

---

caption

---



中国科学院大学  
University of Chinese Academy of Sciences

# 硕士学位论文

基于TDD的量子模型检测中的可达性分析

作者姓名：高丁超

指导教师：应圣钢 副研究员 中国科学院软件研究所

学位类别：理学硕士

学科专业：计算机科学与技术

培养单位：中国科学院软件研究所

2024 年 6 月



**LaTeX Thesis Template of UCAS**

**A thesis submitted to  
University of Chinese Academy of Sciences  
in partial fulfillment of the requirement  
for the degree of  
Master of Philosophy  
in Computer Applied Technology**

**By**

**Author Name**

**Supervisor: Professor LI Si**

**Institute of xxx, Chinese Academy of Sciences**

**June, 2024**



## 中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。承诺除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体享有著作权的研究成果，未在以往任何学位申请中全部或部分提交。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人或集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日 期：

## 中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关收集、保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则，保留并向国家指定或中国科学院指定机构送交学位论文的电子版和印刷版文件，且电子版与印刷版内容应完全相同，允许该论文被检索、查阅和借阅，公布本学位论文的全部或部分内容，可以采用扫描、影印、缩印等复制手段以及其他法律许可的方式保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：





## 摘 要

中文摘要、英文摘要、目录、论文正文、参考文献、附录、致谢、攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果等均须由另页右页（奇数页）开始。

**关键词：** 中国科学院大学，学位论文，模板



## **Abstract**

Chinese abstracts, English abstracts, table of contents, the main contents, references, appendix, acknowledgments, author's resume and academic papers published during the degree study and other relevant academic achievements must start with another right page (odd-numbered page).

**Key Words:** University of Chinese Academy of Sciences, Thesis, LaTeX Template



## 目 录



**图目录**

**表目录**





## 符号列表

## 字符

Symbol	Description	Unit
$R$	the gas constant	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
$C_v$	specific heat capacity at constant volume	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
$C_p$	specific heat capacity at constant pressure	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
$E$	specific total energy	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
$e$	specific internal energy	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
$h_T$	specific total enthalpy	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
$h$	specific enthalpy	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$
$k$	thermal conductivity	$\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{K}^{-1}$
$S_{ij}$	deviatoric stress tensor	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
$\tau_{ij}$	viscous stress tensor	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
$\delta_{ij}$	Kronecker tensor	1
$I_{ij}$	identity tensor	1

## 算子

Symbol	Description
$\Delta$	difference
$\nabla$	gradient operator
$\delta^\pm$	upwind-biased interpolation scheme

## 缩写

CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy
EOS	Equation of State
JWL	Jones-Wilkins-Lee
WENO	Weighted Essentially Non-oscillatory
ZND	Zel'dovich-von Neumann-Doering



## 第1章 研究背景

模型检测（Model Checking）是一种自动化形式方法，用于验证有限状态系统的性质。模型检测最初由 E. M. Clarke 和 E. A. Emerson 提出<sup>[2][3]</sup>，如今已广泛应用于软件和硬件设计。例如，在嵌入式系统中，可以使用 UML 活动图来验证硬件是否符合规范<sup>[2]</sup>。

模型检测将待检测的系统建模为一个跃迁系统(transition system)，在时序逻辑(temporal logic)中指定待验证的属性。给定模型 $M$  和属性 $\varphi$ ，模型检测将验证是否 $M$ 满足 $\varphi$ 。在不同的模型检测方法中，高级符号模型检查（Advanced Symbolic Model Checking）<sup>[2]</sup>使用简化的有序二叉决策图（Reduced Ordered Binary Decision Diagrams, ROBDDs 或 BDDs）<sup>[2]</sup>来表示状态集合和转移关系。通过迭代调用图像计算算法来计算所有可达状态，判断一个模型是否满足时间属性，直到达到不动点为止。

最近，随着量子计算的发展，关于量子线路的验证技术也在不断发展<sup>[2][3]</sup>。其中，利用模型检测方法对线路进行自动化验证也有了一些应用。由于量子线路运算空间随着量子比特的线性增加而指数级膨胀，传统的计算方法并不能很好应对。因此本次研究希望应用基于张量网络(tensor network)的张量决策图(tensor decision diagrams)进行量子模型检测。

### 1.1 量子计算简介

量子计算机(quantum computer)是一种利用量子比特特性进行计算的一种设备。在量子计算中，量子比特的特殊性质允许其同时处于多种状态，这与经典比特的二进制状态不同。量子计算机的状态空间可以用希尔伯特空间(Hilbert space) $\mathcal{H}$ 表示<sup>[2]</sup>，即可以进行内积运算(inner product)的复向量空间。比特状态可以用 $\mathcal{H}$ 的向量表示，量子门由 $\mathcal{H}$ 上的酉算子(unitary operator)表示。

量子线路(quantum circuit)是一种描述量子计算的模型。在量子线路中，通过量子比特的初始化、应用量子门、测量以及其他可能的操作的序列来构建和执行量子计算任务。量子线路通常从左向右阅读，每个量子门的作用是将输入的量子比特状态转变为输出状态，该过程可以认为是量子门的酉矩阵与输入的量子状态的乘积。

图?? 所示的量子线路展示了一个具体的量子线路示例。其中有单比特门 $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ ,  $T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/4} \end{bmatrix}$ ，以及双比特门 $CX = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ 。假设该量子线路的初始状态为 $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$ ，则输出状态为 $T \otimes H \cdot CX \cdot T \otimes H \cdot |\psi\rangle$ 。

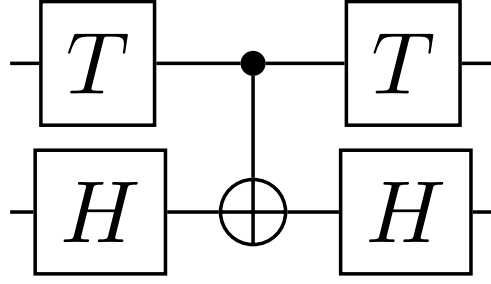


图 1-1 一个量子线路的例子

在量子计算机上可以执行各种算法和计算任务，如量子搜索<sup>[2]</sup>、量子因子分解<sup>[2]</sup>和量子模拟<sup>[2]</sup>等。量子计算的潜力在于其能够在某些特定问题上比经典计算机更高效地进行计算，尤其在处理大规模数据和解决复杂问题方面具有潜在优势。需要对这部分深入了解的读者，可以自行阅读<sup>[2]</sup>。

## 1.2 跃迁系统

跃迁系统广泛应用于模型检测中待检测系统的建模，其定义为<sup>[2]</sup>：

$$\mathcal{M} = \{S, Act, \rightarrow, I\} \quad (1-1)$$

其中 $S$ 为系统状态集合， $I$ 为系统初态集合，因此满足 $I \subseteq S$ 。 $Act$ 为系统行为集合。 $\rightarrow$ 为系统状态转移关系，即 $\rightarrow \subseteq S \times Act \times S$ 。此外还有 $AP$ 为描述系统原子命题。 $L$ 是标记函数，将状态映射为状态满足的原子命题集合。需要验证的属性 $\varphi$ 将表述为命题。

系统的有限路径片段 $\pi$ 是一个有限状态序列 $s_0, s_1 \dots s_n$ 。 $s_i$ 满足 $s_{i-1} \xrightarrow{a} s_i, a \in Act$ , 对于所有 $0 < i \leq n$ ，其中 $n \geq 0$ 。无限路径片段 $\pi$ 是一个无限状态序列 $s_0, s_1 \dots$ ，使得对于所有 $i > 0, s_{i-1} \xrightarrow{a} s_i, a \in Act$ 。在路径中 $\pi[i] = s_i, \pi[i] = s_i \dots$ 。所有以 $s_0$ 为开始的路径，构成了路径集合 $Path(s_0)$ 。

图?? 所示的跃迁系统展示了一个简化版的售货机模型。在该模型中，用户投入硬币，进行选择后就可以得到苏打水或者啤酒。在该例子中，系统状态 $S = \{pay, select, soda, beer\}$ ，系统初态 $I = pay$ 。系统行为 $Act = \{insert\_coin, \tau, get\_soda, get\_beer\}$ ，其中 $\tau$ 表示立即行动符号。转移关系图中已经展示。原子命题可取 $AP = \{paid, drink\}$ 。因此 $L(pay) = \{\emptyset\}$ ， $L(soda) = L(beer) = \{paid, drink\}$ ， $L(select) = \{paid\}$ 。系统的一个路径是 $\pi = pay \ select \ soda \ pay \ select \dots$ 。此时 $\pi[1] = select, \pi[1] = select \ soda \ pay \ select \dots$ 。同时该路径满足 $\pi \in Path(pay)$ 。量子模型检测的跃迁系统类似。区别在于状态空间用 $\mathcal{H}$ ，转移关系用酉矩阵。一个量子自

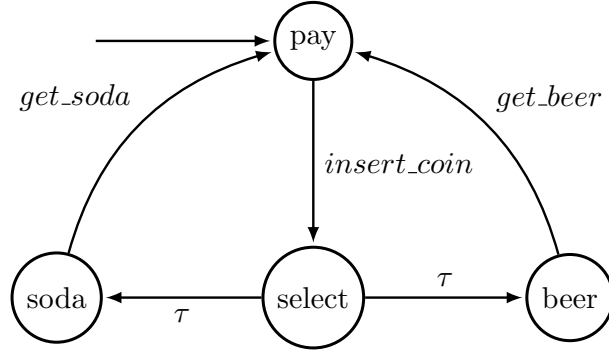


图 1-2 一种简化版的售货机跃迁系统

动机定义如下：

$$\mathcal{M} = \{\mathcal{H}, Act, \{U_\alpha, \alpha \in Act\}, \mathcal{H}_0\} \quad (1-2)$$

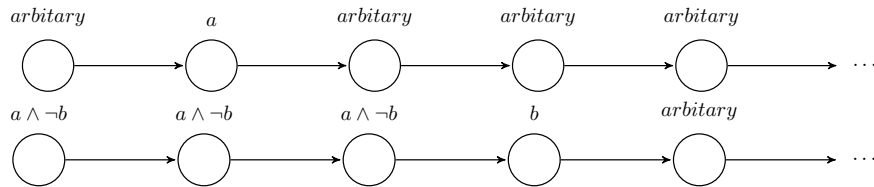
下面介绍模型检测中的使用的时序逻辑。

### 1.3 时序逻辑的验证

在量子模型检测中，与经典模型检测一样使用时序逻辑指定待验证的属性 $\varphi$ 。时序逻辑命题的运算符有两类<sup>[2]</sup>。状态命题公式(State formulas):  $\varphi ::= a \mid \exists\varphi \mid \forall\varphi \mid \neg\varphi \mid \varphi \wedge \psi$ ，其中 $a \in AP$ 。以及路径命题公式(Path formulas):  $\varphi = O\varphi \mid \varphi U\psi$ 。给定模型的一个状态为 $s$ ，路径为 $\pi$ ，则具体满足条件分别如下：

- $s \models a, \text{ iff } (s) \models a$
- $s \models \exists\varphi, \text{ iff } \pi \models \varphi \text{ 对一些 } \pi \in Path(s)$
- $s \models \forall\varphi, \text{ iff } \pi \models \varphi \text{ 对所有 } \pi \in Paths$
- $s \models \neg\varphi, \text{ iff } s \not\models \varphi$
- $s \models \varphi \wedge \psi, \text{ iff } s \models \varphi \text{ and } s \models \psi$
- $\pi \models O\varphi, \text{ iff } \pi[1] \models \varphi$
- $\pi \models \varphi U\psi, \text{ iff } \exists j \geq 0. \pi[j] \models \psi \text{ 同时对所有 } 0 \leq i < j \text{ 有 } \pi[i] \models \varphi$

图?? 展示了两种路径命题公式的直观示意图。


 图 1-3  $\pi \models Oa$ 与  $\pi \models aUb$ 的图示

在模型检测中，有三类比较重要的可达性问题，分别是可达性、持续可达性以及重复可达性。过程中主要涉及以下路径命题公式： $\diamond$ 表示最终(eventually)，

$\Box$ 表示总是(always),  $\Diamond$ 表示总是最终(always eventually),  $\Box\Diamond$ 表示最终总是(eventually always)。其中 $\Diamond$ 和 $\Box$ 具体定义为:

- $\Diamond\varphi \stackrel{\text{def}}{=} \text{True}U\varphi$
- $\Box\varphi \stackrel{\text{def}}{=} \neg\Diamond\neg\varphi$

图??展示了这两种基本路径命题公式的直观示意图。

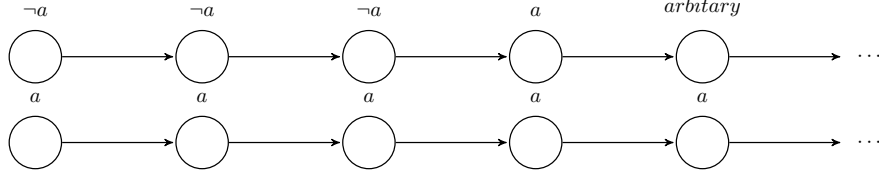


图 1-4  $\pi \models \Diamond a$  与  $\pi \models \Box a$  的图示

具体的可满足条件为:

- $\pi \models \Diamond\varphi, \text{ iff } \exists j \geq 0. \pi[j] \models \varphi$
- $\pi \models \Box\varphi, \text{ iff } \forall j \geq 0. \pi[j] \models \varphi$
- $\pi \models \Diamond\Box\varphi, \text{ iff } \exists i \geq 0. \forall j \geq i, \pi[j] \models \varphi$
- $\pi \models \Box\Diamond\varphi, \text{ iff } \forall i \geq 0. \exists j \geq i, \pi[j] \models \varphi$

基于此三种可达性问题定义分别如下:

- 可达性:  $Pr^M(s \models \Diamond G) = Pr^M(\pi \models \Diamond G : \pi \in \text{Paths}(s))$
- 持续可达性:  $Pr^M(s \models \Diamond\Box G) = Pr^M(\pi \models \Diamond\Box G : \pi \in \text{Paths}(s))$
- 重复可达性:  $Pr^M(s \models \Box\Diamond G) = Pr^M(\pi \models \Box\Diamond G : \pi \in \text{Paths}(s))$

## 1.4 量子模型检测

目前量子的模型检测, 主要使用Birkhoff-von Neumann Quantum Logic来描述量子系统的性质<sup>[21]</sup>。Birkhoff-von Neumann量子逻辑是一种非经典逻辑, 用于描述量子力学中事件的逻辑结构。它由 Birkhoff 和 von Neumann 在 1936 年首次提出。在量子逻辑中, 命题的集合不再形成布尔代数, 而是形成一个投影算子的正交完备格, 这与传统的逻辑系统不同。

在 Birkhoff-von Neumann 量子逻辑中, 量子系统的状态可以由希尔伯特空间(Hilbert space)来描述, 每个量子命题对应希尔伯特空间的一个闭子空间。对于系统的状态  $|\psi\rangle$ , 如果它属于某个特定的闭子空间  $\mathcal{X}$ , 我们可以说这个命题是真的。

例如, 考虑以下量子逻辑命题:

- 命题  $\mathcal{X}$ : 在时间  $t$  时, 量子粒子的位置  $x$  坐标在区间  $[a, b]$  内。
- 命题  $\mathcal{Y}$ : 在时间  $t$  时, 量子粒子的动量  $y$  坐标在区间  $[a, b]$  内。

这些命题  $\mathcal{X}$  和  $\mathcal{Y}$  可以通过粒子的状态希尔伯特空间的特定子空间来表示。

在数学上, 这种逻辑结构可以使用格理论(lattice theory)来描述, 其中格中的元素对应于量子事件, 格的操作则对应于逻辑运算。在确定了原子命题后,

需要引入连接词，这些连接词可以用来构建更复杂的命题，以描述量子系统的复杂属性。在语义上，这些可以被视为在希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 的一个子空间 $S(\mathcal{H})$ 中的代数操作。具体如下：

- 子空间之间的包含关系 $\subseteq$ 在 $S(\mathcal{H})$ 中是一个偏序关系，它可以理解为量子逻辑的蕴含（元逻辑）。
- 一个子空间 $\mathcal{X}$ 的正交补 $\mathcal{X}^\perp$ 在量子逻辑中用作否定的解释。
- $S(\mathcal{H})$ 对交集是封闭的，即对于 $S(\mathcal{H})$ 中的任何元素族 $\{\mathcal{X}_i\}$ ，都有 $\bigcap_i \mathcal{X}_i \in S(\mathcal{H})$ 。在量子逻辑中用于表示合取。
- 对于一组子空间 $\{\mathcal{X}_i\}$ ，它们的并集定义为 $\bigvee_i \mathcal{X}_i = \text{span}(\bigcup_i \mathcal{X}_i)$ 。在量子逻辑中，析取被解释为并集。

$(S(\mathcal{H}), \cap, \vee, \perp)$  构成一个正交模糊格， $\subseteq$  是其排序，这是 Birkhoff–von Neumann 量子逻辑的代数模型。

在实际应用中，通常只选择 $S(\mathcal{H})$ 的一个子集 $\mathbf{AP}$ 作为原子命题的集合。 $\mathbf{AP}$ 中的元素可以被认为是真正关心的那些命题，而其他的可能是不相关的。出于算法目的，通常假设 $\mathbf{AP}$ 是可数的甚至是有限的 $S(\mathcal{H})$ 的子集，而不是 $S(\mathcal{H})$ 本身，因为 $S(\mathcal{H})$ 是不可数无限的。

因此给定一组原子命题集 $\mathbf{AP}$ ，对于 $\mathcal{X} \in S(\mathcal{H})$ ，如果状态 $|\psi\rangle$ 满足集合中所有命题的交集，我们说 $|\psi\rangle$ 满足 $\mathcal{X}$ 。所以在量子模型检测中，计算系统状态是一件非常重要的事情。而量子计算中状态空间 $\mathcal{H}$ 维度 $\dim(\mathcal{H}) = 2^n$ ，其中 $n$ 为比特数量。即状态空间维数随比特个数指数级增长。这为计算量子系统状态带来了困难。

借助更好的数据结构，可以用更少的资源表示量子状态以及量子线路，并计算最终的结果。比如TDD给出了量子电路的紧凑表示，提供了一种方便的实现张量网络各种操作的方式，这些操作对于模拟量子物理系统非常重要。图??展示了一个矩阵和TDD形式，其中TDD中的实线表示高边，虚线表示低边。可以明显看到TDD的结构更紧凑。

TDD特别适用于实现可达性分析和模型检查算法。这是因为基于BDD的模型检查算法中使用的许多优化技术可以推广到收缩量子电路张量网络上<sup>[21]</sup>。这些为应用TDD解决量子模型检测问题提供了可能的方案。

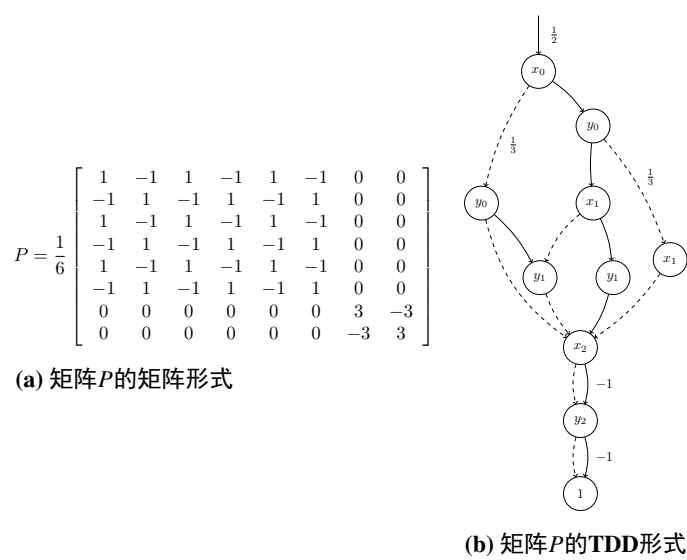


图 1-5 应用TDD可以减少存储特殊矩阵的资源



## 第2章 研究现状

随着量子计算硬件规模的快速增长，量子电路的验证成为一个重要问题。开始的研究主要集中在BDD在量子计算下的推广算法，如量子信息决策图(Quantum Information Decision Diagram, 或QuIDD)<sup>[21]</sup>，量子多值决策图(Quantum multiple-valued Decision Diagram, 或QMDD)<sup>[21]</sup>等，从而对组合式量子电路进行等效性检查。显然，随着越来越复杂的物理可实现化的硬件出现，将会出现更加复杂的，更加针对的，新的验证问题。比如量子存储<sup>[21]</sup>，量子反馈网络<sup>[21]</sup>，RUS量子电路<sup>[21]</sup>。量子模型检测可以为量子电路的验证提供了更多思路。

量子系统模型检测的早期工作旨在验证量子通信协议<sup>[22]</sup>。后来还有针对分析和验证量子程序的应用<sup>[21]</sup>，比如量子自动机<sup>[21]</sup>、量子马尔可夫链<sup>[21]</sup>和超算符值马尔可夫链<sup>[21]</sup>的模型检测技术。然而，在这些量子模型检测技术与它们在验证量子电路方面实际应用之间存在巨大差距仍需填补。TDD作为新的数据结构，极大加快了计算过程，有可能深化二者的联系，加快实际应用的出现。

### 2.1 类似技术

TDD是一种相对较新的数据结构，用于表示和操作张量网络。张量网络提供了量子线路更紧凑的表现形式。在张量网络领域，目前除了TDD外目前还有直接使用张量网络，QMDD<sup>[21]</sup>，以及ZX-calculus<sup>[21]</sup>。

QMDD (Quantum Multiple-Valued Decision Diagrams)，即量子多值决策图提供了一种紧凑而系统的方法来描述量子过程。图??展示了一个矩阵到最终QMDD的一个过程。目前QMDD已有效地用于量子电路的合成<sup>[21]</sup>和验证任务<sup>[22]</sup>。

图??展示了ZX-calculus中量子计算基本门的形式。图??展示了ZX-calculus的基本化简规则。将一个量子线路中的比特门表示为Z-calculus后化简，从而进行验证。

目前ZX-calculus发展还比较早期。图??展示了目前各种比较成熟的表示方法下模拟量子电路的时间对比。其中TDD No Part指的是不对电路进行拆分优化的方法；TDD part I 和 TDD part II 指的是两种不同的电路拆分优化方法；QMDD指的是Quantum Multiple-valued Decision Diagrams；TN是指google的tensor network。可以看到TDD相比其他有一定优势。因此本次研究选择TDD作为主要技术。

目前，TDD研究集中在开发更有效的算法来使用TDD操作和收缩张量网络。这包括开发新技术来分割张量网络，优化TDD结构，从而进一步提高基于TDD的可达性分析和模型检测算法的效率。这也是实现基于TDD的量子模型检测的主要方法。

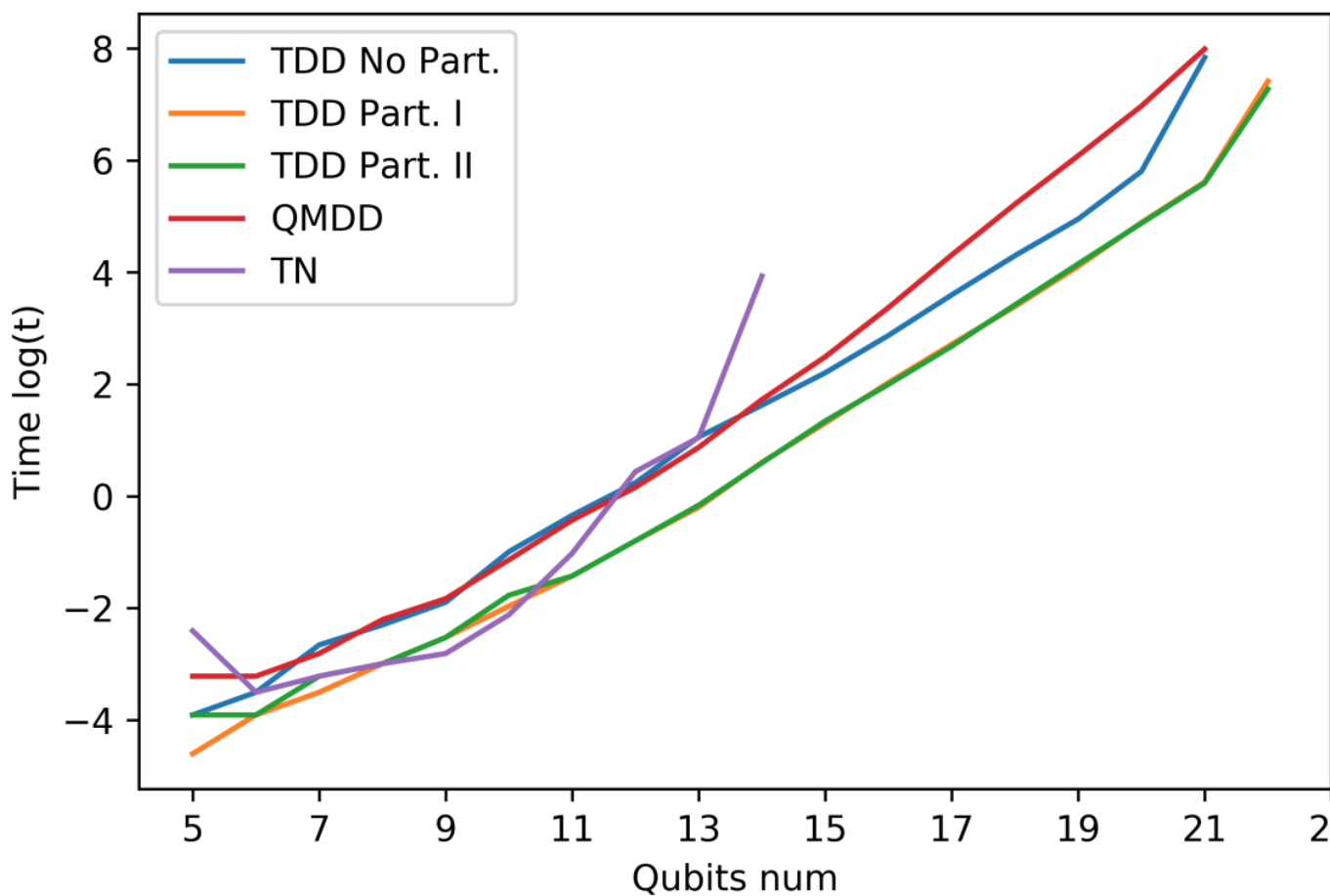


图 2-1 一个QMDD的示例

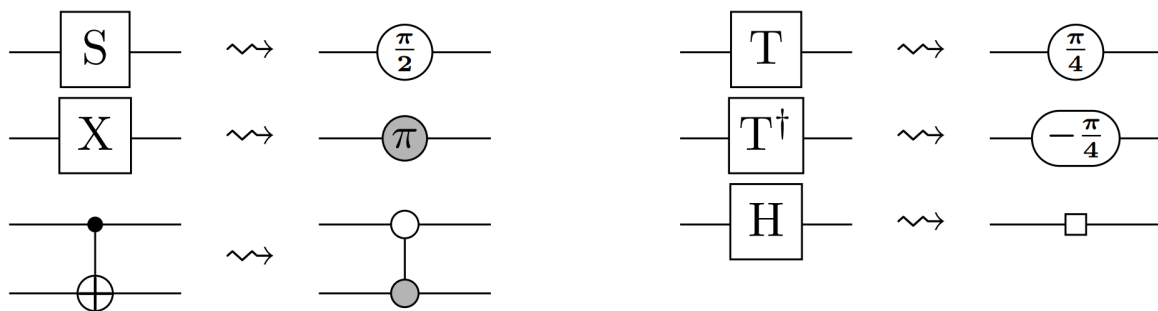


图 2-2 量子计算基本门在ZX-calculus的表示

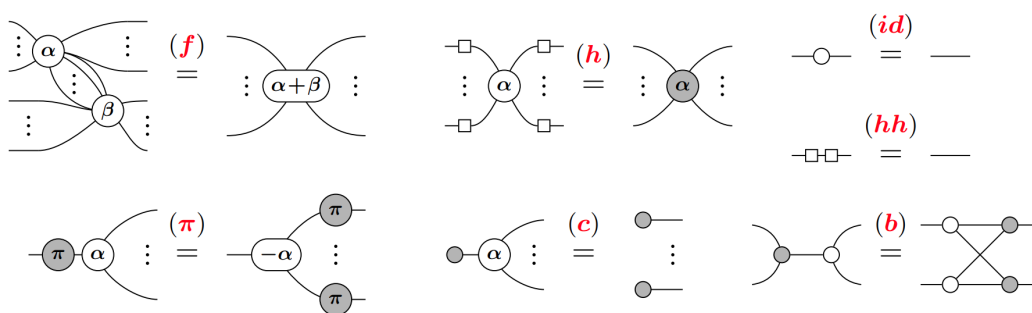
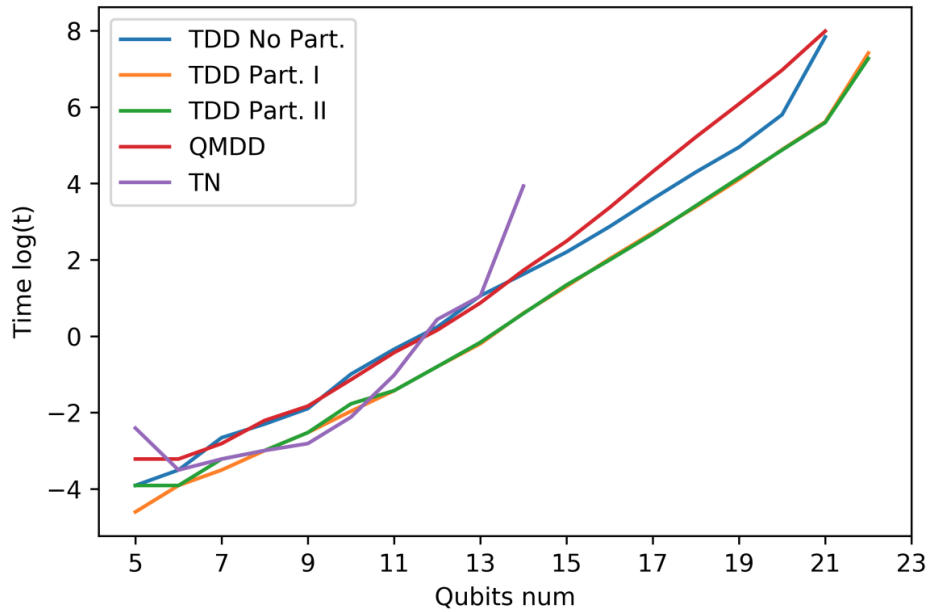


图 2-3 ZX-calculus的基本化简规则

图 2-4 TDD与其他实验方法的比较<sup>[2]</sup>

## 2.2 研究趋势

量子系统的模型检测尚处于起步阶段，尤其是在量子硬件验证方面。未来量子模型检测的最重要目标是寻找一类更简单易于检测的属性。过去的研究追求的是普遍性，即只针对检查量子系统的一般可达性和时间逻辑属性。然而，为了实现这一目标，模型检测的效率非常低，且仅适用于非常小规模和深度较小的量子电路。因此，需要确定一类更简单易于检测的属性，以便当前的量子模型检测工具可以高效地进行检测<sup>[2]</sup>。这需要更多在时序逻辑上的研究工作。但同时更实用的模型检测工具也能在研究相关属性起到一定帮助。



## 第3章 系统设计与实现

### 3.1 预期目标

image computation指的是通过当前系统状态与转移关系，计算下一步系统状态。在模型检测中，image computation是关键的一步。过去传统模型检测已发展出多种高效的计算算法，特别是利用二叉决策图（BDDs）符号性表示初始状态和转移关系，以及利用状态空间划分和电路划分加速图像计算过程。然而，量子系统的模型检测尚处于起步阶段。本次研究的重要目标就是利用TDD，构建量子系统的image computation，从而为未来的工作奠定基础。

考虑到量子计算的特殊性，可以利用一系列的优化策略，主要包括基于张量网络的结构特性和TDD的有效性能。通过这些优化，可以提升量子图像计算的效率，尤其是在处理复杂量子系统时的性能表现。

### 3.2 研究方法

本次研究的主要目的是借助TDD数据结构，构建能快速计算量子模型检测中可达问题的方案。本次研究的主要挑战在于尽可能减少程序的运行时间以及空间资源。为此，需要采用一系列方法来开发更有效的算法，以优化TDD操作和收缩张量网络。其中包括开发新技术来分割张量网络和优化TDD结构。下面简单介绍以下具体研究方法。

- a) 关于常用的量子线路划分方法，第一种被称为addition<sup>[2]</sup>。将量子电路视为张量网络，首先将一个量子电路C转换成无向图G。G中的每个节点表示量子电路的一个索引，并且如果它们是相同门的输入或输出索引，则在G中连接两个节点。并且当满足以下两个条件之一时输入和输出索引不变：

- 是对角线量子门的输入和输出索引；
- 是受控门的控制比特位的输入和输出索引。

图??展示了Grover\_3电路图的索引链接图。该图描述了量子电路的连通性，通过选择图中连通度最大的索引可以对电路进行分割。因此选择图中连通度较大的 $x_1^1, x_1^3, x_2^1$ 可以对电路进行较好的划分。

- b) 另一种常用的电路划分方法成为contraction。在这一方法中，将量子电路划分为若干个较小的部分，其收缩等于原始电路。对于两个预设整数参数k1和k2，将电路划分为若干小电路。其中每个小电路涉及最多k1个量子比特，并且与至多跨越不同部件的k2个多比特门相连。图??展示了对Bit flip电路进行k1=3,k2=2的拆分结果。
- c) 在BDD中，索引的顺序很重要。因为索引顺序会直接影响BDD的大小。一个良好的变量顺序可以使得BDD比一个糟糕的变量顺序小得多。图??的了两张图都表示布尔函数 $f(x_1, \dots, x_8) = x_1x_2 + x_3x_4 + x_5x_6 + x_7x_8$ ，但图??的结构

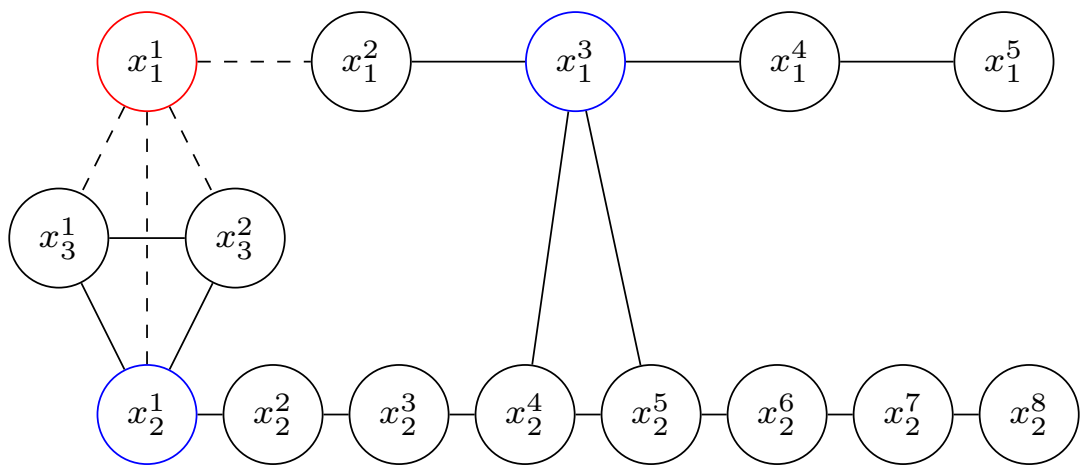


图 3-1 Grover\_3的索引连接图

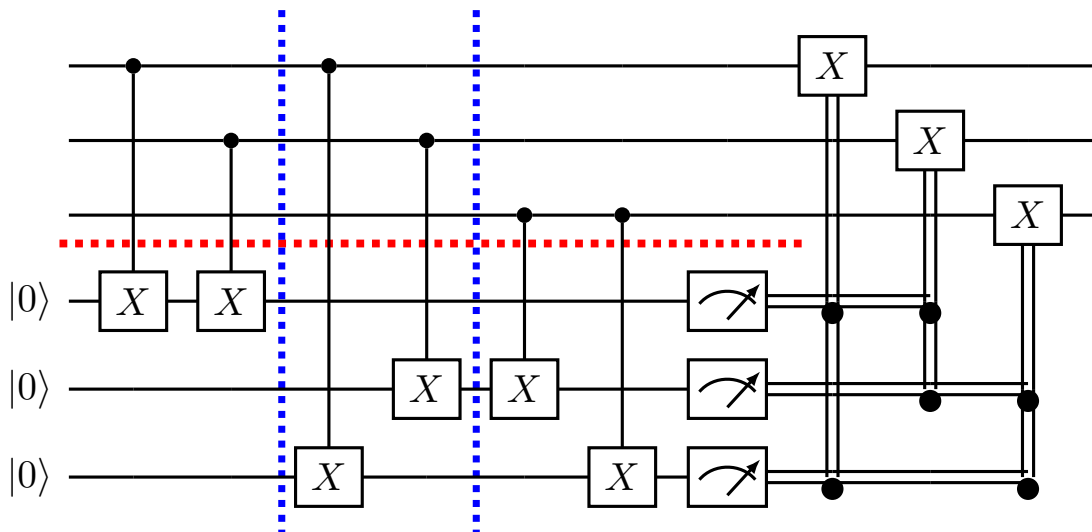


图 3-2 对Bit flip电路进行contraction的拆分

更简单。其中图??的索引顺序为 $\{x_1, x_3, x_5, x_7, x_2, x_4, x_6, x_8\}$ ，图??的索引顺序为 $\{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8\}$ 。找到一个好的索引顺序是一个NP问题。在工程实现中，目前只能通过小规模电路上寻求规律，然后在更大规模电路中应用较优顺序。

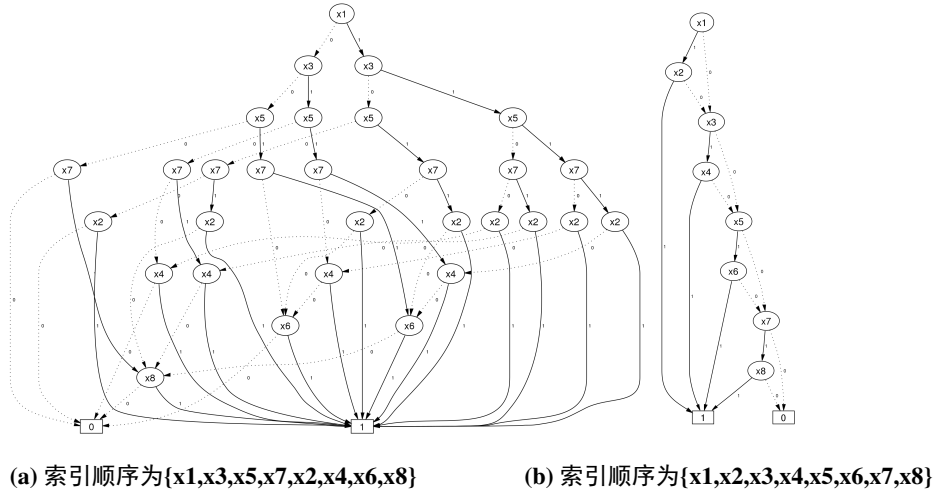
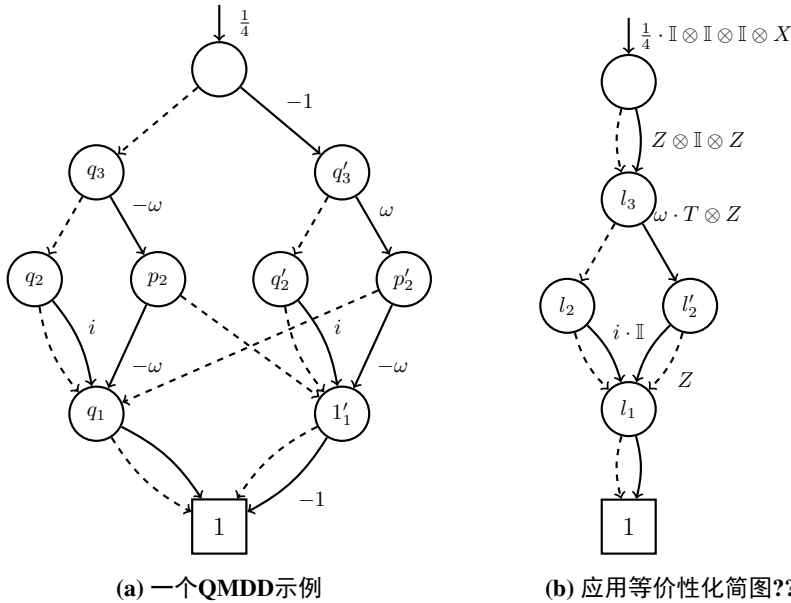


图 3-3 同一布尔函数在不同索引顺序下的结构图<sup>[2]</sup>

- d) 由于量子状态都在同一希尔伯特空间中。因此作用某些算子后，不同的量子状态可能等价。当存储算子的资源少于存储状态的资源时，就有可能存储算子表示不同的状态<sup>[2]</sup>。图??表示了一个QMDD的例子，应用等价性，可以化简为图??。TDD也可以应用类似技术，进行进一步化简，从而降低资源要求。



### 3.3 软件系统实现

为了实现软件的高效运行，模块化设计至关重要。每个模块在软件系统中扮演着关键角色，并且具有特定的功能和目的。以下是本次毕业设计中软件必须包含的模块及其重要性的说明：

- **输入处理模块：**该模块的主要职责是处理输入数据，例如接收用OpenQASM格式编写的量子算法代码。其核心功能是将这些代码转换为TDD表示形式。鉴于当前存在多种量子编程语言，此模块的模块化处理能够显著提升系统的灵活性和兼容性。

- **内存管理模块：**本模块负责管理TDD节点的存储和维护。当创建新的TDD节点时，它会运用哈希算法与现有节点进行对比，以避免重复创建相同节点。这种方法不仅减少了内存占用，还提高了处理效率。

- **TDD基础模块：**该模块主要执行TDD节点的压缩操作，或者导出TDD的树状结构图。节点收缩是TDD核心的运算过程，而树状结构图的导出功能则有助于用户更好地理解和分析TDD的结构。

- **TDD算法模块：**此模块为TDD提供更复杂的算法支持。例如，它能够调整节点收缩的顺序，以优化系统运行效率。此外，它还能执行其他高级功能，如检验TDD是否存在于特定子空间中。



## 第4章 研究进展以及存在的问题

### 4.1 学术成果

以下是目前的研究成果：

- 论文题目：Image Computation for Quantum Transition Systems
- ICCAD 2023 投稿情况：
  - \* 论文编号：568
  - \* 审稿结果：投稿被拒
  - \* 审稿人评分：2，4，4
- DAC2024 投稿情况：
  - \* 当前状态：在投
  - \* 预期反馈日期：2024年2月26日前

### 4.2 研究内容进展

在模型检测中，image computation指的是在给定当前状态 $s_i \in S$ 和行为 $\alpha \in Act$ 的情况下计算接下来的状态。目前，在Intel Xeon-Gold-5215 CPU，512GB RAM的硬件平台上，关于使用TDD对量子的image computation的计算已经完成。图??表示了对Grover搜索算法运行不同image computation算法的资源对比。图??表示了对quantum Fourier transform（QFT）算法运行不同image computation算法的资源对比。图??表示了对Bernstein–Vazirani（BV）算法运行不同image computation算法的资源对比。图??表示了对Greenberger–Horne–Zeilinger（GHZ）状态制备电路运行不同image computation算法的资源对比。图??表示了对在 $2^n$ 环上的quantum random walk（QRW）算法运行不同image computation算法的资源对比。

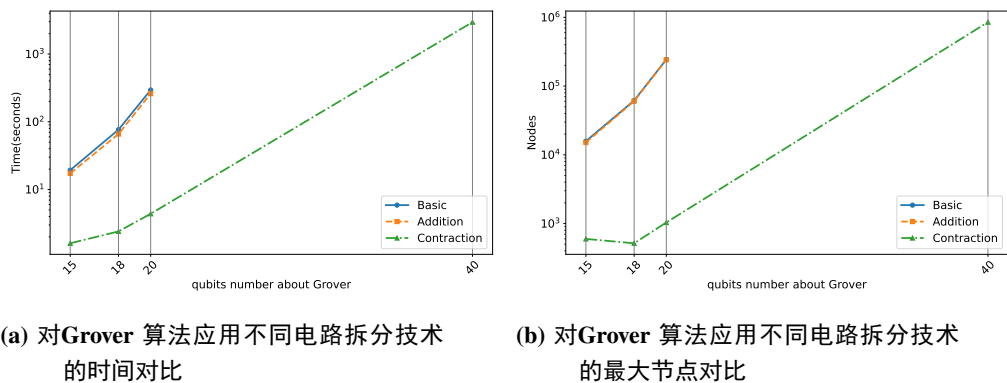
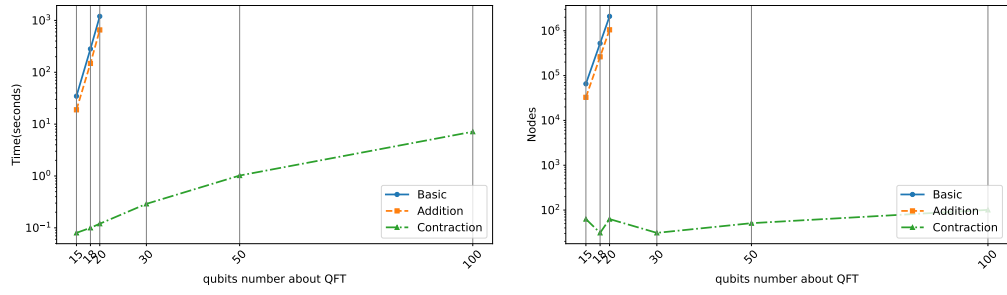


图 4-1 对Grover算法运行image computation时不同电路拆分技术的资源对比

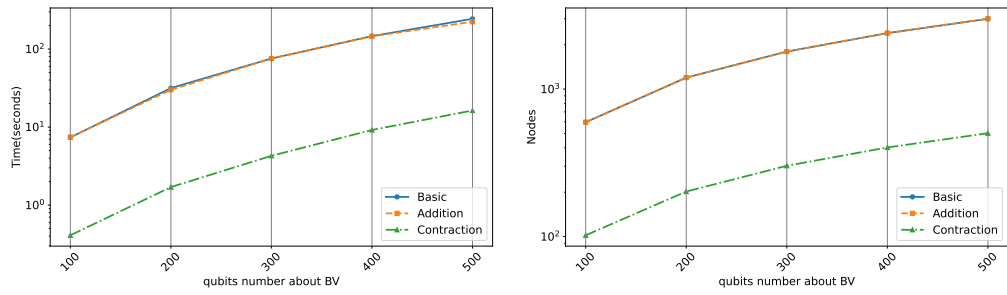
表??给出了在不同电路拆分技术下具体的各类算法的计算时间，单位为秒，max node表示计算过程中TDD的节点最大个数。其中basic表示没有使用优化技



(a) 对QFT 算法应用不同电路拆分技术的时间对比

(b) 对QFT 算法应用不同电路拆分技术的最大节点对比

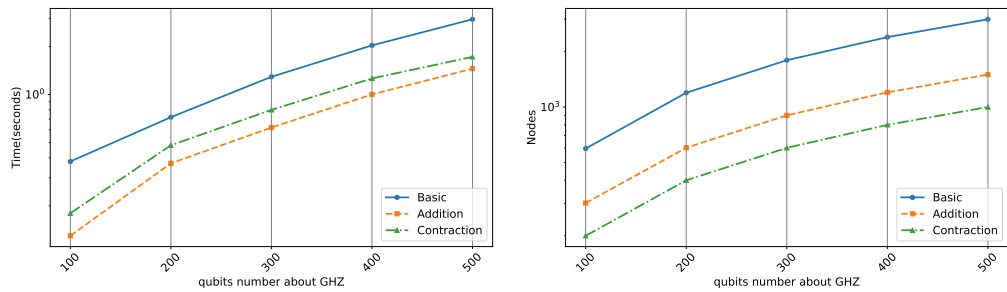
图 4-2 对QFT算法运行image computation时不同电路拆分技术的资源对比



(a) 对BV 算法应用不同电路拆分技术的时间对比

(b) 对BV 算法应用不同电路拆分技术的最大节点对比

图 4-3 对BV算法运行image computation时不同电路拆分技术的资源对比



(a) 对GHZ 算法应用不同电路拆分技术的时间对比

(b) 对GHZ 算法应用不同电路拆分技术的最大节点对比

图 4-4 对GHZ算法运行image computation时不同电路拆分技术的资源对比

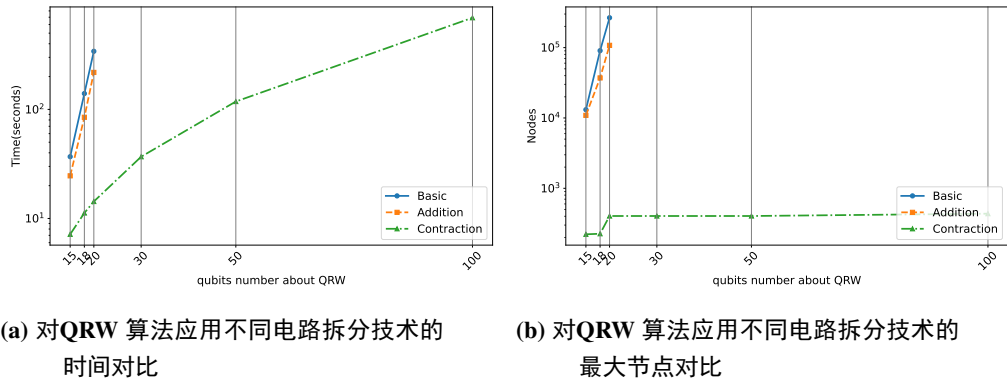


图 4-5 对QRW算法运行image computation时不同电路拆分技术的资源对比

术，addition表示使用研究方法??的addition优化技术，contraction表示使用研究方法??中的contraction优化技术。“-”表示超过一小时的运行上限。

通过对比不同优化技术下的计算时间，可以看到使用优化技术能够显著降低计算时间。例如，在Grover-20的例子中，使用"contraction"优化技术的情况下，计算时间从294秒降低到了4秒。这表明优化技术在提高计算效率方面起到了积极的作用。

同时，表??展示了对同一线路，即Grover\_15应用不同的addition参数的时间，可以看到合适的参数选择也是非常重要的。

在技术实现上，构建了两个版本的量子线路转化为TDD的工具，分别基于C语言和Python语言。这些工具的开发对于实现我们的研究方法至关重要，提高了实验的灵活性和效率。其中的C语言的TDD支持任意维度张量，例如对双比特CNOT门，既可以按图??中的张量维度为4，即按照索引为 $q_1, q_0$ 进行表示。也可以按图??中的张量维度为4，即按照索引为 $q_3, q_2, q_1, q_0$ 进行表示。这样的设计大大提高了TDD的表示能力，为更复杂系统的验证提供了基础。

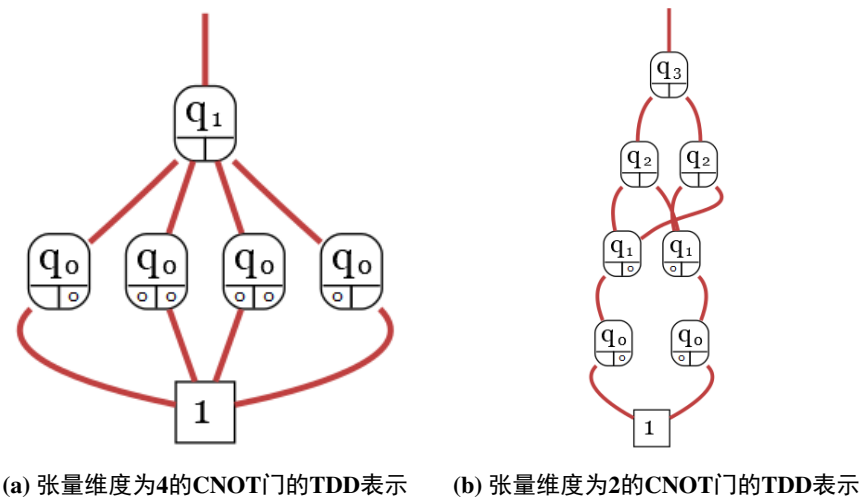


图 4-6 C语言版的TDD支持任意维度的例子

Benchmark	basic		addition		contraction	
	time	max #node	time	max #node	time	max #node
Grover_15	19.33	15785	17.35	15099	1.61	597
Grover_18	76.47	61694	66.02	60332	2.41	516
Grover_20	294.65	243946	259.87	241240	4.39	1036
Grover_40	-		-		2953.57	851973
QFT_15	34.64	65536	18.88	32770	0.08	63
QFT_18	282.12	524288	148.13	262146	0.10	31
QFT_20	1199.21	2097152	655.19	1048578	0.12	63
QFT_30	-		-		0.29	31
QFT_50	-		-		1.02	51
QFT_100	-		-		7.14	101
BV_100	7.36	596	7.43	596	0.41	102
BV_200	31.57	1196	30.03	1196	1.70	202
BV_300	75.66	1796	75.56	1796	4.28	302
BV_400	146.47	2396	145.40	2396	9.18	402
BV_500	244.15	2996	223.90	2996	16.31	502
GHZ_100	0.38	595	0.13	301	0.18	200
GHZ_200	0.72	1195	0.37	601	0.48	400
GHZ_300	1.29	1795	0.62	901	0.80	600
GHZ_400	2.03	2395	1.00	1201	1.26	800
GHZ_500	2.96	2995	1.45	1501	1.72	1000
QRW_15	36.86	13122	24.59	10882	7.16	222
QRW_18	139.76	90538	84.69	37064	11.23	226
QRW_20	341.05	265614	218.29	107714	14.31	404
QRW_30	-		-		36.82	404
QRW_50	-		-		118.08	404
QRW_100	-		-		692.08	436

表 4-1 对不同测试实验应用image computation

k1 k2	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	2.8	2.2	2.1	2.0	1.9	2.0	2.1	2.0	2.1	2.0	2.0	2.1	2.2	2.1	2.1
3	2.2	1.9	1.8	1.6	2.0	1.9	2.1	2.1	2.5	2.3	2.7	2.3	3.1	2.8	3.3
4	2.3	1.8	2.0	1.7	2.0	2.1	2.2	2.1	2.6	2.3	2.8	2.7	3.3	3.0	3.3
5	2.2	1.7	1.9	1.6	1.9	2.0	2.3	1.9	2.5	2.3	2.8	2.7	3.4	3.0	3.6
6	2.1	1.5	1.8	1.7	2.2	1.9	2.5	2.2	2.9	2.8	3.1	2.9	3.7	3.7	4.2
7	2.1	1.5	1.9	1.6	2.2	1.9	2.5	2.2	2.8	3.0	3.6	3.3	4.2	5.7	5.0
8	2.0	1.7	1.8	1.7	2.1	2.0	2.4	2.2	2.8	2.8	3.7	3.4	4.3	4.8	5.2
9	2.1	1.5	2.0	1.4	2.2	2.0	2.5	2.0	3.3	2.9	3.7	3.5	4.9	4.7	5.8
10	2.3	1.9	2.3	1.6	2.6	2.7	3.1	2.2	4.0	3.6	4.6	3.9	5.6	5.2	7.5
11	3.2	3.2	3.5	3.1	4.7	4.2	5.6	4.2	6.8	7.2	7.6	6.3	9.0	8.1	11
12	5.6	6.0	7.2	6.0	8.3	9.0	8.9	7.8	11	11	12	11	12	15	16
13	11	12	14	12	15	18	18	15	18	20	18	32	32	30	25
14	20	21	24	32	31	44	77	50	86	109	68	133	70	119	142
15	28	30	31	53	69	111	85	81	102	153	114	130	166	162	235

表 4-2 对grover\_15应用不同的addition 参数

### 4.3 学术论文进展

在学术论文撰写方面的进展包括：

- 完成了学术论文中关于研究背景的详细调查和综述，这部分内容主要包括了量子模型检测的背景知识与重要性。
- 撰写了研究内容的方法论部分，详细描述了主要的研究方法和实验设计。阐述了我们的研究方法，并详细介绍了方法的实施步骤和预期目标。

### 4.4 目前存在的问题

在本研究过程中，主要遇到了两个问题，这些问题对研究的深入发展和实际应用产生了重要影响。

首先，面临的一个关键挑战是如何将所提出的方法扩展应用到更大规模的实例。这不仅涉及到算法的效率问题，还包括数据处理能力的提升。对于实现验证量子计算算法在更广泛领域的应用至关重要。为了解决这一挑战，目前采用电路拆分方法来降低 TDD 的资源消耗，并挖掘可能的并行计算机会。此外，还计划应用更灵活的索引策略和 limdd 的思路，以期达到更高效的处理效果。

其次，另一个重要的问题是如何将研究方法应用于更加实用的示例。这是将理论研究转化为实际应用的关键一步。目前考虑的主要方向是将此方法应用到量子线路设计，即 QDA（Quantum Design Automation）领域。计划未来能够将本研究成果应用于不同的 synthesis 算法的验证等价性中，从而在量子计算的的实际应用中发挥更大的作用。



## 第5章 下一步的工作计划和答辩时间

### 5.1 未来的进度安排

中期报告之后，目前的进度安排如下：

- 2024.01至2024.02：进行工具性能测试、优化和评价。在这个阶段，我将对已实现的基于TDD的量子模型检测工具进行性能提升。特别的，考虑在实际场景中应用已完成的工具。根据测试结果，对工具进行必要的优化和改进，以提高其计算效率和准确性。同时，结合实验结果和评估数据，对工具的性能进行客观评价，并提出可能的改进方案。

- 2024.03至2024.04：总结研究工作并撰写硕士论文。在这个阶段，我将对整个研究过程进行总结和归纳，梳理研究中的重要发现和创新点。然后，撰写硕士论文，包括引言、相关工作、方法设计、实验结果、分析和讨论等部分，以完整而准确地呈现研究成果。此外，还将对未来可能的研究方向和改进方案进行探讨和展望。

- 2024.04至2024.05：总结工作，准备答辩。在这个阶段，我将深入分析整个硕士研究过程中的关键成就和挑战。我将准备详细的答辩演示，包括对主要研究成果的展示、研究方法的阐述、以及对研究局限性的诚实评估。同时，我也将为可能的答辩问题进行充分的准备，确保能够对评审委员会的任何疑问提供清晰、准确的回答。此外，我将与导师密切合作，确保论文和答辩的质量达到最高标准。

### 5.2 预计答辩时间

一切顺利的话，预计我的硕士论文答辩将于2024年5月进行。答辩前，我将进行广泛而深入的准备工作，确保能够充分展示我的研究成果和对学术领域的理解。这将包括对论文的每一部分进行细致的复习，以及对答辩过程中可能提出的问题进行预演和准备。





## 附录一 附录中的公式

对公式的引用如，公式(??)

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{V}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V}) \end{cases} \quad (\text{附1-1})$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{V}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V}) \end{cases} \quad (\text{附1-2})$$

mathtext:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ , mathnormal:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ , mathrm:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ .  
 mathbf:  **$A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$** , mathit:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ , mathsf:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ .  
 mathtt:  $A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$ , mathfrak:  $\mathfrak{A}, \mathfrak{F}, \mathfrak{L}, 7, 8, , \sigma$ , mathbb:  $\mathbb{A}, \mathbb{F}, \mathbb{L}, \mathbb{E}, \mathbb{H}, \mathbb{A}, \sigma$ .  
 mathcal:  $\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathcal{L}, \in, \exists, \nabla, \sigma$ , mathscr:  $\mathscr{A}, \mathscr{F}, \mathscr{L}, , , , \sigma$ , boldsymbol:  **$A, F, L, 2, 3, 5, \sigma$** .  
 vector:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$ , unitvector:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$   
 matrix:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$ , unitmatrix:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$   
 tensor:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$ , unittensor:  $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}, \mathbf{a}, \mathbf{F}, \mathbf{n}$



附录二 附录中的图表

附表测试

附表 2-1 这是一个样表  
App Table 2-1 This is a sample table

行号	跨多列的标题							
Row 1	1	2	3	4	5	6	7	8

附表 2-2 这是一个样表  
App Table 2-2 This is a sample table

行号	跨多列的标题							
Row 1	1	2	3	4	5	6	7	8

附图测试



附图 2-1 这是一个样图  
App Figure 2-1 This is a sample figure

注: 对图片的注释



## 致 谢

此处填写致谢。

2023年6月



## 作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果

### 作者简历：

xxxx年xx月——xxxx年xx月，在xx大学xx院（系）获得学士学位。

xxxx年xx月——xxxx年xx月，在xx大学xx院（系）获得硕士学位。

xxxx年xx月——xxxx年xx月，在中国科学院xx研究所（或中国科学院大学xx院系）攻读博士/硕士学位。

### 工作经历：

### 已发表（或正式接受）的学术论文：

- (1) 已发表的工作1
- (2) 已发表的工作2

### 申请或已获得的专利：

（无专利时此项不必列出）

### 参加的研究项目及获奖情况：

