DOI:10.7511/jslx20250503001

基于体素表示的固体力学哈密顿量的量子模拟

吴锋,李晨,杨玉祥,朱力,郭旭*

(大连理工大学 力学与航空航天学院,大连 116024)

摘 要:量子模拟是解决大规模力学计算面临的效率和存储量瓶颈的重要手段,然而如何对空间离散后的厄米矩 阵进行有效分解仍是力学问题量子模拟的关键难题之一。本研究以体素网格离散求解域,深入剖析所得矩阵(记 为体素网格矩阵)结构特性,创新性提出 KCQ 分解方法。该方法融合循环矩阵、矩阵直积、直和以及泡利矩阵等 数学手段,能够将体素网格矩阵分解为 k_n,c_n,q_n三组基本矩阵。基于 KCQ 分解,结合量子傅里叶变换、量子多路 选择器等技术,进一步构建出针对体素网格矩阵的高效哈密顿量的量子模拟算法。通过二维非均质板自由振动 问题的模拟实验,验证了构建的量子算法的正确性和有效性,为固体力学问题的量子模拟提供了新的方法支撑。

1 引 言

随着工程问题规模的不断增大,传统计算机面 临计算效率与存储方面的双重困境。量子计算机 天然具有强并行性和强大存储能力,为解决大规模 计算力学问题提供了新的解决方案和思路,其在力 学领域的应用研究逐渐成为热点。目前,计算力学 中的量子算法工作主要有研究力学问题的量子表 示理论,以适用于量子计算规则,典型的为研究如 何将力学问题进行薛定谔化,从而采用哈密顿量的 量子模拟方法进行力学问题的求解[1-6]:利用量子 相位估计、量子振幅估计、HHL(Harrow-Hassidim-Lloyd)算法等量子算法来进行计算力学中广 泛存在的矩阵特征值、线性方程组等问题的求解, 利用量子优势以实现加速[7-9];研究量子算法与经 典算法的混合计算方法,一般将计算力学中涉及的 方程组求解问题转化为优化问题,然后利用变分量 子算法、量子退火方法等量子优化算法求解[10-14]; 采用量子傅里叶变换方法来求解计算力学问 题^[10,15],该方法目前主要适用于求解域规则条件 的力学问题,处理求解域非规则或域内物理参数非 均匀的研究还比较少;利用距离计算量子算法的指

数优势,研究量子计算增强的数据驱动计算力学方法^[16,17]。在上述算法中,除量子退火算法是基于 量子退火机运行以外,其余算法均适用于基于量子 门的量子计算机,其中哈密顿量的量子模拟、量子 相位估计、HHL算法、变分量子算法等均为广泛 使用的基础性量子算法^[11,18,19],这些算法均涉及 到矩阵分解这一核心步骤。

力学有限元分析中的系统矩阵(如刚度矩阵, 统一记为 A)通常为厄米矩阵^[20]。在薛定谔方程 量子模拟、量子相位估计、HHL 算法等量子算法 中,关键步骤之一就是计算矩阵指数 eⁱ⁴(量子力学 中也称为哈密顿量的量子模拟^[21])。矩阵指数的 量子计算需要将 A 分解为一系列的可以由量子计 算有效模拟的子矩阵 A_k。当前厄米矩阵 A 的分解 研究主要有两类,一类是将 A 分解为酉矩阵的线 性组合(LCU)^[22],这是变分量子算法等的关键步 骤^[12]。这类研究目前较为成熟的一种方法是泡利 分解,然而该分解方法中 A 最多可能分解为 4ⁿ 个 酉矩阵,使得量子计算的优势荡然无存。另一类分 解是将 A 分解为一系列 1-稀疏的厄米矩阵 A_k,即 A_k 中各行和各列只有 1 个非零元素^[23]。然而,1-

收稿日期:2025-05-03;修改稿收到日期:2025-06-06.

基金项目:国家自然科学基金(12372190;6238810)资助项目.

作者简介:郭 旭*(1971-),男,博士,教授(E-mail:guoxu@dlut.edu.cn).

引用本文:吴 锋, 李 晨, 杨玉祥,等. 基于体素表示的固体力学哈密顿量的量子模拟[J]. 计算力学学报,2025,42(3);329-338.
 WU Feng,LI Chen,YANG Yu-xiang, et al. Quantum simulation of Hamiltonian in solid mechanics based on voxel representation
 [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2025,42(3);329-338.

只是个开放性的问题,如何构造有效模拟 1-稀疏的厄 米矩阵的矩阵指数的量子算法,还需要进一步研究。

当前关于量子计算在固体力学中的研究,或建 立在A能有效分解和模拟的基础上,探索量子算 法在力学问题中的应用;或针对特殊问题,利用其 特性构建 e^{ia}的模拟,实现量子仿真。总之,当前还 缺乏针对一般力学问题的 e^{ive} 的量子模拟算法。最 近,Huang 等^[24-26]提出了与问题无关机器学习方 法,实现了超大规模体素网格的高效仿真分析,其 计算效率比传统有限元提升2个量级,表明在合适 的计算框架下,有望实现大规模体素网格的高效高 精度有限元模拟。体素网格是计算力学常用的网 格,具有建模简单、单元矩阵统一、易于并行的优 点,与量子计算的强并行性和强大存储能力天然兼 容。本文利用体素网格离散固体力学求解域得到 的系统矩阵 A(记为体素网格矩阵)的结构性质,并 结合循环矩阵、矩阵直积、直和、泡利矩阵等提出了 针对体素网格矩阵的 KCQ 分解方法,在此基础上 结合量子傅里叶变换、量子多路选择器等技术,进 一步构建出针对体素网格矩阵的高效哈密顿量的 量子模拟算法。提出的方法适用于一般性固体力学 问题求解,为量子 CAE 模拟的发展提供了基础。

2 基本量子计算门介绍

量子计算机通过量子比特进行计算。量子比 特一般记为 $|q\rangle = a_0 |0\rangle + a_1 |1\rangle$,表示为两种状态 的叠加,其中 a_0 和 a_1 为满足 $|a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$ 的 复数, $|a_0|^2$ 和 $|a_1|^2$ 分别为对量子态 $|q\rangle$ 观测得到 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 的概率。量子系统一般由多个量子比特 组成,以两量子比特系统为例,此时系统的状态为 $|q\rangle = a_0 |00\rangle + a_2 |01\rangle + a_3 |10\rangle + a_4 |11\rangle$,具有四 个可观测状态(也称为基态) $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$,系数 $a_i(i=1, 2, 3, 4)$ 度量了对量子态进 行观测时得到基态的概率。

在基于门的量子计算机中,计算操作主要是通 过对量子态进行酉变换来实现的,通常可以写成矩 阵的形式。一个经典的酉变换为 Pauli-X 门, $X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$,其作用于一个单量子比特 $|q\rangle = a_0 |0\rangle + a_1$

 $|1\rangle$,可得 $X|q\rangle = a_0 X|0\rangle + a_1 X|1\rangle = a_0 |1\rangle + a_1$ |0\rangle。该门的作用相当于将量子比特的态|0>变成 |1>,将|1>变成|0>。本文用到的单量子比特门列 入表 1。

接着介绍几个本文用到的多比特量子门,首先 是受控-U门,该门为 I₂⊕U,起到判断作用:若第 一个量子比特的状态是|0>,第二个量子比特的状

量子门	矩阵形式	量子电路		
Hadamard 🏹	$\boldsymbol{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{bmatrix}$	<i>H</i>		
Pauli-X 门	$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	X		
相位门	$\boldsymbol{T}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{\mathrm{i}\boldsymbol{\theta}} \end{bmatrix}$	Τ(θ)		
旋转门	$\boldsymbol{R}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$	R (θ)		

态不变;若第一个量子比特的状态是|1>,则将酉门 U作用于第二个量子比特。还可以交换条件,即若 第一个量子比特的状态是|1>,第二个量子比特的 状态不变;若第一个量子比特的状态是|0>,则将酉 门U作用于第二个量子比特,这个量子门称为零 控制-U门。受控-U门和零控制-U门的量子电路 分别如图1(a)和图1(b)所示。在受控-U门的基 础上,还发展出了量子多路选择器^[27],其酉矩阵为

$$\boldsymbol{U} = \bigoplus_{k=0}^{N-1} \boldsymbol{T}_k = \begin{vmatrix} \boldsymbol{T}_0 & & \\ & \boldsymbol{T}_1 & \\ & & \ddots & \\ & & & \boldsymbol{T}_{N-1} \end{vmatrix}$$
(1)

对应量子电路如图 1(c)所示,通过该电路可以实现一系列的条件判断操作,当控制比特的量子态是 |*j*>时,对目标比特进行 *T_j*操作。为方便论述,本 文将该操作的量子电路统一记为图 1(d)。目前, 虽然量子多路选择器还无法在量子计算机上实现, 但是现有的量子算法如 HHL 算法、量子流体力学 模拟、量子数据挖掘、量子回归等,均假设量子多路 选择 器 能 够 在 poly (*n*)的复杂度下有效实现^[3,28-31],本文的工作亦建立在此假设上。

3 体素网格矩阵的结构特性 及其分解

基于体素网格对一般性固体力学问题进行建模,并详细介绍体素网格矩阵的结构特性及其分解 方法。

3.1 基于体素网格矩阵的三对角分形特性

体素网格采用相对规则网格对结构进行剖分。 剖分后,节点的编号顺序与构建的体素网格矩阵 (如刚度矩阵)的结构密切相关。1维体素网格最



Fig. 1 Controlled-U gate, zero-controlled-U gate, quantum multiplexer and simple circuit of quantum multiplexers

为简单,如图 2(a)所示,其节点共有 8 个,节点编 号从下到上按顺序编号。按这种顺序编号,形成的 体素网格矩阵是一个三对角块状矩阵,如图 2(c) 所示,每个子块矩阵的维数等于节点的变量数。二 维体素网格可以视为由多个 1 维子块组成,如图 2 (b)所示。因此,二维体素网格在这种编号情况 下,形成的体素网格矩阵也是一个三对角块状矩 阵,其中每个子块矩阵又对应了一个一维体素网格 矩阵,如图 2(d)所示。以此类推,三维体素网格也 具备相同的性质,在此不再赘述。



根据体素网格的性质可以看到,体素网格矩阵 具备三对角分形特征,一维体素网格矩阵是一个三 对角块状矩阵,同时是二维体素网格矩阵的分形 子,二维体素网格矩阵又是三维体素网格矩阵的分 形子。利用此特点,可以很容易得到更高维的体素 网格矩阵的结构。

3.2 虚变量

基于门的量子计算机使用 n 个量子比特可以 分析 2"个变量数的力学问题,而实际力学问题的 变量数不一定是2的幂次方,为此需要引入虚变 量。以图 3 所示非规则区域为例,可以采用两种网 格进行剖分。第一种网格的特点是与规则的体素 网格同胚,如图 3(a)所示,因此该网格生成的矩阵 结构也具有体素网格矩阵的三对角分形特征,无需 引入虚变量。第二种仍采用规则的体素网格对不 规则形状进行近似剖分,当体素网格量足够大,就 可以比较精确地模拟非规则结构,如图 3(b)所示。 对于图 3(b)所示网格,当节点不在求解区域时,可 将该节点的变量视为虚变量,对应的体素网格矩阵 中相应地填充零元素,在矩阵对角线上则相应地填 充常数 C,此时形成的矩阵仍为如图 2 所示的三对 角块状体素网格矩阵,因此尽管引入了虚变量,但 适合量子计算机的模拟。



另一种情况是变量数不为 2 的幂次数。以梁 弯曲和拉伸耦合问题为例,沿梁的长度方向剖分 N_x 个节点,总体的位移向量可以写成 $u = (u_0 \quad u_1 \quad \cdots \quad u_{N_x-1})^T, u_i = (u_i, w_i, \theta_i)^T$ 。对该 问题进行分析时,取 2^{n_x} 个节点,则一共有 3×2^{n_x} 个 变量,不再是 2 的幂次数。为此在每个节点布置 4 个变量,其中前三个变量就是 (u_i, w_i, θ_i) ,而第四 个变量是一个虚拟变量 0,此时需要 $\lceil \log_2(3 \times 2^{n_x}) \rceil = n_x + 2$ 个量子比特,对该问题进行求解的时候,也可以生成如式(2)所示的三对角块状矩阵

 $\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{00} & \mathbf{k}_{01} \\ \mathbf{k}_{10} & \mathbf{k}_{11} & \mathbf{k}_{12} \\ & \mathbf{k}_{21} & \mathbf{k}_{22} & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \mathbf{k}_{N_{x}-2,N_{x}-1} \\ & & \mathbf{k}_{N_{x}-1,N_{x}-2} & \mathbf{k}_{N_{x}-1,N_{x}-1} \end{bmatrix}$ (2)

其中 $k_{i,j}$ 是 4×4 的矩阵。

3.3 体素网格矩阵的 KCQ 分解

3.3.1 一维体素网格矩阵的 KCQ 分解

首先研究一维问题,假设沿着 x 方向剖分 $N_x = 2^{n_x}$ 个节点,相应的体素网格矩阵如式(2)所 示,其中 k_{ij} 为 $2^{\lceil \log_2 d \rceil}$ 维的子块矩阵。现在要计算矩 阵指数 $e^{i\omega K}$,需要将 K 分解为有限个子矩阵 K_k ,且 每个 K_k 的矩阵指数都能够用量子计算有效模拟。 一般而言这一分解非常困难,然而在体素网格下, 仅需 5 个矩阵 K_k ($k = 1, \dots, 5$),就能实现对K的有 效分解,且每个 K_k 均为厄米矩阵,且其矩阵指数 非常容易计算。令

$$K = K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + K_5$$
 (3)

其中



其中 *d* 与问题相关,当处理单变量、二变量或三变 量问题时,*d* 分别为1,2 或4。式(5)通过矩阵的分 解,形成了以 *k*_m,*c*_n 和*q*_n 为基本元的五个厄米矩 阵,其可使用基本量子门表示。由于本文提出的分 解方法将体素网格矩阵 *K* 分解为*k*_m,*c*_n 和*q*_n 三组 厄米矩阵,为方便后文表述,将本文提出的分解方 法简称为 KCQ 分解。式(5)中分解后的厄米矩阵 的矩阵指数可以很容易用量子基本门来表示。 3.3.2 二维体素网格矩阵的递归 KCQ 分解

式(3)给出的是一维体素网格矩阵的 KCQ 分解,对于二维体素网格矩阵,仍然可以采用 KCQ 分解。如果沿 *x* 和 *y* 方向分别剖分 2ⁿ_x和 2ⁿ_y个节点,可以将矩阵分解为

$$\begin{split} \mathbf{K} &= \bigoplus_{n=0}^{2^n x - 1} \mathbf{k}_{nn} (\mathbf{K}) + \\ \mathbf{L}_{2,N_x,N_yd} \begin{bmatrix} 2^{n_x - 1} \\ \bigoplus_{n=0}^{2^n x - 1} (-1)^n \mathbf{c}_{2\lfloor 0, 5n \rfloor} (K) \end{bmatrix} \mathbf{L}_{2,N_x,N_yd}^{\mathrm{H}} + \end{split}$$

$$L_{3,N_{x},N_{yd}} \begin{bmatrix} 2^{n_{x}} - 1 \\ \bigoplus_{n=0}^{2} \end{bmatrix} (-1)^{n} q_{2\lfloor 0, 5n \rfloor} (K)] L_{3,N_{x},N_{yd}}^{H} + \\ L_{4,N_{x},N_{yd}} \begin{bmatrix} 2^{n_{x}} - 1 \\ \bigoplus_{n=0}^{2^{n_{x}} - 1} \end{bmatrix} (-1)^{n} c_{2\lfloor 0, 5n \rfloor + 1} (K)] L_{4,N_{x},N_{yd}}^{H} + \\ L_{5,N_{x},N_{yd}} \begin{bmatrix} 2^{n_{x}} - 1 \\ \bigoplus_{n=0}^{2^{n_{x}} - 1} \end{bmatrix} (-1)^{n} q_{2\lfloor 0, 5n \rfloor + 1} (K)] L_{5,N_{x},N_{yd}}^{H}$$
(6)

其中 $k_{mn}(K)$, $c_{n}(K)$, $q_{n}(K)$ 的表达式如式(4)所示。 为方便论述,将这三个矩阵分别标记为 $k_{nn}^{(1)}$, $c_{n}^{(1)}$ 和 $q_{n}^{(1)}$ 。显然,这三个矩阵都是一维体素网格矩阵,因 此是形如式(2)的三对角矩阵。对 $k_{mn}^{(1)}$, $c_{n}^{(1)}$ 和 $q_{n}^{(1)}$ 继 续采用 KCQ 分解。以 $k_{mn}^{(1)}$ 为例,其 KCQ 分解为

$$\mathbf{k}_{m}^{(1)} = \bigoplus_{m=0}^{2^{n_{y}}-1} \mathbf{k}_{mm} (\mathbf{k}_{m}^{(1)}) + \mathbf{L}_{2,N_{y},d} \left[\bigoplus_{m=0}^{2^{n_{y}}-1} (-1)^{m} \mathbf{c}_{2 \lfloor 0.5m \rfloor} (\mathbf{k}_{m}^{(1)}) \right] \mathbf{L}_{2,N_{y},d}^{\mathrm{H}} + \mathbf{L}_{3,N_{y},d} \left[\bigoplus_{m=0}^{2^{n_{y}}-1} (-1)^{m} \mathbf{q}_{2 \lfloor 0.m \rfloor} (\mathbf{k}_{m}^{(1)}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{y},d}^{\mathrm{H}} + \mathbf{L}_{4,N_{y},d} \left[\bigoplus_{m=0}^{2^{n_{y}}-1} (-1)^{m} \mathbf{c}_{2 \lfloor 0.5m \rfloor+1} (\mathbf{k}_{m}^{(1)}) \right] \mathbf{L}_{4,N_{y},d}^{\mathrm{H}} + \mathbf{L}_{5,N_{y},d} \left[\bigoplus_{m=0}^{2^{n_{y}}-1} (-1)^{m} \mathbf{q}_{2 \lfloor 0.5m \rfloor+1} (\mathbf{k}_{m}^{(1)}) \right] \mathbf{L}_{5,N_{y},d}^{\mathrm{H}}$$
(7)

其中 矩阵 k_{mm}(k⁽¹⁾_m),c_m(k⁽¹⁾_m),q_m(k⁽¹⁾_m)已经是 d 维矩阵,其具体计算可参考 3.2 节。如果要进行更 高维的体素网格矩阵分解,仍可以采用 KCQ 分解 方法进行递归迭代,每次迭代都可以通过 KCQ 分 解将矩阵进行降维,最后得到只有 d 维基本矩阵, 在此不再赘述。

4 基于 KCQ 分解的哈密顿量模拟的 量子电路设计

对体素网格下的哈密顿量的量子模拟电路进 行详细说明。为方便说明,给定两个量子电路标记 符号,(1)对于 d 维厄米矩阵 A,记其矩阵指数 $e^{i\Delta A}$ 的量子电路为 $W_d(A\Delta t)$,有关其详细计算步骤和 量子电路可见附录;(2)对于 m 维体素网格离散生 成的厄米矩阵 K(量子计算中,常称该矩阵为哈密顿量^[4,21]),如果每个节点的变量数为 <math>d,则将该哈 密顿量的矩阵指数 $e^{i\Delta K}$ 记为 $G_a^{(m)}(\Delta tK)$ 。

4.1 一维体素网格

首先考虑一维体素网格矩阵的哈密顿量模拟, 在求解区域上布置 $N_x = 2^{n_x}$ 个点,形成的矩阵如式 (2)所示。对矩阵进行 KCQ 分解,得到 5 个易于 模拟的矩阵。现在需要构造 $e^{i \Delta K}$ 的量子电路,根据 文献[19],如果要实现三阶精度,则有

$$e^{\mathrm{i}\mathbf{K}\Delta t} = e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{1}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{2}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{3}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{4}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{5}\Delta t}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{4}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{3}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{2}\tau}e^{\mathrm{i}\mathbf{K}_{1}\tau} +$$

$$O(\Delta t^3), \tau = \frac{\Delta t}{2} \tag{8}$$

因此,构建 $e^{i\Delta t K}$ 的关键在于构建 $e^{i\Delta t K_k}$ 的量子 电路。考虑 d=1,2 或者 4,则有

$$e^{i\mathbf{K}\cdot \mathbf{r}} = \mathbf{G}^{(1)}{}_{d} (\Delta t\mathbf{K}) + O(\Delta t^{3}) = \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau \mathbf{k}_{m}) \right] \times \mathbf{L}_{2,N_{x},d}^{n} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor}) \right] \mathbf{L}_{2,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{q}_{2\lfloor0.5n\rfloor}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{4,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{4,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{5,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{q}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{4,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{5,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\Delta t (-1)^{n} \mathbf{q}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{5,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{4,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{4,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{q}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{2,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{2,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{2,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{d} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{n} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}_{3,N_{x},d} \left[\bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{W}_{n} (\tau (-1)^{n} \mathbf{c}_{2\lfloor0.5n\rfloor+1}) \right] \mathbf{L}_{3,N_{x},d}^{H} \times \mathbf{L}$$

式(9)即为一维情况下基于体素表示的哈密顿量的 量子模拟 e^{iKAr}的计算公式。其中,L_{i,j,k}(i=1,2,3, 4,5)的计算公式详见式(5)。根据式(5)也可知, L_{i,j,k}可采用基本量子门实现。W_d(•)的具体计算 公式和量子电路图详见附录,其也可以采用基本量 子门实现。有关体素表示下哈密顿量的量子模拟 e^{iKAr}详细的理论推导与计算流程,将在后续研究中 展开系统讨论。

4.2 二维体素网格

讨论二维网格矩阵的矩阵指数量子模拟,其 KCQ 分解如式(6)所示,对各子矩阵建立量子算 法。对于 $K_1 = \bigoplus_{n=0}^{2^{n_x}-1} k_m(K)$,其矩阵指数为 $e^{i\Delta t K_1} =$ $\bigoplus_{n=0}^{2^{n_x}-1} e^{i\Delta t K_m(K)}$,注意到 $k_m(K)$ 是三对角块状矩阵,因 此其矩阵指数可以采用式(9)进行计算,即 $G_d^{(1)}$ ($\Delta t K_m(K)$),于是有

$$e^{i\Delta t \mathbf{K}_{1}} = \bigoplus_{n=0}^{2^{n}x-1} \mathbf{G}_{d}^{(1)}\left(\Delta t \mathbf{k}_{m}\left(\mathbf{K}\right)\right)$$
(10)

不难看出 $c_n(K)$ 和 $q_n(K)$ 也是三对角块状厄米矩 阵,其矩阵指数也可采用式(9)计算,则可得式 (11),其对应的量子电路如图 4 所示。不难发现, 若量子多路选择器能以 poly(n)的复杂度实现,则 采用本文方法计算 $e^{iK\omega}$ 的计算复杂度为 poly(n_x + n_y +d)。利用体素网格矩阵的分形特性和 KCQ 分解方法,可以很容易地构建高维体素网格矩阵指 数的量子电路,这里不再赘述。







5 量子模拟算例

考虑如图 5 所示的一个四边固支的二维板,待 求解变量为挠度 w 和转角 θ_x, θ_y ,因此每个节点需 引入一个虚变量。为方便计算,考虑板的参数均为 无量纲形式,板的边长为 15,厚度为 1,杨氏弹性模 量为 $E=2+\sin\left(\frac{2\pi}{5}r\right), r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$,泊松比 为 0.3,密度为 1。本文算例在经典计算机中通过 模拟量子计算规则进行编程实现。

5.1 哈密顿量模拟精度验证

首先分析本文提出的 KCQ 分解在计算矩阵

指数时的精度。根据图 5 所示网格生成刚度矩阵 K 后,取不同的时间步长 Δt ,采用本文提出的基于 KCQ 分解的哈密顿量的量子算法计算 $e^{i\mathbf{k} \cdot t}$,并将 结果与经典算法计算结果进行对比。根据图 5 所 示的体素网格可知,考虑算例的节点数为16×16, 变量数为 3,因此采用本文方法共需要 10 个量子 比特。经典算法采用经典动力学计算中常用的精 细积分方法^[32,33],误差采用 1-范数计算,结果图 6 所示。图 6 表明,随着时间步长 Δt 的减少, $e^{i\mathbf{k} \cdot t}$ 子计算的误差也逐渐减少,误差阶数为 $O(\Delta t^{2.98})$, 与采用式(11)计算的误差阶数相吻合,说明了本文 方法的正确性。



5.2 自振频率与振型计算

为进一步验证本文提出的基于 KCQ 分解的量子 哈密顿量的模拟算法的正确性,本文结合量子相位估 计算法^[34]计算该二维板的自振频率和振型。量子相 位估计是一种计算特征问题的量子算法,该算法的一 个关键步骤就是计算矩阵指数,其量子电路详见文献 [34]。采用提出的基于 KCQ 分解的量子哈密顿量的 模拟算法计算 e^{ixu},进而采用量子相位估计算法计算 自振频率和振型,并将结果与参考解进行对比,参考 解直接采用经典有限元计算。其中,根据 5.1 节可知 量子相位估计中哈密顿量的量子模拟需要的量子比 特数为 10,辅助比特选用 9 个,因此该算例共使用 19 个量子比特。表 2 给出了量子计算模拟的结果与经 典算法的对比,图 7 给出了量子算法得到的振型,其 中括号内为量子算法计算的振型和经典算法计算的 振型的相对误差。

表 2 经典算法与量子算法计算前 6 阶 自振频率的结果对比

Tab. 2 Comparison of the first six-order natural vibration frequencies calculated by classical and quantum algorithms

振型阶数	1	2	3	4	5	6
经典算法	0.0657	0.1220	0.1266	0.1760	0.2058	0.2127
量子算法	0.0668	0.1204	0.1250	0.1767	0.2059	0.2139
相对误差	1.66%	1.27%	1.30%	0.45%	0.07%	0.56%

不同自振频率阶数下的经典算法与量子算法 的自振频率计算值列入表 2。可以发现,相对误差 多数处于较低水平,各阶自振频率的相对误差均不 超过 2%。图 7 表明,本文提出的量子算法计算得 到的前六阶振型与经典算法计算得到的振型误差 均在 1%以内,这也说明了本文提出的量子算法在 计算自振频率和振型时,具有较高准确性。考虑算 例的误差主要来源于哈密顿量的量子模拟及量子 相位估计。根据 5.1 节可知,哈密顿量的量子模拟 的误差阶数为 $O(\Delta t^{2.98})$,与采用式(11)计算的误 差阶数相吻合,而量子相位估计的误差与辅助比特 数量相关。计算结果表明,基于 KCQ 分解的量子 哈密顿量的模拟算法具有极高精度。



6 结 论

本文针对固体力学问题中的量子算法的哈密 顿量的量子模拟(即矩阵指数 e^{ix})这一核心问题进 行深入研究。首先,将体素网格用于结构的建模, 引入虚变量的概念,并分析了体素网格矩阵的三对 角分形特性。在此基础上,综合利用循环矩阵、矩 阵直积、直和、泡利矩阵等提出了针对体素网格矩 阵的 KCQ 分解方法,可以将体素网格矩阵分解为 三组基本矩阵 k_n,c_n,q_n。基于 KCQ 分解,综合利 用循环门、相位门、量子多路选择器等,提出了计算 e^{ix}的高效量子模拟算法。在量子多路选择器未来 能够实现的基础上,本文构造的哈密顿量的量子模 拟方法具有 poly(logN)的计算复杂度优势。

本文对构建的量子电路进行了模拟,并通过与 精细积分方法计算结果对比,验证了提出的基于 KCQ分解的哈密顿量的量子模拟算法的正确性。 本文还进一步将提出的哈密顿量的量子模拟算法 与量子相位估计结合,计算二维固支板的自由振动 频率以及振型。通过与经典算法结果对比,验证了 本文提出的基于 KCQ 分解的哈密顿量模拟算法 的正确性。未来,本文还将进一步在体素网格基础 上扩展量子有限元的研究,拟将构造的哈密顿量的 量子模拟算法用于 HHL 算法和薛定谔化方法,以 研究固体力学静\动力学的量子模拟方法。

低阶厄米矩阵的矩阵指数的 附录 量子电路

假设一个 d 维厄米矩阵为 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} \end{bmatrix}$,其 矩阵指数 $e^{i\Delta A}$ 的量子电路记为 W_d ($A\Delta t$)。为设计 其量子电路,首先提出如下引理。

引理1 矩阵 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$ 为实数厄米矩阵,则 $e^{i\mathbf{A}} = \mathbf{R}(\theta(\mathbf{A})) T(\lambda_2(\mathbf{A})) \mathbf{X} T(\lambda_1(\mathbf{A})) \mathbf{X} \mathbf{R}^{\mathrm{H}}(\theta(\mathbf{A}))$ (\mathbf{I})

其中

$$\lambda_{1}(\mathbf{A}) = \frac{a+c}{2} - \frac{\sqrt{(a-c)^{2} + 4b^{2}}}{2}$$

$$\lambda_{2}(\mathbf{A}) = \frac{a+c}{2} + \frac{\sqrt{(a-c)^{2} + 4b^{2}}}{2} \quad (\text{II})$$

$$\theta(\mathbf{A}) = -\operatorname{ilog}\left[\frac{|b|(\lambda_{1} - c + bi)}{b\sqrt{(\lambda_{1} - c)^{2} + b^{2}}}\right]$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}(\theta)\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}(\theta) \qquad (\boldsymbol{\Pi})$$

其中

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1(\mathbf{A}) & 0\\ 0 & \lambda_2(\mathbf{A}) \end{pmatrix}$$
$$\lambda_1(\mathbf{A}) = \frac{a+c}{2} - \frac{\sqrt{(a-c)^2 + 4b^2}}{2}$$
$$\lambda_2(\mathbf{A}) = \frac{a+c}{2} + \frac{\sqrt{(a-c)^2 + 4b^2}}{2} \qquad (\mathbb{N})$$
$$\theta(\mathbf{A}) = -\operatorname{ilog}\left[\frac{|b|}{b}\frac{(\lambda_1 - c + bi)}{(\lambda_1 - c)^2 + b^2}\right]$$

e

世間有

$$e^{i\mathbf{A}} = \mathbf{R}(\theta) \begin{pmatrix} e^{i\lambda_1(A)} & 0 \\ 0 & e^{i\lambda_2(A)} \end{pmatrix} \mathbf{R}^{H}(\theta) =$$

 $\mathbf{R}(\theta(A)) \mathbf{T}(\lambda_2(A)) \mathbf{X} \mathbf{T}(\lambda_1(A)) \mathbf{X} \mathbf{R}^{H}(\theta(A)) \quad (\nabla)$
证毕。
当 $d=2$ 时,且 A 为实数对称矩阵时,根据引
理 1 可知

 $W_2(A\Delta t) = e^{i\Delta tA} =$ $R(\theta(A))T(\Delta t\lambda_2(A))XT(\Delta t\lambda_1(A))XR^{H}(\theta(A))$ (\mathbf{W}) 当 d=2 时, 目 A 为纯虚数时, 其形式必然为

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & ia \\ -ia & 0 \end{bmatrix}, 则进一步有$$
$$\mathbf{W}_{2}(\mathbf{A}\Delta t) = e^{i\Delta t} = e^{i\Delta t} \begin{bmatrix} 0 & ia \\ -ia & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{R}(a\Delta t)$$
(\!\!)

$$A = A_{1} + A_{2} + A_{3}$$

$$A_{1} = a_{11} \oplus a_{22}, A_{2} = (H \otimes I_{2}) [c \oplus (-c)] (H \otimes I_{2})$$

$$A_{3} = (T(0, 5\pi)H \otimes I_{2}) [q \oplus (-q)] (HT(1, 5\pi) \otimes I_{2})$$

$$(\mathbb{W})$$

其中
$$c(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{12} + \mathbf{a}_{21}), \mathbf{q}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_{12} - \mathbf{a}_{21}).$$

可以看到, a_{ii} ,c和 q均为 2×2 的厄米矩阵。 根据文献[19], W_4 (A Δt)可写为

$$W_{4}(A\Delta t) = [W_{2}(a_{11}\tau) \oplus W_{2}(a_{22}\tau)](H \otimes I_{2}) \times [W_{2}(\tau c) \oplus W_{2}(-\tau c)](H \otimes I_{2}) \times [(T(0, 5\pi)H) \otimes I_{2}] \times [(T(0, 5\pi)H) \otimes I_{2}] \times [(HT(1, 5\pi)) \otimes I_{2}](H \otimes I_{2}) \times [(HT(1, 5\pi)) \otimes I_{2}](H \otimes I_{2}) \times [W_{2}(\tau c) \oplus W_{2}(-\tau c)](H \otimes I_{2}) \times [W_{2}(\tau c) \oplus W_{2}(-\tau c)](H \otimes I_{2}) \times [W_{2}(a_{11}\tau) \oplus W_{2}(a_{22}\tau)] + O(\Delta t^{3})(\mathbb{K})]$$
其中 $\tau = \Delta t/2$ 。式(17,18,20)的量子电路如图 8

所示。



参考文献(References):

- [1] Jin S, Liu N N, Yu Y. Quantum simulation of partial differential equations: Applications and detailed analysis[J]. *Physical Review A*, 2023, 108(3):032603.
- [2] Jin S, Liu N N, Yu Y. Quantum simulation of partial differential equations via Schr dingerization [J]. *Physical Review Letters*, 2024, 133(23):230602.
- [3] Meng Z Y, Yang Y. Quantum computing of fluid dynamics using the hydrodynamic Schr dinger equation
 [J]. Physical Review Research, 2023.5(3):033182.
- [4] Lu Z, Yang Y. Quantum computing of reacting flows via Hamiltonian simulation [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2024, 40(1-4):105440.
- [5] Meng Z Y, Zhong J R, Xu S B, et al. Simulating unsteady flows on a superconducting quantum processor [J]. Communications Physics, 2024, 7:349.
- [6] Yang Y, Xiong S Y, Lu Z. Applications of the vortexsurface field to flow visualization, modelling and simulation[J]. Flow: Applications of Fluid Mechanics, 2023. Doi:10.1017/flo.2023.27.
- [7] Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations [J]. Physical Review Letters, 2009, 103(15):150502.
- [8] Gaitan F. Finding flows of a Navier-Stokes fluid through quantum computing [J]. NPJ Quantum Information, 2020, 6:61.
- [9] Bharadwaj S S, Sreenivasan K R. Hybrid quantum algorithms for flow problems [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2023, 120(49): e2311014120.
- [10] Liu Y Y,Liu J K,Raney J R,et al. Quantum computing for solid mechanics and structural engineering-A demonstration with Variational Quantum Eigensolver [J]. Extreme Mechanics Letters, 2024,67:102117.
- [11] Zhang M, Dong L H, Zeng Y, et al. Improved circuit implementation of the HHL algorithm and its simulations on QISKIT[J]. Scientific Reports, 2022, 12: 13287.
- [12] Arora A, Ward B M, Oskay C. An implementation of the finite element method in hybrid classical/quantum computers[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2025, 248:104354.
- [13] Nguyen V D, Wu L, Remacle F, et al. A quantum annealing-sequential quadratic programming assisted fi-

nite element simulation for non-linear and history-dependent mechanical problems [J]. *European Journal* of Mechanics-A/Solids, 2024, **105**, 105254.

- [14] Sukulthanasorn N, Xiao J S, Wagatsuma K, et al. A novel design update framework for topology optimization with quantum annealing: Application to truss and continuum structures[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2025,437:117746.
- [15] Steijl R, Barakos G N. Parallel evaluation of quantum algorithms for computational fluid dynamics[J]. Computers & Fluids, 2018, 173:22-28.
- [16] Kuang Z T, Xu Y C, Huang Q, et al. Quantum computing with error mitigation for data-driven computational homogenization [J]. Composite Structures, 2025,351:118625.
- [17] Xu Y C, Yang J, Kuang Z T, et al. Quantum computing enhanced distance-minimizing data-driven computational mechanics[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2024, 419:116675.
- [18] Yalovetzky R, Minssen P, Herman D, et al. Solving linear systems on quantum hardware with hybrid HHL++[J]. Scientific Reports, 2024, 14: 20610.
- [19] Cerezo M, Arrasmith A, Babbush R, et al. Variational quantum algorithms [J]. Nature Reviews Physics, 2021,3(9):625-644.
- [20] Zienkiewicz O C, Taylor R L. Finite Element Method[M]. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000.
- [21] Berry D W, Ahokas G, Cleve R, et al. Efficient quantum algorithms for simulating sparse hamiltonians
 [J]. Communications in Mathematical Physics, 2007,
 270(2):359-371.
- [22] Childs A M, Berry D W. Black-box Hamiltonian simulation and unitary implementation [J]. Quantum Information and Computation, 2012, 12(1-2):29-62.
- [23] Ahokas G R. Improved Algorithms for Approximate Quantum Fourier Transforms and Sparse Hamiltonian Simulations[D]. University of Calgary, 2004.
- [24] Huang M C, Liu C, Guo Y L, et al. A mechanicsbased data-free Problem Independent Machine Learning (PIML) model for large-scale structural analysis and design optimization[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2024, 193:105893.
- [25] Huang M C, Cui T C, Liu C, et al. A Problem-Independent Machine Learning (PIML) enhanced substructure-based approach for large-scale structural

analysis and topology optimization of linear elastic structures[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2023, **63**: 102041.

- [26] Huang M C, Du Z L, Liu C, et al. Problem-independent machine learning (PIML)-based topology optimization: A universal approach[J]. Extreme Mechanics Letters, 2022, 56:101887.
- [27] 陈佳临. 可编程量子计算架构研究[D]. 复旦大学, 2014. (CHEN Jia-lin. Programmable Architecture Research of Quantum Computing[D]. Fudan University, 2014. (in Chinese))
- [28] Wiebe N, Braun D, Lloyd S. Quantum algorithm for data fitting [J]. Physical Review Letters, 2012, 109 (5):050505.
- [29] Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. Quantum support vector machine for big data classification[J]. Physical Review Letters, 2014, 113(13):130503.

- [30] Cong I, Duan L M. Quantum discriminant analysis for dimensionality reduction and classification [J]. New Journal of Physics, 2016, 18(7):073011.
- [31] Li Y M, Liu H L, Pan S J, et al. Quantum k-medoids algorithm using parallel amplitude estimation [J]. *Physical Review A*, 2023, 107(2):022421.
- [32] Zhu L, Ye K Q, Huang D W, et al. An adaptively filtered precise integration method considering perturbation for stochastic dynamics problems[J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 2023, 36(2): 317-326.
- [33] Zhong W X, Williams F W. A precise time step integration method[J]. Journal of Mechanical Engineering Science, 1994, 208(6):427-430.
- [34] Nielsen M A, Chuang Isaac L. Quantum Computation and Quantum Information [M]. Cambridge University press, 2010.

Quantum simulation of Hamiltonian in solid mechanics based on voxel representation

WU Feng, LI Chen, YANG Yu-xiang, ZHU Li, GUO Xu*

(School of Mechanics and Aerospace Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024)

Abstract: Quantum simulation has emerged as a crucial approach to overcoming the bottlenecks of computational efficiency and storage capacity in large-scale mechanical calculations. However, the effective decomposition of Hermitian matrices obtained after spatial discretization remains one of the key challenges in the quantum simulation of mechanical problems. In this study, the solution domain is discretized using voxel grids, and the structural properties of the resulting matrices (referred to as voxel grid matrices) are thoroughly analyzed. An innovative KCQ decomposition method is proposed, which integrates mathematical techniques such as circulant matrices, matrix direct products, direct sums, and Pauli matrices. It enables the decomposition of voxel grid matrices into three sets of basic matrices, namely $k_n \cdot c_n \cdot q_n$. Based on the KCQ decomposition.combined with technologies such as quantum Fourier transform and quantum multiplexers, an efficient Hamiltonian quantum simulation algorithm for voxel grid matrices is further constructed. The correctness and effectiveness of the proposed quantum algorithm are verified through simulation experiments on the free vibration of two-dimensional heterogeneous plates, providing a novel methodological support for the quantum simulation of solid mechanics problems.

Key words: quantum algorithm; solid mechanics; voxel mesh grids; hamiltonian; quantum circuit