科学通报 2026 年 第 71 卷 第 13 期: 2886 ~ 2895
进 展
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

高精度曲面建模的普适性理论及其量子智能计算方法

岳天祥[1,2*], 吴晨辰[1,2], 赵娜[1,2], 刘熠[3], 王宇[3], 杜正平[1], 史文娇[1,2], 范泽孟[1,2]

1. 中国科学院地理科学与资源研究所, 地理信息科学与技术全国重点实验室, 北京 100101
2. 中国科学院大学资源与环境学院, 北京 101408
3. 北京雁栖湖应用数学研究院, 北京 101408
* 联系人, E-mail: yue@lreis.ac.cn

2025-10-29 收稿, 2025-12-22 修回, 2026-01-04 接受, 2026-02-05 网络版发表
国家自然科学基金(42530108, 42330707, 72221002)和国家重点研发计划(2024YFD1700904, 2021YFB3901300)资助

摘要 为了解决长期以来困扰曲面建模的精度与速度问题, 通过系统论、优化控制论和曲面论的有机结合, 建立了高精度曲面建模(high accuracy surface modelling, HASM)方法. 经过近20多年的数值实验和实证研究, 提出了可运用于地球表层系统、生态环境曲面、医学影像、机械制造和计算机辅助设计领域的空间插值、升尺度、降尺度、数据融合和模型-数据同化等普适性曲面建模基本定理. 针对生态环境曲面的模拟分析问题, 建立了基于差分迭代的HASM机器学习方法及其修正的共轭梯度算法、多重网格算法、适应算法和平差算法等一系列面向经典计算机的高时效算法. 它们被成功应用于各种时空尺度的生态环境要素曲面建模, 相比于其他曲面建模方法, HASM所有应用的精度都有大幅度提高. 为了解决经典计算机无法从根本上解决的运算速度慢和大内存需求问题, 我们将HASM经典机器学习方法中的矩阵求解问题转换为对应的量子计算问题, 提出了HASM量子线性求解器(HASM-HHL)和HASM迭代变分量子线性求解器(HASM-iVQLS), 并通过真实量子计算机与虚拟量子计算机的模拟实验, 对比分析了HASM-HHL和HASM-iVQLS两种量子机器学习算法的优势和劣势. 为了实现量子智能计算的实践优越性, 亟待发展经典与量子智能计算通用工具库, 并解决全栈式量子输入-计算-输出系统的关键科学技术问题.

关键词 高精度曲面建模方法, 曲面建模基本定理, 生态环境曲面, 经典机器学习, 量子机器学习, 通用工具库

1 引言

1.1 高精度曲面建模方法

自20世纪50年代以来, 随着计算科学的发展和数据的积累, 产生了许多曲面建模方法, 它们可区分为空间插值、数据融合、升尺度、降尺度和模型-数据同化以及近20年来迅速发展的各种机器学习方法. 空间插值法包括克里格法[1]、样条函数法[2,3]、规则三角网法[4]、有限元法[5~7]、趋势面分析法[8]、反距离加权法[9]和光滑逼近法[10]等. 升尺度方法包括空间平均[11]、统计升尺度[12]和离散小波变换[13]等. 降尺度方法包括各种统计降尺度[14~16]、动力学降尺度[17~19]和混合降尺度[20]. 数据融合方法包括贝叶斯方法[21]、时空适应算法[22]、地统计方法[23]、基于查表的方法[24]和广义加性模型[25]等. 模型-数据同化算法可区分为变分算法、顺序算法和混合算法[26~29]. 机器学习方法包括监督机器学习、非监督机器学习、强化机器学习和混合机器学习等[30~33].

模拟精度和运算速度问题是长期以来曲面建模面临的两个主要挑战[34]. 为了解决这些问题, 我们通过系

引用格式: 岳天祥, 吴晨辰, 赵娜, 等. 高精度曲面建模的普适性理论及其量子智能计算方法. 科学通报, 2026, 71: 2886–2895
Yue T, Wu C, Zhao N, et al. A universal theory of high-accuracy surface modeling and its quantum intelligent computing methods (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 2886–2895, doi: 10.1360/CSB-2025-5716

© 2026《中国科学》杂志社

统论、优化控制论和曲面论的有机结合，建立了高精度曲面建模(high accuracy surface modelling, HASM)方法[35]. 按照系统论, 要从系统整体出发, 将系统进行分解，在分解研究的基础上，再综合集成到系统整体, 实现系统的整体涌现，最终从整体上研究和解决问题[36]. 优化控制是指在给定的约束条件下, 寻求一个控制系统，使给定被控系统的性能指标取得最大或最小值的控制[37]. 根据曲面论基本定理, 一个曲面由第一类基本量和第二类基本量唯一决定[38]. 曲面第一类基本量表达的几何量称为内蕴量，仅由第一类基本量确定的几何性质和对象被称为内禀几何性质，这些几何性质和对象与曲面的形状无关，只与在曲面上进行的量测相关[39]; 第二基本形式是刻画曲面形状的量, 反映了曲面的局部弯曲变化程度，也就是局部曲面在所关注点与切平面的偏离, 它可在曲面之外观测获取[40].

HASM已成功应用于各种空间尺度的生态环境要素曲面建模. 例如, 地形地貌[41~43]、土壤属性[44,45]、生态多样性[46]、食物供给[47]、碳密度[48,49]、气候变化[50~52]、大气二氧化碳浓度[53,54]、土壤污染[55]等的空间插值、尺度转换、数据融合和模型-数据同化. 相比于其他曲面建模方法，HASM所有应用的模拟精度都有大幅度提高[56,57].

使用经典计算机运行HASM算法过程中，存在计算速度慢和大内存需求问题. 为了解决这些问题, 我们发展了修正的共轭梯度法(HASM-PCG)、多重网格法(HASM-MG)、适应算法(HASM-AM)和平差算法(HASM-AC)等一系列面向经典计算机的高时效算法, 使HASM从只能模拟分析2平方公里的小区域问题发展到能够在5 km×5 km空间分辨率模拟分析51000万平方公里的全球问题，提高了HASM的大数据处理能力[58].

修正共轭梯度法(PCG)是一种求解大型线性系统的加速技术, 它通过引入一个预处理算子, 使共轭梯度法以更快的速度收敛; 数值实验表明, HASM-PCG算法较其他算法运算速度平均提高254倍[41]. 基于误差平滑和粗网格校正原理的多重网格法(MG)是求解偏微分方程最快的数值方法；数值实验结果表明，在停止误差(绝对误差)为0.18的前提下，HASM-MG运算速度较HASM-PCG进一步提高了91%[59]. HASM-AM首先在较粗的栅格网进行运算，然后对误差较大的栅格进行细化后继续模拟，而对满足精度要求的栅格不再处理, 以此达到减小计算量、提高运算速度的目的；在黄土高原董志塬的案例研究表明，HASM-AM可使计算成本减小98.6%[60]. HASM-AC采取分而治之的思路，将大数据研究区分割为由35个栅格组成的小单元集合, 每个中央处理器处理35个栅格，大幅度减小了高性能计算机群中每个中央处理器的计算量; 然而, 在运算过程中，由于处理器之间的通讯需要花费许多时间, HASM-AC只能使用高性能计算机群的很小一部分中央处理器资源[61].

这些面向经典计算机的高时效算法虽然一定程度上解决了运算速度慢和大内存需求问题，但受制于经典计算机的硬件计算能力，HASM方法与这些经典算法的耦合，依旧难以满足日益增长的生态环境曲面建模的计算需求. 例如, 当通过HASM将全球气候模型与地面观测数据进行同化时，无法直接使用流体运动的基本方程, 因为在未来数年里, 即使运用最强大的经典超级计算机也无法完成对其进行求解. 因此, 必须寻找一种对资源使用量最小化与空间分辨率最细化这两种截然相反需求之间的折中方案, 也就是采用0.5°空间分辨应对这一棘手的问题. 然而，模拟热带气旋需要比0.25°更细的空间分辨率. 由于并行算法本身的可扩展性有限，超级计算机无法在短期实现这一目标[62~64]. 突破经典计算机的硬件约束，并发展相应的软件算法, 将是未来曲面建模的重要发展方向.

1.2 量子计算

1965年，戈登·摩尔(Gordon Moore)提出了摩尔定律(Moore‘s law)[65]. 他认为, 半导体芯片上集成的晶体管数量将每年增加一倍; 1975年, 他又根据当时的实际情况对摩尔定律进行了修正，把“每年增加一倍”改为了“每18到24个月增加一倍”. 经典计算机的进步源于晶体管的小型化和芯片上晶体管数量的增加, 然而, 现阶段晶体管小型化逼近原子尺度，关键特征尺寸仅含十几个硅原子. 也就是说, 晶体管的小型化已达到了它的极限水平[66].

从2025年开始, 摩尔定律逐渐趋平, 这不仅威胁到规模达4万亿美元的电子行业生态，更使生态环境曲面建模等依赖高性能计算的科学问题面临算力缺口[67]. 在这一“后摩尔时代”背景下，计算技术正从单一依赖晶体管缩放转向多路径创新, 其中, 量子计算作为一种全新的计算范式，在求解某些特定问题时可以展现出经典计算机难以匹敌的加速潜力，被认为是新一代计算机的重要希望之一[68].

经典的个人计算机和超级计算机都建立在经典计算原理之上, 运用经典比特来进行计算和处理信息. 经典比特是二进制变量, 一个比特要么是0, 要么是1. 而量子计算的基本单元量子比特(qubit)则具有与经典比特不同的性质, 量子比特不仅可以处于0或1的状态, 还可以处于两者的叠加状态; 此外, 量子比特之间还可以发生量子纠缠, 即当对其中一个量子比特进行测量时, 另一个量子比特的状态也会随之改变. 量子计算的优势在于其通过叠加和纠缠等特性能够在某些问题上提供超越经典计算机的计算能力[69].

然而, 我们正处于中等规模含噪声量子计算(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)时代, 量子设备的量子比特数有限、硬件噪声水平较高, 且暂未实现大规模量子纠错[70]. 这使得量子计算难以实现大规模的容错计算, 并难以在实际应用中展现出真正的量子优势. 在NISQ时代, 量子计算面临显著的硬件与操控层面技术瓶颈[71]. 以量子操控技术为例, 量子态易受环境噪声干扰而发生退相干: 当前超导量子比特的相干时间通常处于几十至数百微秒量级, 而离子阱量子比特虽可实现秒级相干时间, 但其量子门操作速度相对较慢, 双比特门时间一般在 10~100 μs范围内. 这种相干时间与门操作速率之间的权衡, 使得在现阶段难以同时兼顾高操作精度与高计算效率[72,73]. 在算法层面, 量子算法的实际可用性受到当前量子硬件特性的显著制约. 以量子线性方程求解为例, 尽管某些量子线性求解算法(如Harrow-Hassidim-Lloyd, HHL算法)在满足特定假设条件的情况下, 在理论复杂度分析中可相较于经典算法实现指数级加速, 但该类算法通常依赖于深度量子电路以及容错量子比特架构, 难以在当前NISQ设备上实现[74,75]. 此外, 在实际应用过程中, 将经典数据高效编码为量子态以及在计算结束后从量子态中提取计算结果本身也需要额外的资源开销, 这种输入与输出过程的复杂度可能在一定程度上抵消理论上的加速优势, 从而进一步限制了相关算法在近中期量子设备上的实际应用前景[76].

在NISQ时代, 受限于量子硬件规模、噪声水平以及经典计算资源的协同瓶颈, 量子机器学习(quantum machine learning, QML)作为融合量子计算与机器学习思想的研究方向, 被广泛认为是探索当前量子计算实际应用潜力的重要路径之一[70]. 该方向利用量子系统的叠加与纠缠特性, 在特定任务中有望缓解经典计算的计算复杂度瓶颈, 同时借助机器学习在参数优化、模型泛化与自适应方面的优势, 以适配NISQ设备对浅电路和有限可控参数的硬件约束[77]. 此外, 通过优化算法结构与量子电路参数, 量子机器学习方法在一定程度上可提高算法对噪声的鲁棒性. 以变分量子算法(variational quantum algorithms, VQA)和量子近似优化算法(quantum approximate optimization algorithm, QAOA)为代表的量子-经典混合算法, 与机器学习任务结合后, 逐渐形成了具有NISQ时代特征的量子机器学习范式, 为在有限量子资源条件下开展实际量子计算应用提供了可行途径[78]. 例如, 基于变分量子算法的方法通过引入少量可调参数并采用经典优化策略, 在降低量子计算资源需求的同时提升模型性能, 从而在小样本条件下实现较为高效的训练过程[79,80]. 目前, 量子机器学习已在化学、物理、生物等领域展现出应用潜力, 并逐步被运用于生态环境信息学等交叉学科的大数据处理问题中[81].

2 HASM经典智能计算方法

如果一个曲面在位置(x,y)的属性值可表达为$z=f(x,y)$, HASM的普适性理论表达可抽象为以下数学方程:

$$\begin{cases} f_{xx}=\Gamma_{11}^{1}f_x+\Gamma_{11}^{2}f_y+\dfrac{L}{\sqrt{E+G-1}}, \\ f_{yy}=\Gamma_{22}^{1}f_x+\Gamma_{22}^{2}f_y+\dfrac{N}{\sqrt{E+G-1}}, \\ s.t. \\ f(x,y)=f(x_i,y_j),\ i=1,2,\cdots,I,\ j=1,2,\cdots,J, \end{cases} \tag{1}$$

其中$\begin{cases} f_{xx}=\Gamma_{11}^{1}f_x+\Gamma_{11}^{2}f_y+\dfrac{L}{\sqrt{E+G-1}} \\ f_{yy}=\Gamma_{22}^{1}f_x+\Gamma_{22}^{2}f_y+\dfrac{N}{\sqrt{E+G-1}} \end{cases}$为HASM主方程, Γ_{11}^{1}、Γ_{11}^{2}、Γ_{22}^{1}、Γ_{22}^{2}为第二类克里斯托弗尔符号(Christoffel symbols), f_x和f_{xx}分别为$f(x, y)$关于横坐标x的一阶和二阶偏导, f_y和f_{yy}分别为$f(x,y)$关于纵坐标y的一阶和二阶偏导; $f(x,y)=f(x_i,y_i)$为约束条件.

HASM普适性理论表达的定性描述可归纳为曲面建模基本定理(理论证明见补充材料): 设在计算域Ω, 曲面的第一类基本量E、F、G正定, 第一类和第二类基本量E、F、G、L和N服从HASM主方程, 在足够$f(x,y)=f(x_i,y_i)$(i=1, 2, …, I; j=1, 2, …, J)约束条件下, HASM在计算域Ω内存在唯一的解$z=f(x,y)$.

HASM的普适性理论表达可运用于地球表层系

统、生态环境曲面、医学影像、机械制造和计算机辅助设计等领域的高精度曲面建模.

HASM在生态环境领域得到了广泛应用. 我们将一个区域或其生态环境要素格网化表达抽象为数学“曲面”[82]. 在联合国生物多样性与生态系统服务政府间科学-政策平台(IPBES)概念体系下[83,84], 将地球表层系统及其生态环境要素按自然(包括物种多样性、生态系统结构和地形地貌)、自然对人类贡献(包括食物供给、淡水供给和环境污染调节等生态系统服务)和自然变化驱动力(包括气候变化、土地利用变化、流行病、环境污染和政策法规等)来划分, 并将自然曲面、自然对人类贡献曲面和自然变化驱动力曲面统称为生态环境曲面[85]. 根据生态环境曲面建模基本定理, 生态环境曲面由微观过程信息和宏观格局信息共同唯一决定, 在空间分辨率足够细的条件下, 高精度生态环境曲面可运用集成微观过程信息和宏观格局信息的恰当方法(如HASM)来构建[82].

对生态环境问题, 面向经典计算机的HASM可表达为以下形式[35]:

$$\begin{cases} \min \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} - \begin{bmatrix} \mathbf{d}^{(n)} \\ \mathbf{q}^{(n)} \end{bmatrix} \right\|, \\ s.t. \\ \mathbf{S} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} = \mathbf{k}, \end{cases} \tag{2}$$

其中(x, y)是地理坐标; $f(x,y)$为生态环境要素z在(x,y)处的取值; $z^{(n+1)}$为生态环境要素z曲面的n+1次迭代(n≥0); $\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$为对应HASM主方程组两个方程的系数矩阵; $\mathbf{d}^{(n)}$和$\mathbf{q}^{(n)}$为对应HASM主方程组两个方程的右端项向量, 由生态环境要素z曲面的第n次迭代$\mathbf{z}^{(n)}$确定; $\mathbf{d}^{(0)}$和$\mathbf{q}^{(0)}$由生态环境要素z曲面的初始曲面$\mathbf{z}^{(0)}$确定; $\mathbf{S}$和$\mathbf{k}$分别为地面观测等式约束的位置矩阵和观测值向量 .

HASM是一种机器学习方法, 它由达到目标曲面的优化算法$\min \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} - \begin{bmatrix} \mathbf{d}^{(n)} \\ \mathbf{q}^{(n)} \end{bmatrix} \right\|$和利用地基观测数据控制学习过程的学习规则$\mathbf{S} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} = \mathbf{k}$构成.

HASM的表达形式(2)可通过拉格朗日因子法转换为大型稀疏线性系统:

$$\mathbf{W} \cdot \mathbf{z}^{(n+1)} = \mathbf{v}^{(n)}, \tag{3}$$

其中$\mathbf{W} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \mathbf{B}^T\mathbf{B} + \beta\mathbf{S}^T\mathbf{S})$, $\mathbf{v}^{(n)} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{d}^{(n)} + \mathbf{B}^T \cdot \mathbf{q}^{(n)} + \beta\mathbf{S}^T \cdot \mathbf{k}$, β为拉格朗日系数.

3 HASM量子智能计算方法

运算速度慢与大内存需求问题一直是生态环境曲面建模及其实时三维可视化面临的主要挑战之一. 为了实现尽可能高空间分辨率和尽可能小计算机资源需求的折中, 许多全球尺度模型都采用了很粗的空间分辨率. 然而, 在许多情况下, 实际应用需要更高的空间分辨率[62]. 为了提高全球模型在经典超级计算机运行的空间分辨率, 许多学者做了大量努力工作, 但由于经典超级计算机并行算法有限的可扩展性和处理器之间较长的通讯时间, 很难实现空间分辨率的有效提升[63].

我们将HASM经典机器学习方法(3)中的矩阵求解问题转换为对应的量子计算问题, 实现HASM量子机器学习,

$$\mathbf{W} \left| z^{(n+1)} \right\rangle = \left| v^{(n)} \right\rangle. \tag{4}$$

HHL和变分量子线性求解器(variational quantum linear solver, VQLS)是两种最常用的量子线性求解器. 研究发现, 虽然HASM与HHL的有机结合(称之为HASM-HHL量子机器学习算法)具有指数级加速潜力, 但其对矩阵稀疏性和条件数有较高要求, 且需要较深的量子电路和较多量子比特, 难以在NISQ量子计算机上发挥理论优势[86,87].

VQLS采用量子–经典混合优化框架, 利用参数化量子电路生成解向量, 通过经典优化器迭代收敛, 更适合在当前硬件条件下运行, 在量子资源消耗、电路深度与噪声鲁棒性之间实现了更合理的折衷[88]. 尤其是迭代变分量子线性求解器(iterative refinement of VQLS, iVQLS)可提高收敛精度和效率, 并降低对量子比特数量的需求, 从而更适应当前含噪音中型量子计算机. 与HHL直接通过量子傅里叶变换与受控旋转来提取解向量不同, iVQLS通过优化目标函数(如残差最小化)逐步逼近解, 使得对条件数与稀疏性的依赖显著减弱.

以江西省及其周边地区2009~2018年间138个气象站的逐日平均气温数据为优化控制条件、以日平均气温与海拔高度、纬度、经度和坡向的统计关系为初始曲面, 我们运用经典HASM机器学习方法建立了空间分辨率为1 km×1 km的日平均气温曲面. 统计分析发现, 江西省日平均气温为18.28℃; 交叉验证结果表明, 平均绝对误差为0.58℃, 平均相对误差为0.28%.

HASM与iVQLS的有机结合形成了HASM-iVQLS量子机器学习算法. 在江西省2009~2018年间日平均气

温的量子计算实验中，首先在2^3、2^4、2^5、2^6、2^7个栅格的一系列计算规模对比了HASM-iVQLS在真实量子计算机与虚拟量子计算机上的表现. 结果显示, 不论矩阵规模如何变化, 都可以使用3量子比特在真实量子计算机和虚拟量子计算机上完成相应计算(表1); 而且, 真实量子计算机与虚拟量子计算机的计算误差几乎没有差别. 也就是说, HASM-iVQLS在虚拟量子计算机上和真实量子计算机的模拟结果与经典HASM算法的运算结果基本一致. 这表明, 在后续实验中, 可以将HASM-iVQLS算法在虚拟量子计算机获得的解，近似为真实量子计算机在类似条件下能够获得的解. 此外, 由于算法设计过程中加入的内迭代和外迭代的处理以及经典-量子的混合运用，HASM-iVQLS算法具备更高的精度，这使得这种算法不论是在真实量子计算机还是虚拟量子计算机上，结果精度都与经典HASM计算结果几乎相同.

在虚拟量子计算机上的运算结果表明，随着计算规模从2^3增加到2^7，线性系统$\mathbf{W}\left|z^{(n+1)}\right\rangle=\left|v^{(n)}\right\rangle$的条件数从19迅速增加到1733，HASM-HHL使用的量子计算资源也随之从17量子比特增大到25量子比特(表1)；由于HASM-HHL对容错量子计算机和所计算线性系统小条件数的理想要求，使其推广应用受制于当前真实量子计算机有限的量子资源. 虽然理论上来讲，HASM-HHL算法具指数级加速潜力，但是相比于HASM-iVQLS，HASM-HHL要达到同等模拟精度需要更多的资源消耗. 对于$n=2^{\alpha}$个栅格的计算量，HASM-HHL所需量子比特数可表达为$y=9.941\ln(\alpha)+6.0884$，其决定系数高达$R^2=1.00$. 在江西省日平均气温的虚拟计算机实验中，HASM-HHL相对于经典HASM计算结果的平均绝对偏差为0.09℃, 平均相对偏差为1.07%.

4 总结与展望

通过拉格朗日因子法将经典HASM机器学习方法转换为大型稀疏线性系统，并将HHL和iVQLS两种量子线性求解器运用于HASM求解，建立了HASM-HHL和HASM-iVQLS两种量子机器学习算法. 理论上来说, HASM-HHL量子机器学习具有相对于经典HASM高时效算法的指数级加速潜力. 然而, 在当前NISQ时代, 受限于量子硬件规模、噪声水平以及HASM-HHL类算法自身的实现条件，HASM-HHL算法在实际应用中仍旧面临一些局限和挑战. 首先，HASM-HHL算法对所求解线性系统的系数矩阵提出了较为严格的前提假设, 例如矩阵需满足可高效哈密顿量模拟的条件，并要求矩阵为厄米矩阵(Hermitian)或可通过嵌入方式转化为厄米矩阵. 尽管HASM主方程对应的系数矩阵在一定程度上满足稀疏性等要求，但在具体实现中仍需通过预处理使矩阵维度匹配量子系统的计算空间，例如满足维度为2的整数次幂的要求. 此外，受限于可以使用量子比特数的局限，目前依旧无法直接将HASM-HHL算法应用于全研究域对应的$\mathbf{W}\left|z^{(n+1)}\right\rangle=\left|v^{(n)}\right\rangle$大型线性系统，而需要进行预处理的矩阵分割. 相应地，考虑到量子硬件条件限制，如何减少运算的量子电路深度也是HASM-HHL在真机上求解大规模矩阵方程时必须面对的关键问题. 其次, HASM-HHL算法对于矩阵条件数十分敏感. 条件数的大小直接影响计算时间、量子运算过程的资源需求、特征值估算等过程，因此过大的条件数可能限制HASM-HHL算法的适用性及结果精度[89]. 然而随着计算规模的增加, HASM主方程矩阵W的条件数增长很快, 从而进一步放大了上述问题. 此外, HASM-HHL算法中最核心步骤的量子相位估计和量子逆相位估计对量子门误差和环境噪声极为敏感，在当前NISQ设备条件下容易受到噪声干扰，导致算法性能显著下降[90,91]. 综上所述，这些因素共同限制了HASM-HHL算法在现阶段NISQ设备上的实际可行性及其理论加速潜力的充分发挥.

HASM-iVQLS作为一种基于变分思想的量子线性求解方法，在精度、计算效率以及量子资源消耗方面相对于HASM-HHL表现出一定优势，能够在有限量子

表 1 **HASM-iVQLS和HASM-HHL使用量子计算机资源比较分析**

Table 1 A comparative analysis of quantum computer resources used by HASM-iVQLS and HASM-HHL

计算规模	2^3	2^4	2^5	2^6	2^7
HASM条件数	19	90	175	1026	1733
HASM-HHL虚拟量子计算机运算使用的量子比特数	17	20	22	24	25
HASM-iVQLS虚拟量子计算机运算使用的量子比特数	3	3	3	3	3
HASM-iVQLS真实量子计算机运算使用的量子比特数	3	3	3	3	3

比特条件下逼近大规模矩阵方程的解. HASM-iVQLS与HASM-HHL相比, 不需要$\mathbf{W}\left|z^{(n+1)}\right\rangle=\left|v^{(n)}\right\rangle$系数矩阵的稀疏性特性, 对矩阵条件数的敏感性也显著降低, 同时避免了对高精度量子相位估计和大规模量子比特资源的需求, 因此在一定程度上更适合当前NISQ设备. 然而, 随着使用HASM进行模拟的研究区规模的扩大和模型复杂度的提升, 往往需要在相应地量子优化算法中引入更多的量子比特并增加参数化量子电路的深度. 在这种背景下, 与大多数变分量子算法类似, HASM-iVQLS算法在应用过程中也可能面临贫瘠高原(barren plateau)问题的挑战, 从而对其训练效率和可扩展性产生不利影响[92]. 换言之, 在训练过程中, 由于参数空间维度非常高, 可能会导致损失函数梯度的方差随着系统规模呈指数级衰减, 使得基于梯度的优化变得几乎不可行, 从而显著降低训练可行性[93]. 尤其在存在噪声的硬件条件下, 例如全局去极化噪声和其他开放系统噪声, 这种梯度消失现象可能被进一步强化, 产生所谓的噪声诱导贫瘠高原(Noise-Induced Barren Plateaus, NIBPs), 使得变分量子优化的收敛更为困难[94]. 因此, 有必要结合HASM主方程所刻画线性系统的结构特征, 设计问题感知(problem-informed)的参数化量子电路和优化策略, 以提高HASM-iVQLS算法的可训练性并缓解贫瘠高原问题. 例如, 采用低深度且结构受限的拟设线路以及合适的参数初始化方法, 有助于维持有效的梯度信号并促进算法收敛.

根据目前的研究进展和存在的问题, 为了加速量子智能计算在有关领域落地, 同时通过应用反过来推动量子计算技术的成熟和进步, 形成相互促进的良性循环, 亟待开展以下两方面研究.

(1) 发展经典与量子智能计算的HASM通用算法工具集. 发展面向传统计算机的时空插值、时空升尺度、时空降尺度、数据融合和模型-数据同化的自适应算法, 形成适用于图形处理器和中央处理器的传统算法库; 另一方面, 将最新深度学习与优化理论成果有机融入量子计算框架, 设计能够在NISQ设备上稳定运行、保持计算精度并在特定任务中体现潜在量子优势的量子机器学习算法, 逐步形成与传统算法库相对应的量子机器学习算法体系.

(2) 系统性解决量子"输入-计算-输出"全流程中的关键问题. ① 在输入阶段, 需要开发能够高效地将曲面计算问题的输入数据制备为量子计算初始态的方法, 特别是在高维量子态或复杂叠加态的情形下, 以确保后续量子计算过程的运行. 例如, 分别通过一维离散量子随机游走、网格量子随机游走、超立方体随机游走, 精确制备多能级量子叠加态和纠缠态, 优化稀疏情景的资源制备, 解决量子计算输入问题. ② 在计算阶段, 需进一步探索在特定问题结构下具有潜在指数级或超多项式加速能力的量子算法, 特别是适用于NISQ设备的大规模稀疏矩阵求解与优化算法. 例如, 在一定程度上保证精度的前提下大幅度降低运行HASM-HHL量子机器学习所需门电路数和电路深度; 同时, 发展面向大规模量子比特系统的迭代式变分量子线性求解方法, 以缓解HASM-iVQLS算法中贫瘠高原问题的影响. ③ 在输出阶段, 探索可以提取并解读量子态中的信息的方法, 使量子计算将更有效地应对曲面计算中的复杂问题. 例如, 利用先验信息来优化量子态的表征从而高效重构量子态密度矩阵; 或者使用经典阴影层析技术一类的方法, 通过估算量子态在特定物理量上的期望值, 减少量子态重构的复杂性从而大幅度减少测量和计算资源的消耗.

参考文献

1 Krige D G. A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. J Chem Metallurg Mining Soc South Africa, 1951, 52: 119–139

2 Birkhoff G, Garabedian H L. Smooth surface interpolation. J Math Phys, 1960, 39: 258–268

3 de Boor C. Bicubic spline interpolation. J Math Phys, 1962, 41: 212–218

4 Bengtsson B E, Nordbeck S. Construction of isarithms and isarithmic maps by computers. BIT, 1964, 4: 87–105

5 Zienkiewlcz O C. The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics. London: McGraw Hill, 1967

6 Akima H. A method of bivariate interpolation and smooth surface fitting for irregularly distributed data points. ACM Trans Math Softw, 1978, 4: 148–159

7 Akima H. Algorithm 526: bivariate interpolation and smooth surface fitting for irregularly distributed data points [E1]. ACM Trans Math Softw, 1978, 4: 160–164

8 Schroeder L D, Sjoquist D L. Investigation of population density gradients using trend surface analysis. Land Economics, 1976, 52: 382–392
9 Shepard D. A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. In: Proceedings of the 1968 23rd ACM National Conference. New York: Association for Computing Machinery, 1968
10 Talmi A, Gilat G. Method for smooth approximation of data. J Comput Phys, 1977, 23: 93–123
11 Wood B D. The role of scaling laws in upscaling. Adv Water Resour, 2009, 32: 723–736
12 Seekell D A, Carr J A, Gudasz C, et al. Upscaling carbon dioxide emissions from lakes. Geophys Res Lett, 2014, 41: 7555–7559
13 Misaghian N, Assareh M, Sadeghi M T. An upscaling approach using adaptive multi-resolution upgridding and automated relative permeability adjustment. Comput Geosci, 2018, 22: 261–282
14 Hewitson B C, Crane R G. Climate downscaling: techniques and application. Clim Res, 1996, 7: 85–95
15 Charles S P, Bates B C, Whetton P H, et al. Validation of downscaling models for changed climate conditions: case study of southwestern Australia. Clim Res, 1999, 12: 1–14
16 Dibike Y B, Gachon P, St-Hilaire A, et al. Uncertainty analysis of statistically downscaled temperature and precipitation regimes in Northern Canada. Theor Appl Climatol, 2008, 91: 149–170
17 Anthes R A. Regional models of the atmosphere in middle latitudes. Mon Wea Rev, 1983, 111: 1306–1335
18 Giorgi F. Simulation of regional climate using a limited area model nested in a general circulation model. J Clim, 1990, 3: 941–963
19 Laprise R. Regional climate modelling. J Comput Phys, 2008, 227: 3641–3666
20 Erlandsen H B, Parding K M, Benestad R, et al. A hybrid downscaling approach for future temperature and precipitation change. J Appl Meteor Climatology, 2020, 59: 1793–1807
21 Park N W, Moon W M, Chi K H, et al. Multi-sensor data fusion for supervised land-cover classification using Bayesian and geostatistical techniques. Geosci J, 2002, 6: 193–202
22 Hilker T, Wulder M A, Coops N C, et al. A new data fusion model for high spatial-and temporal-resolution mapping of forest disturbance based on Landsat and MODIS. Remote Sens Environ, 2009, 113: 1613–1627
23 Chatterjee A, Michalak A M, Kahn R A, et al. A geostatistical data fusion technique for merging remote sensing and ground-based observations of aerosol optical thickness. J Geophys Res, 2010, 115: D20207
24 Mizuochi H, Hiyama T, Ohta T, et al. Development and evaluation of a lookup-table-based approach to data fusion for seasonal wetlands monitoring: an integrated use of AMSR series, MODIS, and Landsat. Remote Sens Environ, 2017, 199: 370–388
25 Maack J, Lingenfelder M, Weinacker H, et al. Modelling the standing timber volume of Baden-Württemberg—A large-scale approach using a fusion of Landsat, airborne LiDAR and National Forest Inventory data. Int J Appl Earth Observation GeoInf, 2016, 49: 107–116
26 Courtier P, Talagrand O. Variational assimilation of meteorological observations with the direct and adjoint shallow-water equations. Tellus A-Dynamic Meteor Oceanography, 1990, 42: 531–549
27 Ghil M, Malanotte-Rizzoli P. Data assimilation in meteorology and oceanography. Adv Geophysics, 1991, 33: 141–266
28 Rabier F, Courtier P, Ehrendorfer M. Four-dimensional data assimilation: comparison of variational and sequential algorithms. Quart J R Meteoro Soc, 1992, 118: 673–713
29 Bannister R N. A review of operational methods of variational and ensemble-variational data assimilation. Quart J R Meteoro Soc, 2017, 143: 607–633
30 Littman M L. Reinforcement learning improves behaviour from evaluative feedback. Nature, 2015, 521: 445–451
31 Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction. New York: Springer, 2011
32 Murphy K. Machine Learning: A Probabilistic Perspective. Cambridge, MA: MIT Press, 2012
33 Thiyagalingam J, Shankar M, Fox G, et al. Scientific machine learning benchmarks. Nat Rev Phys, 2022, 4: 413–420
34 Jörgensen S E. Ecol Model, 2011, 222: 3300
35 Yue T X. Surface Modelling: High Accuracy and High Speed Methods. New York: CRC Press, 2011. 691
36 Yu J Y. Innovation process from systems thinking to systems practice (in Chinese). System Engineering Theory Practice, 2016, 36: 2993–3002 [于景元. 从系统思想到系统实践的创新. 系统工程理论与实践, 2016, 36: 2993–3002]
37 Breakwell J V, Dixon J F. Minimum-fuel rocket trajectories involving intermediate-thrust arcs. J Optim Theor Appl, 1975, 17: 465–479
38 Henderson D W. Differential Geometry. London: Prentice-Hall, 1998. 458
39 Toponogov V A. Differential Geometry of Curves and Surfaces. New York: Birkhauser Boston, 2006. 503
40 Liseikin V D. A Computational Differential Geometry Approach to Grid Generation. Berlin: Springer, 2004. 288
41 Yue T X, Du Z P, Song D J, et al. A new method of surface modeling and its application to DEM construction. Geomorphology, 2007, 91: 161–172
42 Yue T X, Song D J, Du Z P, et al. High-accuracy surface modelling and its application to DEM generation. Int J Remote Sens, 2010, 31: 2205–2226
43 Chen C F, Yue T X. A method of DEM construction and related error analysis. Comput Geoscis, 2010, 36: 717–725

44 Li Q Q, Yue T X, Wang C Q, et al. Spatially distributed modeling of soil organic matter across China: an application of artificial neural network approach. CATENA, 2013, 104: 210–218
45 Shi W J, Liu J Y, Du Z P, et al. Surface modelling of soil pH. Geoderma, 2009, 150: 113–119
46 Zhao Y, Yin X, Fu Y, et al. A comparative mapping of plant species diversity using ensemble learning algorithms combined with high accuracy surface modeling. Environ Sci Pollut Res, 2022, 29: 17878–17891
47 Yue T X, Wang Q, Lu Y M, et al. Change trends of food provisions in China. Glob Planet Change, 2010, 72: 118–130
48 Yue T X, Wang Y F, Du Z P, et al. Analysing the uncertainty of estimating forest carbon stocks in China. Biogeosciences, 2016, 13: 3991–4004
49 Wu C C, Yue T X, Wang Y F, et al. Analysing causes of carbon density dynamics in subtropical forests. Forests, 2025, 16: 1496
50 Yue T X, Zhao N, Ramsey R D, et al. Climate change trend in China, with improved accuracy. Clim Change, 2013, 120: 137–151
51 Yue T X, Zhao N, Fan Z M, et al. CMIP5 downscaling and its uncertainty in China. Glob Planet Change, 2016, 146: 30–37
52 Yue T X, Zhao N, Fan Z M, et al. Methods for simulating climate scenarios with improved spatiotemporal specificity and less uncertainty. Glob Planet Change, 2019, 181: 102973
53 Yue T X, Zhao M W, Zhang X Y. A high-accuracy method for filling voids on remotely sensed XCO_2 surfaces and its verification. J Cleaner Prod, 2015, 103: 819–827
54 Zhang L L, Yue T X, Wilson J P, et al. A comparison of satellite observations with the XCO_2 surface obtained by fusing TCCON measurements and GEOS-Chem model outputs. Sci Total Environ, 2017, 601-602: 1575–1590
55 Shi W J, Yue T X, Du Z P, et al. Surface modeling of soil antibiotics. Sci Total Environ, 2016, 543: 609–619
56 Yue T X, Zhang L L, Wang D Y, et al. An Introduction to Carbon Verification Systems (in Chinese). Beijing: Science Press, 2017 [岳天祥, 张丽丽, 王鼎益, 等. 碳核查体系导论. 北京: 科学出版社, 2017]
57 Yue T X. Principles and Methods for Simulating Earth's Surface Systems (in Chinese). Beijing: Science Press, 2017 [岳天祥. 地球表层系统模拟分析原理与方法. 北京: 科学出版社, 2017]
58 Yue T X, Zhao N, Shi W J, et al. Eco-Environment Informatics. Singapore: Springer Nature, 2025
59 Yue T X, Zhao N, Yang H, et al. A multi-grid method of high accuracy surface modeling and its validation. Trans GIS, 2013, 17: 943–952
60 Yue T X, Chen C F, Li B L. An adaptive method of high accuracy surface modeling and its application to simulating elevation surfaces. Trans GIS, 2010, 14: 615–630
61 Yue T X, Wang S H. Adjustment computation of HASM: a high-accuracy and high-speed method. Int J Geographical Inf Sci, 2010, 24: 1725–1743
62 Atlas R, Reale O, Shen B, et al. Hurricane forecasting with the high-resolution NASA finite volume general circulation model. Geophys Res Lett, 2005, 32: L03807
63 Bernsen E, Dijkstra H A, Thies J, et al. The application of Jacobian-free Newton–Krylov methods to reduce the spin-up time of ocean general circulation models. J Comput Phys, 2010, 229: 8167–8179
64 Ren X, Zhao J, Li X, et al. PAGCM: a scalable parallel spectral-based atmospheric general circulation model. Concurrency Computation, 2019, 31: e5290
65 Moore G. Moore's law. Electronics Magazine, 1965, 38: 114
66 Fedorov A K, Gelfand M S. Towards practical applications in quantum computational biology. Nat Comput Sci, 2021, 1: 114–119
67 Shalf J. The future of computing beyond Moore's Law. Phil Trans R Soc A, 2020, 378: 20190061
68 Preskill J. Quantum computing 40 yearslater. In: Hey T, ed. Feynman Lectures on Computation: Anniversary Edition. 2nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2023. 193–244
69 Mooij H. The road to quantum computing. Science, 2005, 307: 1210–1211
70 Aaronson S. Read the fine print. Nat Phys, 2015, 11: 291–293
71 Preskill J. Quantum computing in the NISQ era and beyond. Quantum, 2018, 2: 79
72 Kjaergaard M, Schwartz M E, Braumüller J, et al. Superconducting qubits: current state of play. Annu Rev Condens Matter Phys, 2020, 11: 369–395
73 Blatt R, Wineland D. Entangled states of trapped atomic ions. Nature, 2008, 453: 1008–1015
74 Lau J W Z, Lim K H, Shrotriya H, et al. NISQ computing: where are we and where do we go? AAPPS Bull, 2022, 32: 27
75 Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations. Phys Rev Lett, 2009, 103: 150502
76 Pellow-Jarman A, Sinayskiy I, Pillay A, et al. Near term algorithms for linear systems of equations. Quantum Inf Process, 2023, 22: 258
77 Biamonte J, Wittek P, Pancotti N, et al. Quantum machine learning. Nature, 2017, 549: 195–202
78 Huang H L, Xu X Y, Guo C, et al. Near-term quantum computing techniques: variational quantum algorithms, error mitigation, circuit compilation, benchmarking and classical simulation. Sci China-Phys Mech Astron, 2023, 66: 250302
79 Bravo-Prieto C, LaRose R, Cerezo M, et al. Variational quantum linear solver. 2019, arXiv: 1909.05820
80 Caro M C, Huang H Y, Cerezo M, et al. Generalization in quantum machine learning from few training data. Nat Commun, 2022, 13: 4919

81 Childs A M, Kothari R, Somma R D. Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision. SIAM J Comput, 2017, 46: 1920–1950
82 Yue T X, Zhao N, Liu Y, et al. A fundamental theorem for eco-environmental surface modelling and its applications. Sci China Earth Sci, 2020, 63: 1092–1112
83 IPBES. The Methodological Assessment Report on Scenarios and Models of Biodiversity and Ecosystem Services. Bonn: secretariat of the Intergovernmental Science-Policy Platform on Biodiversity and Ecosystem Services, 2016. 209–215
84 Yue T X, Fan Z M, Shi W J, et al. Models and scenarios for nature and nature's contribution (in Chinese). J Geo Inf Sci, 2020, 22: 743–750 [岳天祥, 范泽孟, 史文娇, 等. 自然和自然贡献情景模型研究综述. 地球信息科学学报, 2020, 22: 743–750]
85 Yue T X, Wu C C, Shi W J, et al. Progress in models for coupled human and natural systems. Sci China Earth Sci, 2024, 67: 3631–3637
86 Yue T X, Liu Y, Du Z P, et al. Quantum machine learning of eco-environmental surfaces. Sci Bull, 2022, 67: 1031–1033
87 Yue T X, Wu C C, Liu Y, et al. HASM quantum machine learning. Sci China Earth Sci, 2023, 66: 1937–1945
88 Xu X, Sun J, Endo S, et al. Variational algorithms for linear algebra. Sci Bull, 2021, 66: 2181–2188
89 Sambhaje V, Chaurasia A. The HHL algorithm: implementation and research directions. Int J Quantum Inform, 2024, 22: 2450037
90 Marfany M A, Sakhnenko A, Lorenz J M. Identifying bottlenecks of NISQ-friendly HHL algorithms. In: IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE), 2024. 275–284
91 Zaman A, Wong H Y. Study of error propagation and generation in Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) quantum algorithm. In: IEEE Latin American Electron Devices Conference (LAEDC), 2022. 1–4
92 Holmes Z, Sharma K, Cerezo M, et al. Connecting ansatz expressibility to gradient magnitudes and Barren Plateaus. PRX Quantum, 2022, 3: 010313
93 Larocca M, Thanasilp S, Wang S, et al. Barren plateaus in variational quantum computing. Nat Rev Phys, 2025, 7: 174–189
94 Singkanipa P, Lidar D A. Beyond unital noise in variational quantum algorithms: noise-induced barren plateaus and limit sets. Quantum, 2025, 9: 1617

Summary for “高精度曲面建模的普适性理论及其量子智能计算方法”

A universal theory of high-accuracy surface modeling and its quantum intelligent computing methods

Tianxiang Yue[1,2*], Chenchen Wu[1,2], Na Zhao[1,2], Yi Liu[3], Yu Wang[3], Zhengping Du[1], Wenjiao Shi[1,2] & Zemeng Fan[1,2]

[1] *State Key Laboratory of Resources and Environment Information System, Institute of Geographical Sciences and Natural Resources Research, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China*
[2] *College of Resources and Environment, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 101408, China*
[3] *Beijing Institute of Mathematical Sciences and Applications, Beijing 101408, China*
* Corresponding author, E-mail: yue@lreis.ac.cn

To overcome longstanding issues of error propagation and low computational efficiency in geographical information systems (GIS) and computer-aided design (CAD) systems, high-accuracy surface modeling (HASM) methods were developed through the systematic integration of systems theory, optimization cybernetics, and surface theory. Following nearly two decades of numerical experimentation and empirical investigation, a universal fundamental theorem of surface modeling (UFTSM) was formulated. This theorem provides a general theoretical framework applicable to spatial interpolation, upscaling, downscaling, data fusion, and model–data assimilation across a wide range of disciplines, including Earth surface system science, eco-environmental informatics, medical imaging, and computer-aided design.

The UFTSM was first successfully applied to the simulation of eco-environmental surfaces. Within the conceptual framework of the Intergovernmental Science-Policy Platform on Biodiversity and Ecosystem Services (IPBES), eco-environmental components were classified into three categories: nature (including species diversity, ecosystem structure, and geographical features), nature’s contributions to people (such as food provision, freshwater supply, and environmental pollution remediation), and drivers of natural change (including climate change, land-use change, policies, and regulations). The term eco-environmental surface is used as a unified concept to represent surfaces describing nature, nature’s contributions to people, or drivers of natural change. Numerous studies have demonstrated that intrinsic information (e.g., ground-based observations) and extrinsic information (e.g., satellite observations) provide complementary perspectives, and that neither alone can fully characterize an eco-environmental surface. Instead, such surfaces are governed by the joint influence of intrinsic and extrinsic information, and cannot be adequately understood without considering both. To address the challenge of simulating eco-environmental surfaces through the integration of these two information sources, an iterative differential method for HASM-based machine learning was developed, and a fundamental theorem for eco-environmental surface modeling (FTEEM) was proposed. In addition, a suite of high-efficiency algorithms suitable for classical computing platforms, including a modified conjugate gradient algorithm, a multigrid algorithm, an adaptation algorithm, and adjustment computation, was designed to accelerate eco-environmental surface modeling. Compared with existing surface modeling approaches, HASM-based applications exhibit substantially improved accuracy. However, computational cost remains a major bottleneck for global-scale eco-environmental surface modeling, particularly as spatial resolution becomes increasingly fine.

To address the limitations of classical algorithms and hardware, HASM was reformulated as a large sparse linear system using the Lagrange multiplier method. This system was then implemented on both a real quantum computer and a virtual quantum computing platform by employing two widely used quantum linear solvers: the Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) algorithm and the iterative refinement of the variational quantum linear solver (iVQLS). Based on these approaches, two HASM-oriented quantum linear solvers, HASM-HHL and HASM-iVQLS, were developed, enabling the solution of simulation problems that are intractable for classical computers. The respective advantages and limitations of HASM-HHL and HASM-iVQLS, as quantum machine learning algorithms, were systematically evaluated through simulation experiments conducted on both real and virtual quantum computing platforms. The comparative results highlight the urgent need for a universal tool library that supports both classical and quantum intelligent computing. Moreover, the development of a full-stack quantum input–computing–output system is essential for overcoming the principal challenges currently faced by HASM-based quantum machine learning.

methods for high accuracy surface modelling, universal fundamental theorem of surface modeling, eco-environmental surfaces, classical machine learning, quantum machine learning, universal tool library

doi: 10.1360/CSB-2025-5716