子设备的发展，为科学计算带来了另一种范式。与经典计算技术不同，QC 利用量子力学定律进行计算，预计在求解复杂问题方面更具竞争力 [19-21]。例如，据报道，Harrow-Hassidim-Lloyd（HHL）算法 [22] 在求解某些类型的线性方程组时，相比经典方法可实现指数级加速。

量子计算颇具潜力的计算能力推动了面向计算流体力学的数值算法构建，使其能够部署在量子计算机上。涉及实际实现的典型工作包括基于HHL的研究 [23-27], 基于变分量子算法（VQAs）的研究 [28-31] 以及基于量子机器学习（QML）的研究 [32-34]。具体而言，在基于HHL算法的研究中，

HHL作为子程序，用于求解通过数值方法离散目标偏微分方程（PDEs）后形成的线性方程组。尽管已有研究展示了其在解决一些流动问题方面的应用，但HHL算法预期的指数级加速尚未得到明确证明。此外，由于HHL类算法基于量子傅里叶变换（QFT），因而需要大量电路资源，在当前含噪中等规模量子（NISQ）[35] 设备上可能不适用于实际的流动问题。

作为近期开发的量子算法，变分量子算法将量子计算与经典计算技术相结合，似乎更适用于含噪中等规模量子硬件。在实践中，变分量子算法在求解线性方程组方面的一个成功应用是变分量子线性方程组求解器（VQLS）[36-39]。它已用于求解泊松方程 [31,40,41] 和热传导方程[30]等偏微分方程。然而，VQLS算法在工程场景中求解流动问题的实际应用仍然鲜见。

基于上述讨论，本文将探讨基于VQLS的算法 [30] 在求解具有工程意义的势流和斯托克斯流问题中的应用。将采用有限差分法和广义微分求积法（GDQ）[42] 对给定边界条件下的拉普拉斯方程和斯托克斯方程进行离散化。随后，利用VQLS算法求解所得的线性方程组。需要注意的是，与有限差分法不同，GDQ方法本质上是一种高阶离散方法，能够在达到预期精度的情况下使用更少的网格点。因此，VQLS算法的输入矩阵规模有望减小，计算成本也将随之降低。

因此，可以预期VQLS算法的输入矩阵规模更小，计算成本也会相应降低。势流和斯托克斯流与整个流体力学领域中的实际流动密切相关，这凸显了开展本研究的必要性。此外，本研究所获得的诸多有价值见解，可能推动量子计算广泛应用于更复杂的流体流动问题。

本文其余部分安排如下。第2节详细介绍所提出的基于VQLS的直接数值方法，用于模拟势流和斯托克斯流。具体而言，首先回顾势流和斯托克斯流的控制方程。随后介绍目标控制方程的数值离散以及VQLS算法的技术细节。第3节展示本方法的实际应用。最后，第4节总结本文。

2. 基于变分量子线性求解器的势流和斯托克斯流模拟直接数值方法

鉴于势流和斯托克斯流的重要性，并受量子计算潜在优势的启发，本节将介绍一种基于VQLS算法的混合直接数值方法，用于有效模拟势流和斯托克斯流。首先，回顾这两种流动的控制方程。随后，介绍有限差分法和广义微分求积法，并结合适当的边界条件对控制方程进行离散。由此得到相应的线性方程组。这些线性

方程组由VQLS算法求解，从而得到势流和斯托克斯流的解。

2.1 控制方程

2.1.1 势流

对于二维不可压势流，速度势 φ 根据定义 $=\nabla\varphi\boldsymbol{u}$ 满足以下笛卡尔坐标下的拉普拉斯方程。

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=\nabla^2\varphi=\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}=0, \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{u}$ 表示速度矢量。利用以下转换关系，该拉普拉斯方程也可以写成柱坐标或极坐标形式。

$$\begin{aligned} x&=r\cos(\theta),\\ y&=r\sin(\theta), \end{aligned} \tag{2}$$

其中，r 表示半径，θ 表示方位角。因此，式 (1) 中的拉普拉斯方程可写为:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2}=0. \tag{3}$$

2.2.1 斯托克斯流

涡量-流函数方法是求解二维不可压流的一种常用方法。通过引入涡量 ω 和流函数 Ψ，纳维-斯托克斯方程的涡量-流函数形式可

在笛卡尔坐标系下表示如下。

$$\begin{cases} \mathrm{Re}\left(\dfrac{\partial\omega}{\partial t}+\dfrac{\partial\psi}{\partial y}\dfrac{\partial\omega}{\partial x}-\dfrac{\partial\psi}{\partial x}\dfrac{\partial\omega}{\partial y}\right)=\dfrac{\partial^2\omega}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2\omega}{\partial y^2}, \\ \nabla^2\psi=\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\omega. \end{cases} \tag{4}$$

在斯托克斯流条件下，雷诺数 Re 接近于零，由此可从式（4）得到以下方程。

$$\begin{cases} 0=\dfrac{\partial^2\omega}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2\omega}{\partial y^2}, \\ \dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\omega. \end{cases} \tag{5}$$

为了直接计算流函数 ψ，将式（5）进一步改写如下 s.

$$\nabla^4\psi=\frac{\partial^4\psi}{\partial x^4}+\frac{\partial^4\psi}{\partial y^4}+2\frac{\partial^4\psi}{\partial x^2\partial y^2}=0, \tag{6}$$

这是一个双调和方程。

2.2. 线性方程组的生成

2.2.1 势流

在数学和流体动力学中，圆柱周围的势流是一个经典问题，为进一步研究具有更复杂几何形状的其他问题奠定了基础，例如翼型、船体和螺旋桨。为方便起见，本文采用势流方程（3）来计算极坐标下的速度势解 φ 。将离散值记为 $(\quad)$, $\varphi=\varphi\quad\theta_{,i\,j\,i\,j}r$，用中心差分公式离散方程（3），其中 $i=2, 3, ..., N$-1，$j=1, 2, ..., M$-1，可得

$$\frac{\varphi_{i+1,j}-2\varphi_{i,j}+\varphi_{i-1,j}}{\Delta r^2}+\frac{1}{r_i}\frac{\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i-1,j}}{2\Delta r}+\frac{1}{r_i^2}\frac{\varphi_{i,j+1}-2\varphi_{i,j}+\varphi_{i,j-1}}{\Delta\theta^2}=0, \tag{7}$$

其中 $\Delta r=(R_{out}-R_{in})/(N-1)$，$\Delta\theta=2\pi/(M-1)$，且 $r_i=R_{in}+(i-1)\Delta r$，其中 R_{out}、R_{in}、N 和 M 分别表示网格的外半径、圆柱半径，以及 i 和 j 方向上的网格点数。引入 $a_i=\Delta r/2r_i$ 和 $b_i=\Delta\theta^2/\left(2r_i^2\right)$ 后，方程（7）可改写如下

$$\varphi_{i+1,j}\left(1+a_i\right)+\varphi_{i-1,j}\left(1-a_i\right)+\varphi_{i,j+1}b_i+\varphi_{i,j-1}b_i-\varphi_{i,j}\left(2+2b_i\right)=0. \tag{8}$$

给定自由来流速度 V_0，实际实现时需在计算域边界上施加以下条件。

$$\begin{cases}\varphi_{1,j}=c, & cylinder\ surface,\\ \varphi_{N,j}=V_0y_{N,j}+c, & outer\ boundary,\\ \varphi_{i,0}=\varphi_{i,M-1},\varphi_{i,1}=\varphi_{i,M}, & periodic\ boundary\ conditon\ at\ y=0,\end{cases} \tag{9}$$

其中 c 为常数。求解此类问题等价于求解以下线性方程组，

$$A\vec{x}=\vec{b}, \tag{10}$$

with

$$\vec{x}=\left[\varphi_{1,1}\ \ \varphi_{2,1}\ \ \cdots\ \ \varphi_{N,1}\ \ \varphi_{1,2}\ \ \varphi_{2,2}\ \ \cdots\ \ \varphi_{N,2}\ \ \cdots\ \ \varphi_{N-1,M}\ \ \varphi_{N,M}\right]^T_{NM\times1},$$

$$\vec{b}=\left[c\ \ 0\ \ \cdots\ \ 0\ \ c+V_0y_{N,1}\ \ c\ \ 0\ \ \cdots\ \ 0\ \ c+V_0y_{N,2}\ \ \cdots\ \ c\ \ 0\ \ \cdots\ \ 0\ \ c+V_0y_{N,1}\right]^T_{NM\times1}.$$

为方便起见，未知量 $\varphi_{i,j}$ 的排列方式是：首先将同一方位角上的网格点分组，然后沿逆时针方向移动，以覆盖整个区域。因此，引入向量 $\vec{\phi}$，其定义如下，用于替代 $\vec{x}$。

$$\vec{\phi}=\begin{bmatrix}\vec{\varphi}_1\\ \vec{\varphi}_2\\ \vdots\\ \vec{\varphi}_M\end{bmatrix},\ \vec{\varphi}_j=\begin{bmatrix}\varphi_{1,j}\\ \varphi_{2,j}\\ \vdots\\ \varphi_{N,j}\end{bmatrix}. \tag{11}$$

剩下的问题是求解一个大型稀疏线性方程组$A\,b\vec{\phi}=\vec{}$，其中矩阵A为

$$A=\begin{bmatrix}T-2D & D & & & & D & 0\\ D & T-2D & D & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & D & T-2D & D\\ -I & & & & & 0 & I\end{bmatrix}_{NM\times NM}, \tag{12}$$

其中对角矩阵 = $(0\ \ _2\ \ _3\cdots\ _{N-1}\ 0)$，，，，，$D\ diag\ b\ b\ b$ 和

$$T=\begin{bmatrix}1 & 0 & & & & & & \\ 1-a_2 & -2 & 1+a_2 & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & 1-a_{N-1} & -2 & 1+a_{N-1} & \\ & & & & & 0 & 1 & \end{bmatrix}_{N\times N} \tag{13}$$

2.2.2 斯托克斯流

为便于说明，本文以顶盖驱动方腔中的斯托克斯流作为代表性示例进行研究，该问题是一个重要的基准算例。其边界条件如图1所示。笛卡尔坐标下的控制方程（6）采用两种数值离散方法进行离散，即中心有限差分法和微分求积法。

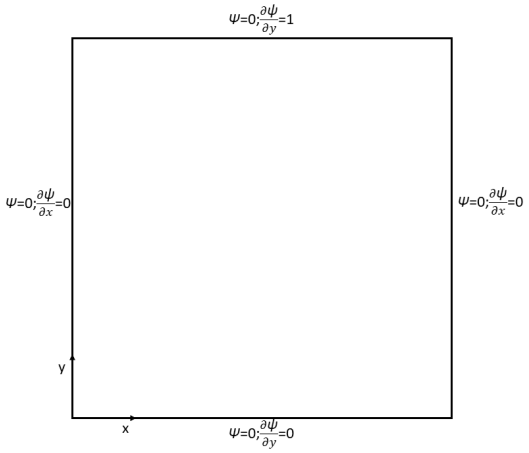


图1. 顶盖驱动方腔流动问题示意图。

A. 有限差分法离散

首先，在均匀网格上使用中心差分公式对$N \times N$ 个网格点进行离散后，对于内部区域，即$i = 2$、3、...、N-1，$j = 2$、3、...、N-1，离散形式可表示如下。

$$\frac{\psi_{i+2,j} - 4\psi_{i+1,j} + 6\psi_{i,j} - 4\psi_{i-1,j} + \psi_{i-2,j}}{h^4} + \frac{\psi_{i,j+2} - 4\psi_{i,j+1} + 6\psi_{i,j} - 4\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j-2}}{h^4} + \frac{\left[\psi_{i+1,j+1} - 2\psi_{i,j+1} + \psi_{i-1,j+1} - 2\left(\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}\right) + \psi_{i+1,j-1} - 2\psi_{i,j-1} + \psi_{i-1,j-1}\right]}{h^4} = 0, \tag{14}$$

其中$\psi_{i,j}$ 表示网格点（x_i, y_j）处的流函数，h表示网格尺寸。于是有

$$\psi_{i+2,j} + \psi_{i-2,j} + \psi_{i,j+2} + \psi_{i,j-2} + \psi_{i+1,j+1} + \psi_{i-1,j+1} + \psi_{i+1,j-1} + \psi_{i-1,j-1} - 6\left(\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1}\right) + 16\psi_{i,j} = 0. \tag{15}$$

如图1所示，边界条件为 $\psi = 0$，顶边界上的边界法向梯度$\psi_n = 1$，以及其他

三个边的$n\psi$ 。显然，顶角处不连续，因此$n\psi$ ψ 在此处存在奇异性。底角处也存在较弱的奇异性，这与莫法特涡的形成有关，而$n\psi$ 则连续。文献中已有若干方法[43-45] 可妥善处理此类问题。这里，我们以简化的方式通过以下关系施加边界条件。

$$\begin{cases}\psi_{1,j}=\psi_{N,j}=\psi_{i,1}=\psi_{i,N}=0,\\ \psi_{0,j}=\psi_{2,j},\psi_{N+1,j}=\psi_{N-1,j},\psi_{i,0}=\psi_{i,2}, \quad i=1,...,N, j=1,...,N-1.\\ \psi_{i,N+1}=\psi_{i,N-1}-2h,\end{cases} \tag{16}$$

因此，方程（15）的解等价于求解线性方程组 $Ax\vec{b}=\vec{}$ ，其中未知向量 $x^{\rightarrow}$ 和向量 $\vec{b}$

为

$$\vec{x}=\begin{bmatrix}\psi_{2,2} & \psi_{3,2} & \cdots & \psi_{N-1,2} & \psi_{2,3} & \psi_{3,3} & \cdots & \psi_{N-1,3} & \cdots & \psi_{N-2,N-1} & \psi_{N-1,N-1}\end{bmatrix}^{T}_{(N-2)^2\times1},$$

$$\vec{b}=\begin{bmatrix}0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 & 2 & \ldots & 2 & 2\end{bmatrix}^{T}_{(N-2)^2\times1}.$$

与势流的情形类似，未知量 $_{,i\ j}\psi$ 可通过 $\vec{\phi}$计算得到

其定义为

$$\vec{\phi}=\begin{bmatrix}\vec{\psi}_2\\ \vec{\psi}_3\\ \vdots\\ \vec{\psi}_{N-1}\end{bmatrix},\ \vec{\psi}_j=\begin{bmatrix}\psi_{2,j}\\ \psi_{3,j}\\ \vdots\\ \psi_{N-1,j}\end{bmatrix}. \tag{17}$$

因此，需要求解的线性方程组为

$$A\vec{\phi}=\vec{b}, \tag{18}$$

其中 A 可写为

$$A=\begin{bmatrix} T+D+I & G & I & & & & & & \\ G & T+D & \ddots & \ddots & & & & & \\ I & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & I & \\ & & & & \ddots & \ddots & T+D & G & \\ & & & & & I & G & T+D+I & \end{bmatrix}_{(N-2)^2\times(N-2)^2} \tag{19}$$

其中 (1 0 0 1)„ ,*D diag*= … 和

$$T=\begin{bmatrix} 16 & -6 & 1 & & & & \\ -6 & 16 & \ddots & \ddots & & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & \ddots & \ddots & 16 & -6 \\ & & & & 1 & -6 & 16 \end{bmatrix}_{(N-2)\times(N-2)} \tag{20}$$

$$G=\begin{bmatrix} -6 & 1 & & & & & \\ 1 & \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & & 1 & -6 \end{bmatrix}_{(N-2)\times(N-2)} \tag{21}$$

B. 广义微分求积离散

与前述离散化中采用的中心差分法不同，后者的精度仅为二阶，而 GDQ 方法通常用作一种高阶数值离散技术，用于导数近似。其思想源自传统的积分求积，即闭区域上的任意积分都可以近似表示为积分域内所有函数值的线性加权和

。简而言之，GDQ 方法将网格线上所有离散点处的函数值线性组合，以近似该方向上的偏导数。具体而言，式（6）中内部网格点（ x_i, y_j ）处的流函数的三个四阶偏导数可通过 GDQ 方法近似如下：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} = \sum_{k=1}^{N} w_{i,k}^{(4)} \psi_{k,j}, \\
&\frac{\partial^4 \psi}{\partial y^4} = \sum_{k=1}^{N} \overline{w}_{j,k}^{(4)} \psi_{i,k}, \\
&\frac{\partial^4 \psi}{\partial x^2 \partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}\right) = \frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right) = \sum_{l=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} w_{i,l}^{(2)} \overline{w}_{j,k}^{(2)} \psi_{l,k},
\end{aligned} \tag{22}$$

其中，$w_{i,j}^{(m)}$ 和 $\overline{w}_{i,j}^{(m)}$ 分别表示 x 和 y 方向上 m 阶偏导数的加权系数。类似地，图1所示的诺伊曼边界条件可按照参考文献 [46] 中的方法，通过狄利克雷边界条件实现。

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \psi}{\partial x} = \sum_{k=1}^{N} w_{i,k}^{(1)} \psi_{k,j} = 0, \quad for\, i = 1, N, j = 2, 3, \ldots, N-1, \\
&\left.\frac{\partial \psi}{\partial y}\right|_{j=1} = \sum_{k=1}^{N} \overline{w}_{1,k}^{(1)} \psi_{i,k} = 0, \left.\frac{\partial \psi}{\partial y}\right|_{j=N} = \sum_{k=1}^{N} \overline{w}_{N,k}^{(1)} \psi_{i,k} = 1, \quad for\, i = 2, 3, \ldots, N-1.
\end{aligned} \tag{23}$$

给定各空间维度上的网格分布，上述方程中的未知系数 $w_{i,j}^{(m)}$ 和 $\overline{w}_{i,j}^{(m)}$ 可以通过简单的代数公式和递推关系 [42,46,47] 显式且轻松地计算得到。这些加权系数组成一个稀疏矩阵 A，未知流函数则可以通过求解线性方程组 $A\vec{\psi} = \vec{b}$ 得到。图2展示了 N = 6、8 和 10 时矩阵 A 的规则稀疏模式，其中的点表示非零元素。

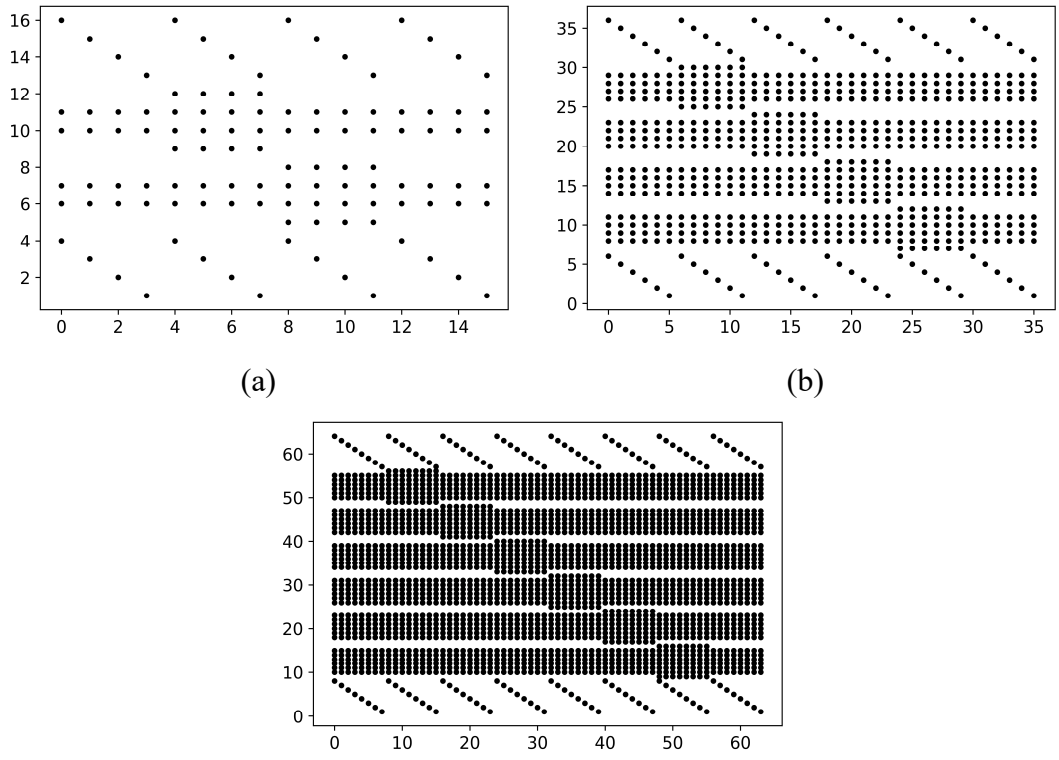


图2. 矩阵A在以下情况下的规则稀疏模式：(a) $N = 6$，(b) $N = 8$ 和(c) $N = 10$。非零值对应的元素以黑点表示。

2.3. 使用变分量子线性求解器求解线性方程组

求解器

上述线性方程组由 VQLS算法求解，该算法可直接解决势流和斯托克斯流问题。VQLS 是一种用于在 NISQ量子计算机上求解线性方程组的变分量子算法。对于某些可在量子设备上高效实现的大型线性方程组，该方法可能具有优势。在实际应用中，对于此前在第2节 2.2 小节中生成的线性方程组，VQLS 可以求得一个

归一化的 x,| 〉满足关系 x bA = \ ，其中 b 是由已知向量 b 制备的量子态。VQLS算法的输入包括矩阵 A（它是酉矩阵的线性组合 A_m，其系数为 c_m）以及一个短深度量子电路 U，其中 b = 0\ U（另见图 3）。构造参数化试探态 V(***α***) 后，在量子-经典混合优化循环中构造并评估代价函数 C(***α***)。如果满足代价函数 C(***α***) 的收敛判据，则试探态电路的最优参数 $\boldsymbol{\alpha}^*$ 可用于制备输出态。最终输出是量子态 (*)*x = α 0\ V，它与解向量 x 成比例。本小节将介绍三个主要过程，即态制备、试探态选择和代价函数评估。有关 VQLS算法的更多详情，请参阅文献 [36]。

| 〉 | /

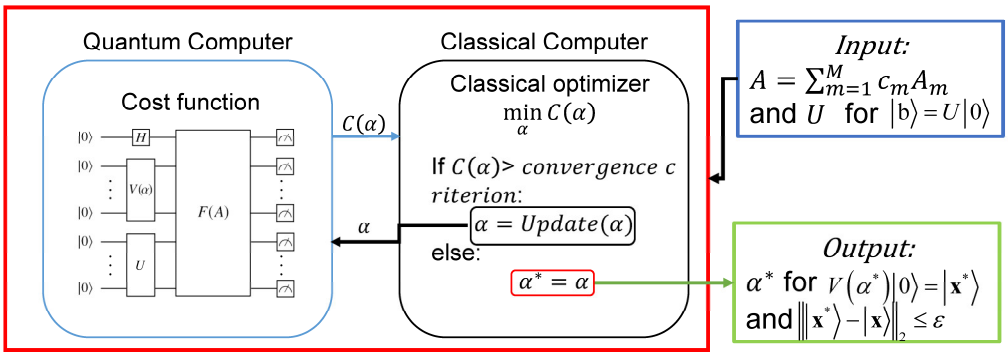


图 3. VQLS算法基本示意图。

在态制备过程中，矩阵 A 被分解为 A_m 个酉矩阵 M的线性组合，其复数系数为 c_m，如下所示：

$$A = \sum_{m=1}^{M} c_m A_m. \tag{24}$$

一种可能的分解方式是采用泡利基 [31,36,38,40] ，该基基于单位矩阵 I 的σ-矩阵以及泡利门 X、Y 和 Z。

$$\sigma_0 = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \sigma_1 = X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{25}$$

任意矩阵A都可以分解为泡利字符串，其中包含$\{0\ 1\ 2\ 3\}$，，，$_{n\,n}\sigma$ =。这里，我们将酉矩阵$_mA$ 表示为$_n\sigma$ 中的一个特定元素。其对应的系数c_m 可由 $\mathrm{Tr}(\quad)/2^n{}_{m\,m}c\ A\ A=\quad\cdot\quad$ 确定，其中 Tr 表示矩阵的迹。通过对基态 0 施加酉操作 U，可以制备量子态 b ；这可采用文献 [48] 报道的方法实现。

$$|\ \rangle$$

$$|\ \rangle$$

VQLS算法需要为量子门序列$V(\boldsymbol{\alpha})$构造一个试探态，以模拟潜在解 $\mathrm{x}\rangle = (\alpha)\,0V$。针对具体问题，试探态有多种选择；本研究采用了广泛使用的固定结构硬件高效试探态 [36,49] 。该试探态由多层受控门组成，这些受控门作用于交替的相邻量子比特对上，并通过旋转门 $R_y(\boldsymbol{\alpha})$使其纠缠。量子门的结构是固定的，只有旋转门 R_y 中的参数 α 会在每次量子电路运行时更新。

对于 VQLS算法中使用的代价函数 $C(\boldsymbol{\alpha})$，它需要满足两个方面的要求。首先，当状态 $\mathrm{x}A\Phi\backslash =\quad\backslash$ 几乎与 |b 成比例时，代价函数的值应趋近于一个很小的值。其次，

$$|\ /\quad|\ /$$

当 $\Phi\rangle$ 几乎与 $|\mathrm{b}$ 正交时，代价函数可能变得非常大。在这些条件下，代价函数如下所示。

$$C_{Gp}(\alpha)=C_{Gp}=\langle \mathrm{x}|H_P|\mathrm{x}\rangle, \tag{26}$$

哈密顿量 H_P 定义为

$$H_P=A^{\dagger}\left(I-|\mathrm{b}\rangle\langle \mathrm{b}|\right)A. \tag{27}$$

为了提高算法的准确性，通常会对代价函数进行归一化。具体而言，将代价函数 C_{Gp} 除以 Φ的范数，可得

$$C_p=1-\frac{|\langle \mathrm{b}|\Phi\rangle|^2}{\langle\Phi|\Phi\rangle}. \tag{28}$$

显然，在计算代价函数 C_P时，应首先计算 $\Phi|\Phi\rangle$ 和 $|\Phi\rangle^2$ b。它们的期望值可以通过哈达玛测试[36,40] 进行估计，这是一种标准的量子计算技术。最后，通过针对变分参数最小化C ，即可得到解 x。

需要指出的是，公式中的代价函数的全局表达式要求所有酉操作（U、$U^{\dagger}$、$A^{\dagger}_m$、A_m、$V^{\dagger}$ 和V）均由外部辅助量子比特控制。这可能会给哈达玛测试带来实验上的挑战，尤其是在试探态V由许多层组成时。因此，本研究中的实际实现采用了易于测量的局部代价函数，并可导向由[36]给出的相同最优解

$$C=1-\frac{\sum_{m=1}^{M}\sum_{m'=1}^{M}\left\langle 0\left|V^{\dagger}A_{m'}{}^{\dagger}UPU^{\dagger}A_{m}V\right|0\right\rangle c_{m}c_{m'}^{*}}{\sum_{m=1}^{M}\sum_{m'=1}^{M}\left\langle 0\left|V^{\dagger}A_{m'}{}^{\dagger}A_{m}V\right|0\right\rangle c_{m}c_{m'}^{*}},\tag{29}$$

with

$$P=\frac{1}{2}I+\frac{1}{2n}\sum_{l=0}^{n-1}Z_{l},\tag{30}$$

其中，Z_l 是局部作用于第l个量子比特上的泡利Z算符。因此，公式（29）可重写为

$$C=\frac{1}{2}-\frac{1}{2n}\frac{\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=1}^{M}\sum_{m'=1}^{M}u_{m,m',l}c_{m}c_{m'}^{*}}{\sum_{m=1}^{M}\sum_{m'=1}^{M}u_{m,m',-1}c_{m}c_{m'}^{*}},\tag{31}$$

与系数

$$u_{m,m',l}=\left\langle 0\left|V^{\dagger}A_{m'}{}^{\dagger}UZ_{l}U^{\dagger}A_{m}V\right|0\right\rangle.\tag{32}$$

当Z_l 算子满足$l=-1$时，可以用单位矩阵替代，即：

$$u_{m,m',-1}=\left\langle 0\left|V^{\dagger}A_{m'}{}^{\dagger}A_{m}V\right|0\right\rangle.\tag{33}$$

哈达玛测试可以通过实验估算复系数$u_{m,m',l}$，且只需控制酉算子$A^{\dagger}_{m}$、A_m 和Z_l 。最终可以通过最小化局部代价函数 C来解决该问题。

3. 结果与讨论

通过模拟二维圆柱周围的势流以及顶盖驱动方腔中的斯托克斯流，对当前基于 VQLS 的求解器的性能进行评估。针对第2.2小节中介绍的所述线性方程组，

本节将介绍相应的实现细节和结果，并进行讨论。具体而言，结合模拟结果，讨论精度和时间复杂度（启发式标度）相关的问题。所有量子模拟均使用 Xanadu 的开源 PennyLane 库实现， [50] 并以状态矢量模拟器作为后端。

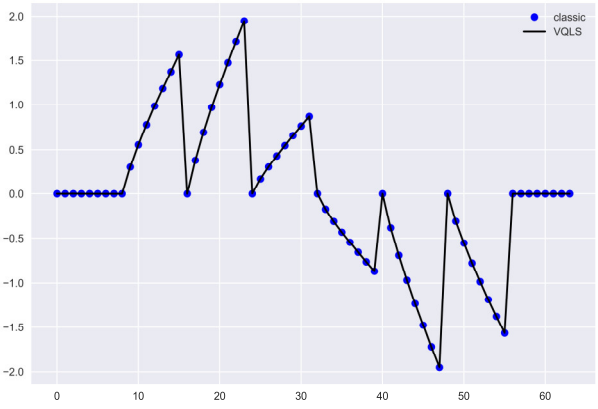
模拟中采用了第2.3小节所述的硬件高效试探态 $V(\boldsymbol{\alpha})$。根据参考文献[51], 中对各种经典优化器的比较，选用了具有自适应学习率、一阶矩和二阶矩的梯度下降优化器 ADAM 优化器 [52,53] 。考虑到试探态的初始化参数对优化过程影响很大，为确保普适性，这些参数设为随机值。启发式标度分析仅考虑收敛结果，并对每个实例运行 10 次以计算平均数据。在下文的比较中，经典求解器和本文提出的基于 VQLS 的求解器所得结果分别记为“经典”和“VQLS”。

3.1. 圆柱绕流势流

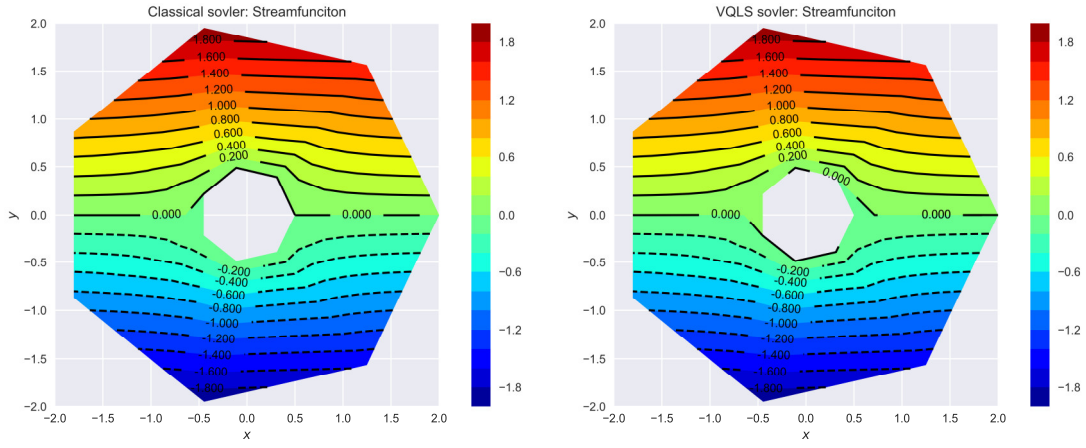
在模拟中，采用三组网格对计算域进行离散化，分别对应 $N = M =$ 4、8 和 16，以及n= 4、6 和 8。根据第2.3小节介绍的分解方法，使用$n = 6$ 个量子比特时，即$N = M =$ 8，矩阵A可线性分解为500项。对于$n = 8$ 且$N = M =$ 16的情况，矩阵A的酉算子线性组合包含2056项。

量子-经典 VQLS 求解器成功计算出了流函数、速度大小和速度矢量的解。图4和图5分别展示了$n=6$ （$N=8$）和$n=8$ （$N=16$）情况下的结果。作为对比，还列出了使用直接法的经典求解器计算的数据。显然，经典求解器和基于 VQLS 的求解器所得的解分布和等值线均吻合良好。这一结果证实，本文提出的基于 VQLS 的方法能够有效求解此类势流问题。

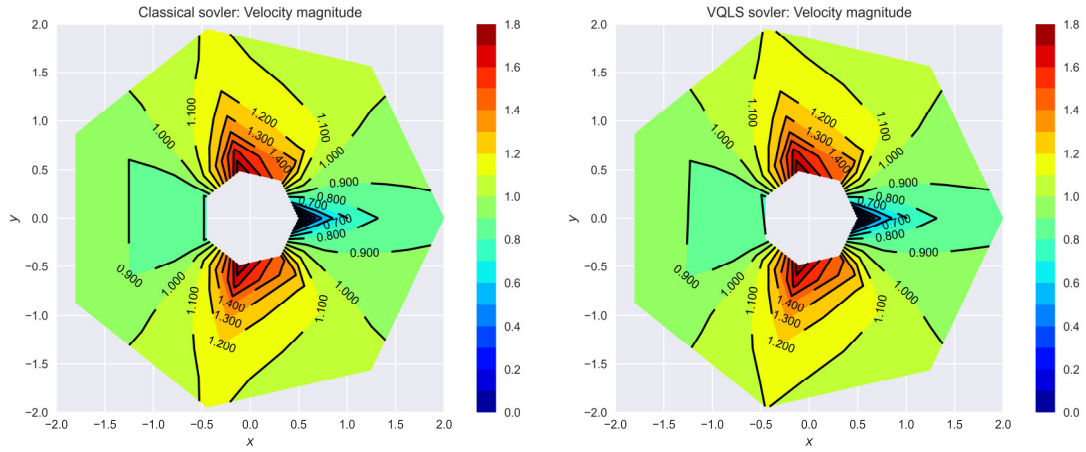
进一步评估了当前方法求解该势流问题的时间复杂度。图6和图7分别绘出了对 ε 和n 的依赖关系的启发式标度。结果显示，该方法对 $1/\varepsilon$ 的依赖关系近似呈对数增长，而对n 的依赖关系似乎呈线性增长（对N呈对数增长），这证明基于 VQLS 的方法在求解势流问题方面有望具备良好的效率。



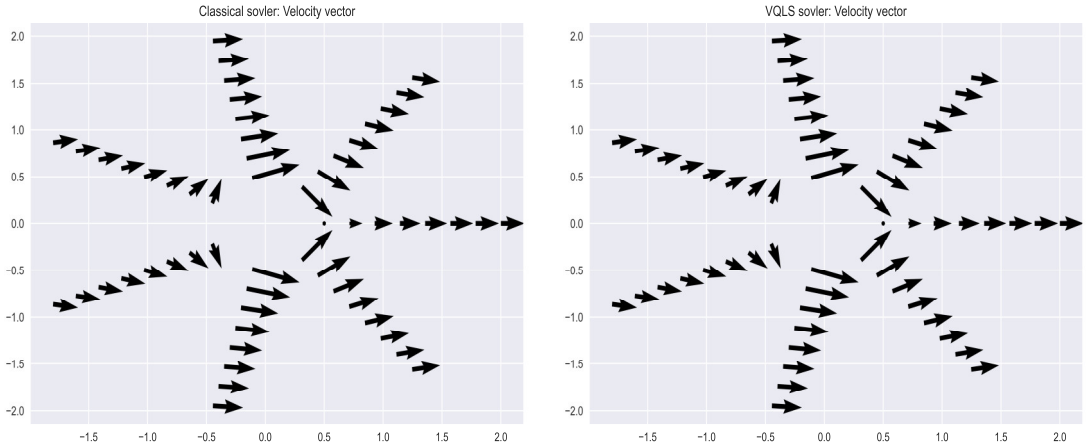
(a)



(b) (c)



(d) (e)

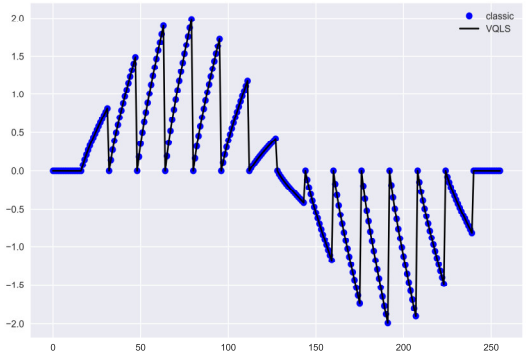


(f) (g)

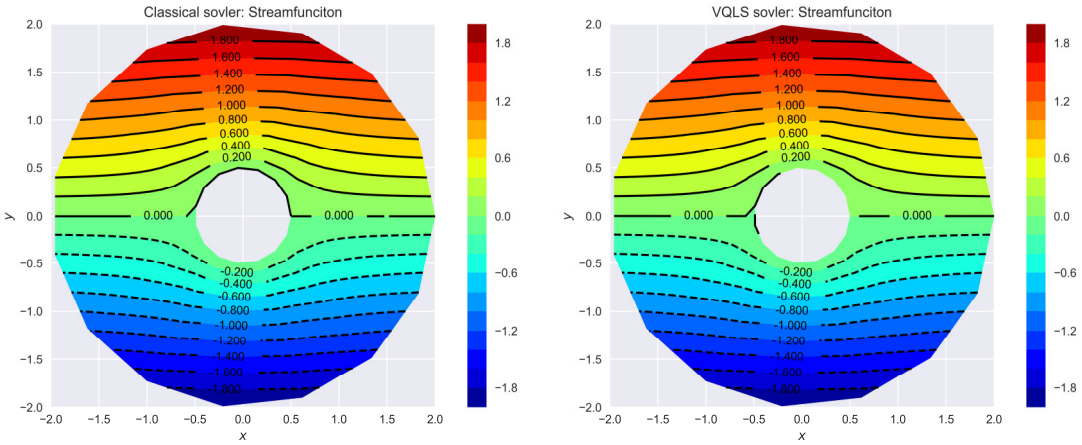
图4. 当$N = 8$ 和 $\varepsilon = 0.01$ 时圆柱势流的结果：

解的比较（a）；经典求解器（b）和当前基于 VQLS 的求解器（c）得到的流函数；由

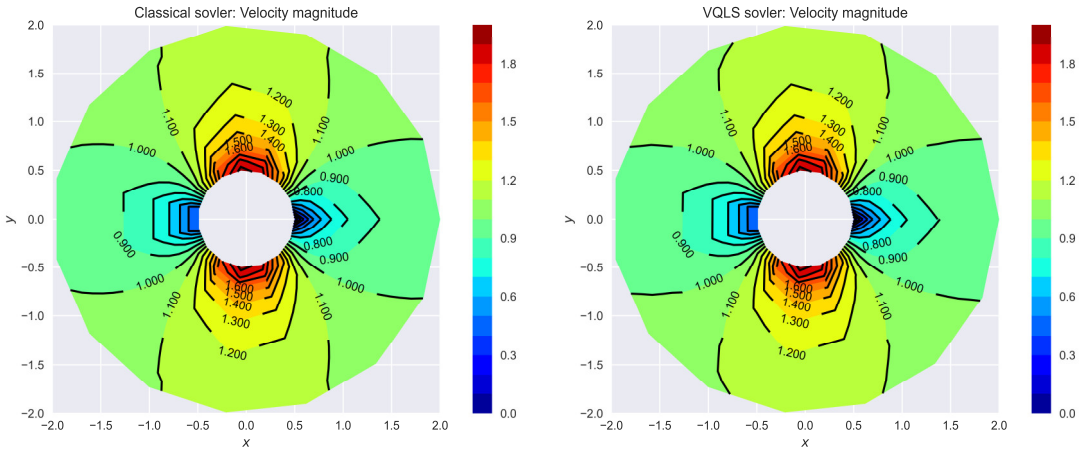
经典求解器（d）和本文提出的基于 VQLS 的求解器（e）；经典求解器（f）和本文提出的基于 VQLS 的求解器（g）得到的速度矢量。



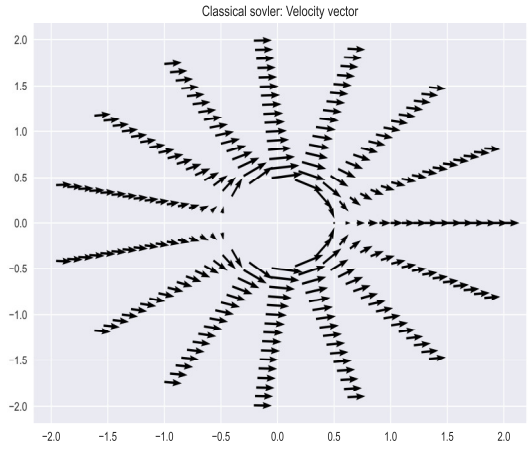
(a)



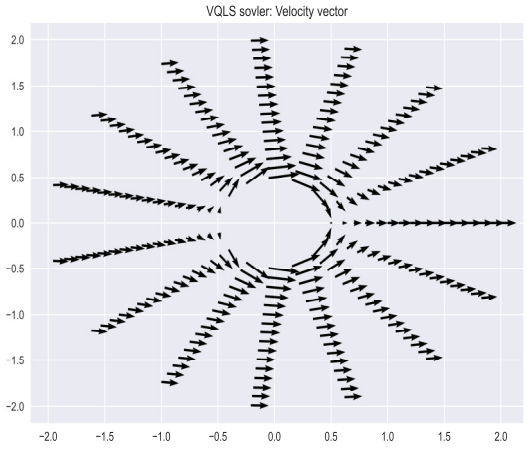
(b) (c)



(d) (e)



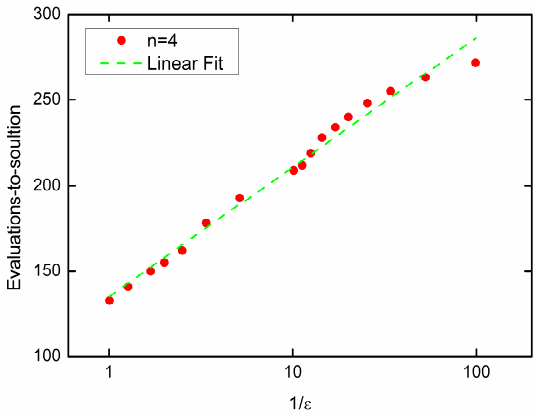
(f)



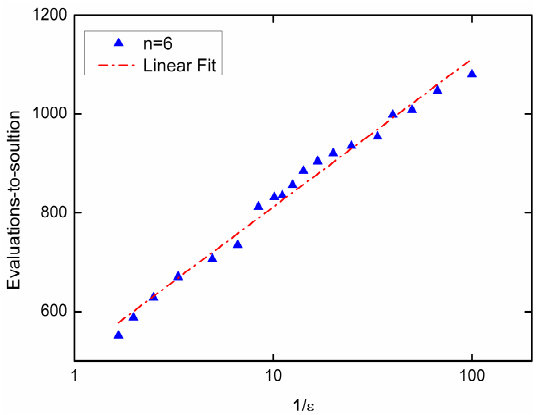
(g)

图5。 当$N = 16$ 且$\varepsilon = 0.01$时，圆柱周围势流的结果:

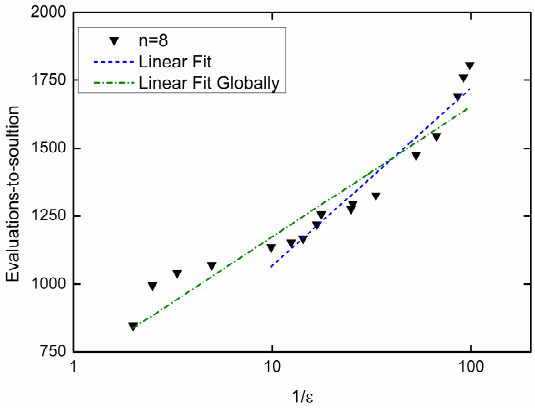
解的比较（a）；经典求解器（b）和本文提出的基于 VQLS 的求解器（c）得到的流函数；经典求解器（d）和本文提出的基于 VQLS 的求解器（e）得到的速度大小；经典求解器（f）和本文提出的基于 VQLS 的求解器（g）得到的速度矢量。



(a)



(b)



(c)

图6. 圆柱周围势流的启发式标度。

求解所需评估次数与 $1/\varepsilon$ 的关系：(a) $n=4$，(b) $n=6$，(c) $n=8$。x 轴 is

采用对数刻度显示。

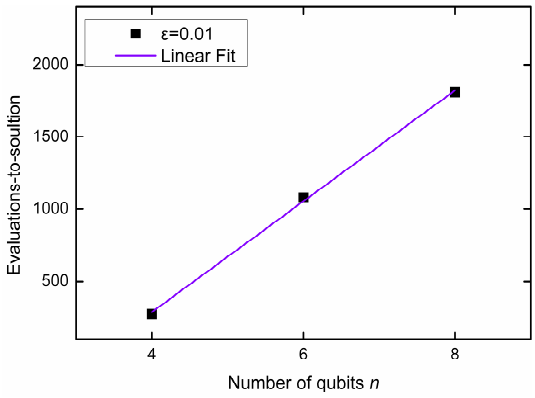


图7. $\varepsilon=0.01$ 时，势流中量子比特数量n的启发式标度

圆柱周围。

3.2. 顶盖驱动方腔中的斯托克斯流

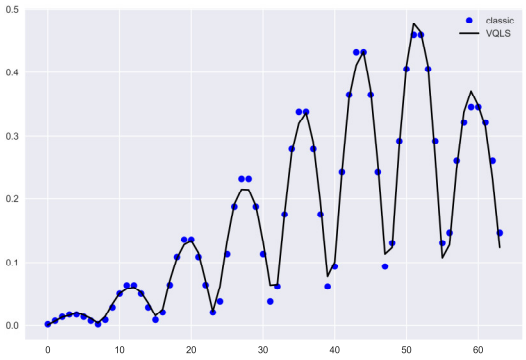
由于该斯托克斯流问题采用了两种离散化方法，因此需要由 VQLS算法求解两组线性方程组。对于采用有限差分离散的当前求解器，计算

分别在量子比特数 n = 4、6 和 8，以及网格点数 N=6、10 和 18 的条件下进行。对于所有模拟，代价函数可能会出现平台期；当前基于 VQLS 的求解器得到的解分布和等值线与经典求解器得到的结果吻合良好。图 8 和图 9 分别绘出了 $N = 10$ 和 18 时的模拟结果。当 $N = 10$ 时，经典求解器与基于 VQLS 的求解器所得结果略有差异，这可能是由于试探态采用了随机初始参数以及优化器未达到最优所致。图 9 所示的高度一致性验证了当前方法求解该斯托克斯流问题的准确性。

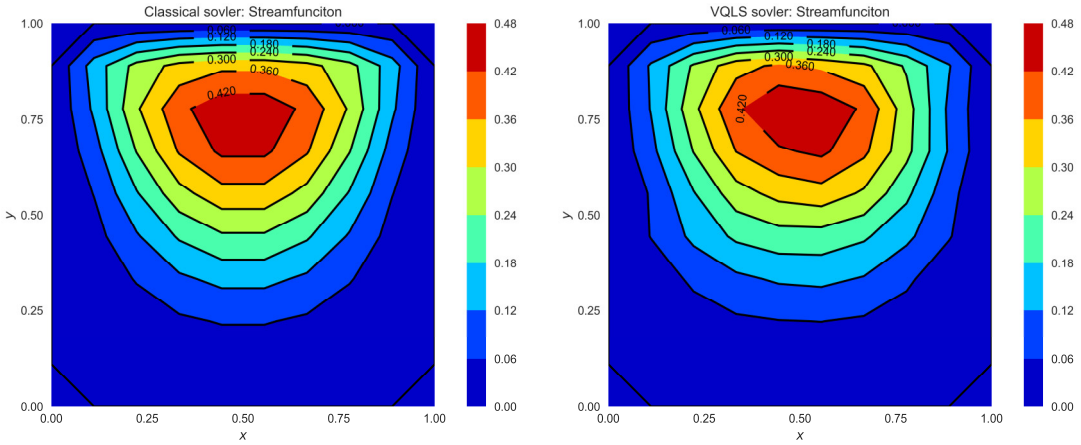
对于采用 GDQ 离散进行的计算，两个方向上的网格点均选取为第二类切比雪夫节点。为便于比较，采用包含$N = 10$ 个网格点的网格来模拟该斯托克斯流问题。通过应用前文介绍的 GDQ 离散过程，得到矩阵A和相应的向量$\vec{b}$ 。由所有内部网格点构成的矩阵A的大小为64×64 ，随后可将矩阵A分解为 4042 项。计算结果如图 10 所示。需要注意的是，由于采用了高阶广义微分求积离散，所得解具有五阶精度（对于四阶偏导数的近似），而非中心有限差分格式的二阶精度。从图 10 (a)-(c) 中流函数数值及其等值线的对比可以看出，经典求解器与本文提出的基于 VQLS 的求解器所得结果吻合良好。此外，通过对高阶 GDQ 解进行插值

在包含 100×100 个网格点的加密均匀网格上，采用 GDQ 离散方法计算得到的流线如图 10 (d) 所示。显然，图 10 (d) 中展示的高阶 GDQ 结果与参考文献 [43] 给出的结果吻合良好。相比之下，图 8 (b) 和 (c) 中给出的二阶有限差分结果与参考数据的差异要大得多。这一观察结果清楚地表明，本文采用 GDQ 离散的方法具有更高的精度。

此外，通过启发式标度研究了此情形下的时间复杂度。由于在均匀网格上可以直接开展启发式标度研究，因此这里只分析采用有限差分离散的基于 VQLS 的方法。通过采用与第 3.1 小节类似的标度策略进行数值实验，启发式地确定了求解所需评估次数与 $1/\varepsilon$ 之间的关系。如图 11 所示，x 轴采用对数刻度绘制，对于所有 n 值，数据几乎都可以用线性函数拟合。这一观察结果表明，$1/\varepsilon$ 标度近似为对数关系。此外，还确定了达到所需精度 $\varepsilon = 0.1$ 时与 n 或 N 的标度关系，相应结果见图 12。结果发现，其对 n/N 的依赖关系似乎分别为线性/对数关系。因此，可以得出结论：当前基于 VQLS 的方法在量子比特数 n 和精度 ε 方面具有良好的标度特性，可高效模拟斯托克斯流。



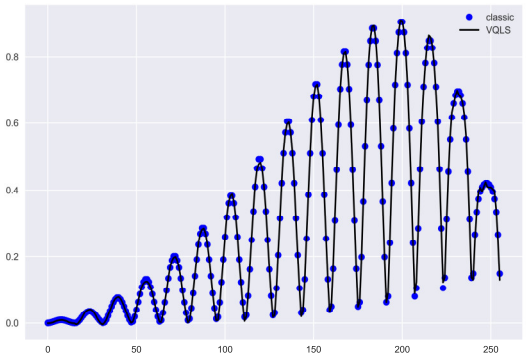
(a)



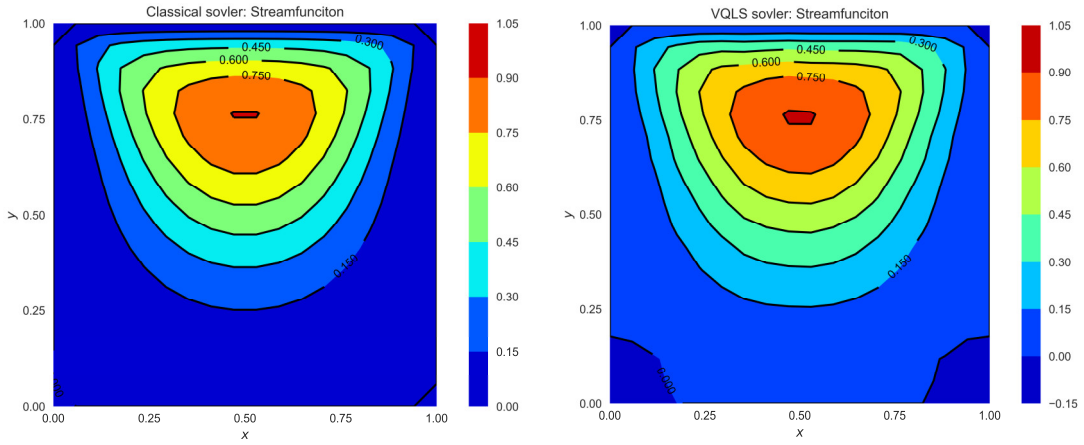
(b) (c)

图 8. 当$N = 10$ 和 $\varepsilon = 0$时，顶盖驱动方腔中的斯托克斯流结果。1：解的比较 (a)；经典求解器获得的流函数 (b)

以及本文提出的基于 VQLS 的求解器 (c)。

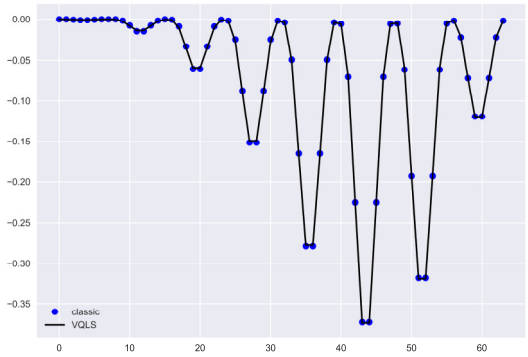


(a)

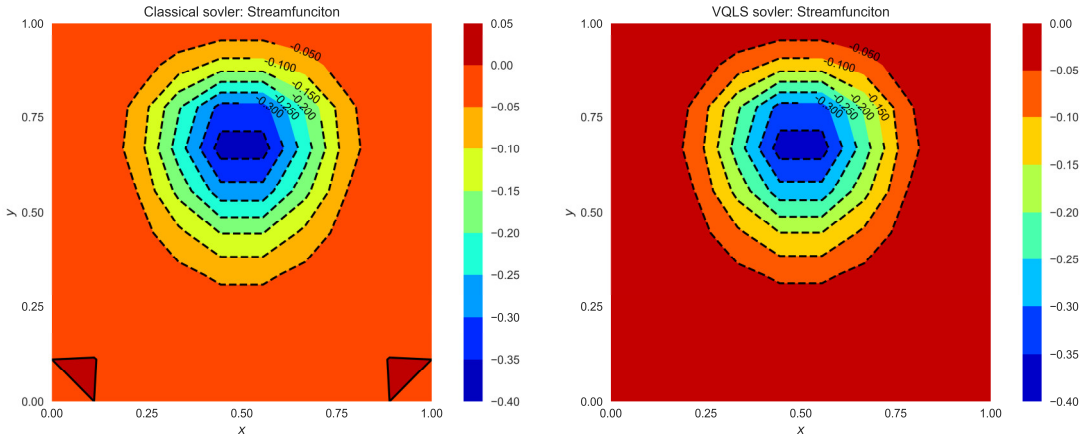


(b) (c)

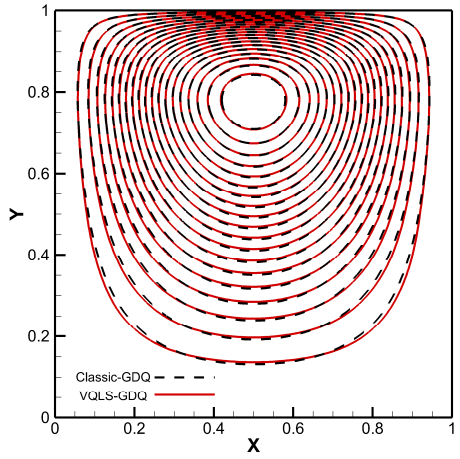
图 9. 当$N = 18$ 和 $\varepsilon = 0$时，顶盖驱动方腔中的斯托克斯流结果。1：解的比较（a）；经典求解器获得的流函数（b）以及本文提出的基于 VQLS 的求解器（c）。



(a)



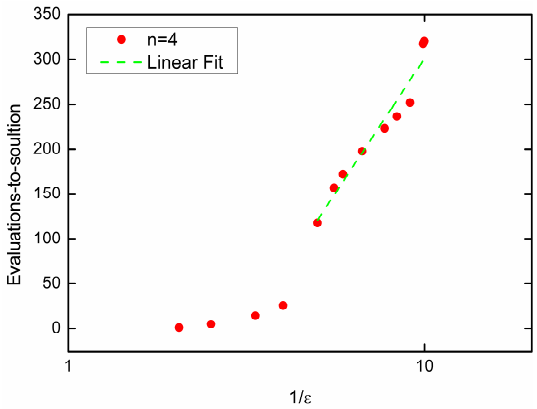
(b) (c)



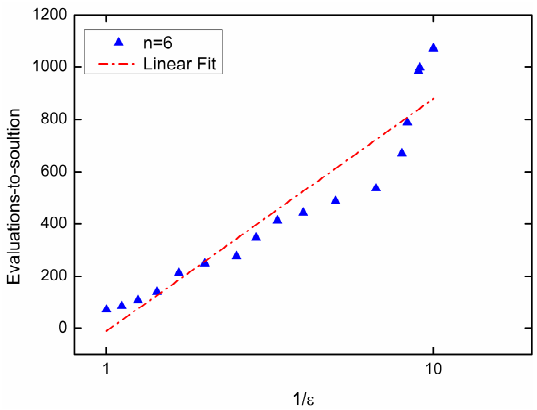
(d)

图 10. 当$N = 10$ 和 $\varepsilon = 0.01$ 时，顶盖驱动方腔中的斯托克斯流结果:

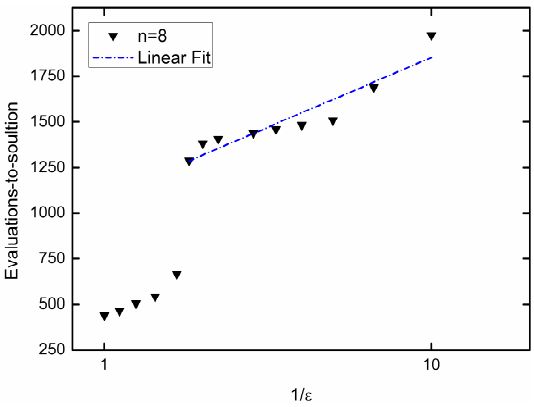
解的比较（a）；采用广义微分求积离散的经典求解器（b）和本文采用广义微分求积离散的基于 VQLS 的求解器（c）获得的流函数；后处理后经典求解器与采用广义微分求积离散的基于 VQLS 的求解器计算所得流线的比较。



(a)



(b)



(c)

图 11. 顶盖驱动方腔中斯托克斯流的启发式标度。

求解所需评估次数与 $1/\varepsilon$ 的关系，其中 (a) $n = 4$，(b) $n = 6$，以及 (c) $n = 8$。x 轴 is 以对数刻度显示。

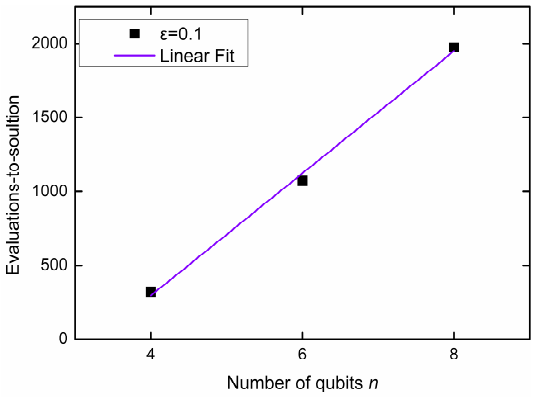


图 12. 当 $\varepsilon = 0.1$ 时，斯托克斯流中的量子比特数n的启发式标度，适用于顶盖驱动方腔。

4. 结论

本文提出一种基于变分量子线性求解器的直接数值方法，以有效求解势流和斯托克斯流的控制方程。该方法采用有限

差分法和广义微分求积法对控制方程进行离散。结合适当的边界条件，可得到相应的线性方程组。需要注意的是，有限差分法和广义微分求积法所得到的线性方程组在结构和规模上有所不同。由于 GDQ 方法具有高阶精度，在要求相同精度时，其对应的线性方程组规模更小。此外，这些线性方程组由变分量子线性求解器直接求解。通过这种方式，量子计算的巨大潜力得以应用于流体问题的数值模拟。

通过在量子模拟器上求解两个具有代表性的问题，即圆柱绕流势流和顶盖驱动方腔中的斯托克斯流，验证了本方法的准确性和适用性。此外，还根据数值结果考察了时间复杂度。结果表明，本量子-经典混合数值方法在精度和量子比特数量方面均具有良好的扩展性。尽管本研究模拟的问题规模不大，复杂程度也不高，但本方法确实为将量子计算与经典计算流体力学求解器相结合提供了切实可行的探索和良好范例。基于目前取得的良好结果，我们相信，本方法有望成为未来高效求解工程问题的一种可行方案。

利益冲突声明

作者声明，他们不存在可能影响本文所述研究的已知竞争性经济利益或个人关系。

参考文献

[1] Jameson, A., Ou, K., 2011. 跨声速飞行器设计的50年发展。《航空航天科学进展》47(5) 308-318。[2] Hahn, A., 2010. 1月。车辆草图平台：用于概念飞行器设计的参数化几何建模器。载于第48届AIAA航空航天科学会议（包括New Horizons论坛和航空航天展览会）（第657页）。[3] Perez, T., 2006. 船舶运动控制：使用舵和鳍进行航向保持与横摇稳定。施普林格科学与商业媒体公司。[4] Bertram, V., 2011. 实用船舶水动力学。Elsevier。[5] Bennetts, L.G., Peter, M.A., Craster, R.V., 2018. 用于水波空间频率分离与放大的梯度谐振器阵列。《流体力学杂志》854。[6] Fang, Q., Hong, R., Guo, A., Stansby, P.K. Li, H., 2018. 基于势流理论分析斜向波作用下海岸桥梁淹没桥面所受水动力。《海洋工程》169, 242-252。[7] Han, M.M., Wang, C.M., 2022年。基于势流理论的多孔及开孔防波堤解析与数值建模：综述。《海洋工程》249, 110897。[8] Ducrozet, G., Bonnefoy, F., Perignon, Y., 2017. 高度非线性势流求解器在水波研究中的适用性与局限性。《海洋工程》142, 233-244。[9] Casasso, A., Sethi, R., 2015. 地下水热泵中热循环现象的建模

（GWHPs）。《可再生能源》77, 86-93。

[10] Lauga, E., Powers, T.R., 2009. 游动微生物的流体动力学。《物理学报告》72(9), 096601.

[11] Guasto, J.S., Johnson, K.A., Gollub, J.P., 2010. 二维中微生物游动诱导的振荡流。《物理评论快报》105(16), 168102.

[12] Lauga, E., Stone, H.A., 2003. 压力驱动的斯托克斯流中的有效滑移。《流体力学杂志》489, 55-77.

[13] Discacciati, M., Miglio, E., Quarteroni, A., 2002. 地表水流与地下水流耦合的数学模型和数值模型。《应用数值数学》43(1-2), 57-74.

[14] Baxter, W., Liu, Y., Lin, M.C., 2004. 用于交互式应用的黏性颜料模型。Comput. Animat. Virtual Worlds 15(3-4), 433-441.

[15] Ho, C.M., Tai, Y.C., 1998. 微机电系统（MEMS）与流体流动。《流体力学年度评论》30，579-612。

[16] Tornberg, A.K., Shelley, M.J., 2004. 斯托克斯流中柔性纤维的动力学与相互作用模拟。《计算物理学杂志》196(1)，8-40。

[17] Spalart, P.R., Venkatakrishnan, V., 2016. 计算流体力学在航空航天工业中的作用与挑战。《航空学杂志》120（1223），209-232。

[18] Givi, P., Daley, A.J., Mavriplis, D., Malik, M., 2020. 航空科学与工程学中的量子加速，《美国航空航天学会杂志》58，3715。

[19] Bharadwaj, S.S.、Sreenivasan, K.R.，2020。《流体

动力学的量子计算》。
arXiv:2007.09147。

[20] Zylberman, J., Di Molfetta, G., Brachet, M., Loureiro, N.F., Debbasch, F., 2022年。《混合量子-经典流体动力学算法》。arXiv:2202.00918。

[21] Itani, W., 2021。《流体动力学家需要将量子力学纳入工具箱》。https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03129398v2。

[22] Harrow, A.W., Hassidim, A., Lloyd, S., 2009。《线性方程组量子算法》。《物理评论快报》103, 150502。

[23] Montanaro, A., Pallister, S., 2016。《量子算法与有限元方法》。《物理评论A》93, 032324。

[24] Chen, Z.Y., Xue, C., Chen, S.M., Lu, B.H., Wu, Y.C., Ding, J.C., Huang, S.H., Guo, G.P., 2021。《用于计算流体力学的经典输入输出量子有限体积法》。arXiv:2102.03557。

[25] Wang、S.、Wang、Z.、Li、W.、Fan、L.、Wei、Z.、Gu、Y.，2020。量子快速泊松求解器：算法及完整模块化电路设计。《量子信息处理》19，1。

[26] Berry、D.W.、Childs、A.M.、Ostrander、A.、Wang、G.M.，2017。具有精度指数改进依赖性的线性微分方程量子算法。《数学物理通讯》356，1057。

[27] Costa、P.C.、Jordan、S.、Ostrander、A.，2019。模拟波动方程的量子算法。《物理评论A》99，012323。

[28] Lubasch, M., Joo, J., Moinier, P., Kiffner, M., Jaksch, D., 2020. 用于非线性问题的变分量子算法。《物理评论A》101, 010301。

[29] Yang, Y., Shan, Z., Zhao, B., Xu, L., 2021. 变分量子算法及其在非线性方程中的应用。载于《物理学杂志：会议系列》1883, 012007，IOP出版社。

[30] Liu, Y.Y., Chen, Z., Shu, C., Chew, S.C., Khoo, B.C., Zhao, X., Cui, Y.D., 2022年. 变分混合量子-经典算法在热传导方程中的应用. 《流体物理学》34, 117121.

[31] Liu, H.L., Wu, Y.S., Wan, L.C., Pan, S.J., Qin, S.J., Gao, F., Wen, Q.Y., 2021, 用于求解泊松方程的变分量子算法. 《物理评论A》104, 022418.

[32] Martín-Guerrero, J.D., Lamata, L., 2022年. 量子机器学习：教程. 《神经计算》470, 457.

[33] Góes, C.B., Maciel, T.O., Pollachini, G.G., Cuenca, R., Salazar, J.P., Duzzioni, E.I., 2021. 用于回归问题的QBoost：求解偏微分方程. arXiv:2108.13346.

[34] Kyriienko, O., Paine, A.E., Elfving, V.E., 2021. 使用可微量子电路求解非线性微分方程。《物理评论A》103, 052416.

[35] Preskill, J., 2018. NISQ时代及未来的量子计算。《Quantum》2, 79.

[36] Bravo-Prieto, C., LaRose, R., Cerezo, M., Subasi, Y., Cincio, L., Coles, P.J., 2019. 变分量子线性求解器。arXiv:1909.05820.

[37] Patil, H., Wang, Y., Krstić, P.S., 2022年。《采用动态拟设的变分量子线性求解器》。《物理评论A》105, 012423。

[38] Xu, X., Sun, J., Endo, S., Li, Y., Benjamin, S.C., Yuan, X., 2021. 线性代数的变分算法。《科学通报》66, 2181。

[39] Huang, H.Y., Bharti, K., Rebentrost, P., 2021. 采用回归损失函数求解线性方程组的近期量子算法。《新物理学杂志》23, 113021。

[40] Cappanera, E., 2021. 有限元问题的变分量子线性求解器：泊松方程测试案例。硕士论文（代尔夫特理工大学）。

[41] Sato, Y., Kondo, R., Koide, S., Takamatsu, H., Imoto, N., 2021. 基于最小势能求解泊松方程的变分量子算法。《物理评论A》104, 052409。

[42] Shu, C., 2012. 微分求积及其在工程学中的应用。施普林格科学与商业媒体公司。

[43] Srinivasan, R., 1995. 驱动方腔中稳态平面流的精确解。I. 斯托克斯流。《应用数学与物理杂志》46, 524-545。

[44] Brubeck, P.D., Trefethen, L.N., 2022年。Lightning斯托克斯求解器。《SIAM科学计算杂志》44 A1205-A1226。

[45] Gaskell, P.H., Savage, M.D., Summers, J.L., Thompson, H.M., 1998年。封闭矩形区域中的斯托克斯流。《应用数学建模》22, 727-743。

[46] Shu, C., Richards, B.E., 1992. 应用广义微分求积求解二维不可压缩纳维-斯托克斯方程。《国际数值方法与流体杂志》15, 791-798.

[47] Shu, C., Chew, Y.T., 1997. 基于傅里叶展开的微分求积法及其在亥姆霍兹特征值问题中的应用。Commun. Numer. Methods Eng. 13, 643-653.

[48] Shende, V.V., Bullock, S.S., Markov, I.L., 2006. 量子逻辑电路的综合。IEEE Trans. Comput.-Aided Des. Integr. Circuits Syst. 25, 1000.

[49] Cerezo, M., Sone, A., Volkoff, T., Cincio, L., Coles, P.J., 2021. 浅层参数化量子电路中依赖成本函数的贫瘠高原。Nat. Commun. 12, 1791.

[50] Bergholm, V., Izaac, J., Schuld, M., Gogolin, C., Alam, M.S., Ahmed, S., Arrazola, J.M., Blank, C., Delgado, A., Jahangiri, S., McKiernan, K., 2018. PennyLane：量子-经典混合计算的自动微分。arXiv:1811.04968.

[51] Pellow-Jarman, A.、Sinayskiy, I.、Pillay, A.、Petruccione, F.，2021。《变分量子线性求解器的各种经典优化器比较》。《量子信息处理》20，1。

[52] Kingma Diederik, P.、Jimmy, J.B.，2014。《ADAM：一种用于随机优化的方法》。arXiv:1412.6980。

[53] Borle, A.、Elfving, V.、Lomonaco, S.J.，2021。《针对线性代数难题的量子近似优化》。SciPost Phys. Core 4，031。