展望/观点

量子计算: 计算力学的新焦点

许永春[1]　匡增涛[1]　黄　群[1]　阳　杰[1]　胡　衡[1,2,*]

[1] 武汉大学土木建筑工程学院, 武汉 430072
[2] 宁夏大学数学统计学院, 银川 750021

摘　要　量子计算在算力上有望指数级超越经典计算, 然而亟需拓展实际应用场景. 计算力学应用场景丰富, 但面临多尺度、多物理场、极端环境等问题带来的算力挑战. 因此, 两者在算力和应用场景上的互补融合式发展前景广阔. 本文旨在梳理量子计算在计算力学中的应用现状, 并展望该领域未来的发展趋势.

关键词　量子计算, 计算力学, 算力, 计算复杂度

中图分类号: O302　　**文献标识码**: A

DOI: 10.6052/1000-0992-24-039　　CSTR: 32046.14.1000-0992-24-039

收稿日期: 2024-10-28; 录用日期: 2024-12-30; 在线出版日期: 2025-01-03

* E-mail: huheng@whu.edu.cn

引用方式: 许永春, 匡增涛, 黄群, 阳杰, 胡衡. 量子计算: 计算力学的新焦点. 力学进展, 2025, 55(2): 419-430

Xu Y C, Kuang Z T, Huang Q, Yang J, Hu H. Quantum computing: The new focus in computational mechanics. *Advances in Mechanics*, 2025, 55(2): 419-430

1 引 言

过去几十年, 基于晶体管的经典计算机算力增长遵循摩尔定律. 该定律预测, 集成电路上晶体管的数量大约每两年翻一番 (Schaller 1997), 其性能也增加一倍. 但是, 随着晶体管尺寸的不断缩小, 量子效应和尺寸效应开始显现, 导致传统的集成电路设计理论不再适用. 因此, 摩尔定律难以继续维持 (Lundstrom 2003, 郭光灿 2022), 经典计算机算力的持续增长面临挑战. 量子计算以其革命性的计算方式, 为新的算力突破带来了希望. 得益于量子叠加等物理特性, 量子计算机拥有强大的信息处理能力, 可在某些问题的求解效率上超越经典计算机 (Zhong et al. 2020). 近年来, 量子计算取得显著进展, 如量子优越性的证明 (Arute et al. 2019, Zhong et al. 2020)、大规模量子纠缠实验 (Song et al. 2019) 及量子实用性计算演示 (Kim et al. 2023) 等, 为探索量子计算的应用带来了巨大机遇.

与此同时, 高效的数值模拟始终是计算力学的核心目标. 经典计算机在处理诸如大规模结构仿真 (Mukherjee et al. 2021)、复杂流体模拟 (Lye et al. 2020) 以及复合材料的多尺度计算 (Geers et al. 2010) 等任务时, 往往需要牺牲部分精度以缓解算力的不足, 导致难以兼顾精度及效率. 相对而言, 借助其在处理复杂系统上的天然优势, 量子计算机有望高效地模拟物理现象 (Feynman 1982). 因此, 越来越多的研究尝试将量子计算应用于力学问题的求解, 以期突破经典计算的局限. 这些研究不仅展现了量子计算处理复杂任务的潜力, 也为计算力学未来的发展开辟了新道路. 本文旨在梳理量子计算在计算力学中的应用现状, 并对该领域未来的发展趋势进行展望.

2 量子计算在计算力学中的应用

在探讨量子计算在计算力学中的应用前, 首先简要介绍量子计算的核心原理. 量子计算机的基本运算单元是量子比特 (qubit). 与经典比特不同, 一个量子比特可以同时处于 0 和 1 两种状态的叠加 (superposition), 表示为 $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$. 其中 $|\Psi\rangle$ 表示量子态向量, 满足 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, 即为单位向量. 此外, 量子门 (quantum gate) 被用来操作量子态, 可用幺正矩阵 $\boldsymbol{U}$ 来表示, 满足 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^\dagger = \boldsymbol{U}^\dagger\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$. 常见的量子计算流程见图 1. 在数据输入阶段, 可通过振幅编码 (amplitude encoding)、基底编码 (basis encoding) 或量子硬件如 qRAM (quantum random access memory, Giovannetti et al. 2008) 等方式制备初始量子态 $|\Psi\rangle$. 初态制备后, 通过量子门对量子态进行幺正操作 $|\Psi\rangle_{末} = U|\Psi\rangle$, 以实现信息的处理计算. 结果输出时, 对末态进行测量以获得某个量子基态的概率, 从而提取量子态中的信息. 例如, 对量子态 $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 进行测量, 可得其处于 $|0\rangle$ 态的概率 $p_0 = |\alpha|^2$.

得益于量子叠加等特性, 量子计算机的计算能力随着量子比特数目指数级增加 (Grover 2001, Nielsen & Chuang 2010), 进而在一些问题的求解上展现出超越经典计算的优势, 如线性代数方程求解、薛定谔方程求解、非线性问题求解、傅里叶变换、距离计算以及优化问题等. 接下来, 本文将介绍这些问题相应的量子算法, 及其在计算力学中的应用.

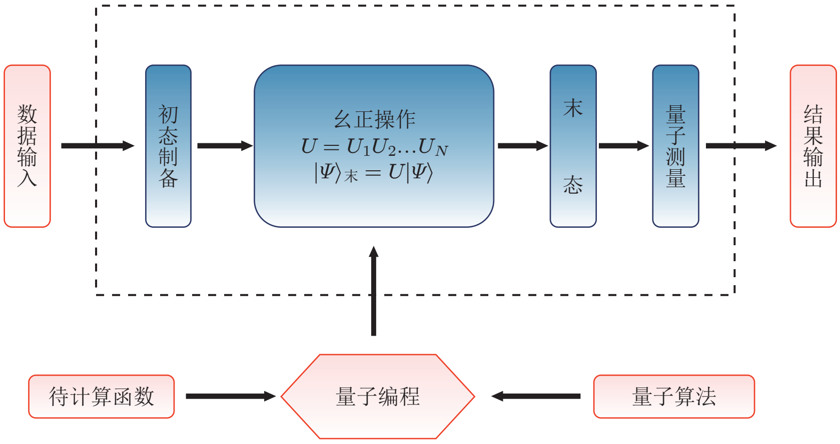

图 1

量子计算流程示意图 (郭光灿 2022)

2.1　线性代数方程

形如 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的线性代数方程求解是很多力学问题的核心. 基于经典计算机的线性代数方程求解算法 (如高斯消元法) 的计算复杂度随方程维数增加而呈多项式级增加, 而量子计算有望指数级降低复杂度. 下面将介绍两类线性代数方程求解量子算法, 以及它们在计算力学中的应用.

第一类是以提出者命名的 Harrow-Hassidim-Lloyd 量子算法 (HHL, Harrow et al. 2009). HHL 算法的核心思想是: 利用相位估计算法求解系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值, 进而生成与解向量对应的量子态 $|x\rangle$, 可相比经典方法指数级降低方程求解复杂度. Montanaro 和 Pallister (2016) 结合有限元法和 HHL 算法求解偏微分方程, 并证明 HHL 算法的优势会随着偏微分方程的维数增加而越发显著. Bharadwaj 和 Sreenivasan (2023) 利用有限差分法和欧拉法离散流体力学偏微分方程, 随后在量子虚拟机上使用 HHL 算法模拟了 Poiseuille 流动和 Couette 流动. 需要指出的是, 当前的量子计算机硬件水平尚处于“中等规模含噪量子时代”(noisy intermediate-scale quantum, Preskill 2018), 即量子比特数目有限且含噪声. 然而, HHL 算法对量子比特数目及精度要求较高, 导致当前阶段在真实量子计算机上利用 HHL 算法求解大规模线性代数方程仍面临挑战.

第二类是基于变分量子算法的线性求解器, 如变分量子特征值求解器 (variational quantum eigenvalue solver, VQE, Peruzzo et al. 2014) 和变分量子线性求解器 (variational quantum linear solver, VQLS, Bravo-Prieto et al. 2023). 与 HHL 算法相比, 变分量子算法所需的量子比特数较少、量子线路更浅, 更适合在“中等规模含噪量子时代”的量子计算机上运行. 变分量子算法的基本原理为: 通过变分量子态 (ansatz) 猜测线性代数方程的解 $|x\rangle$, 并利用量子—经典混合计算的方式不断优化猜测, 以获得真实解的逼近. Liu Y 等 (2024) 结合 VQE 和有限元法, 利用量子虚拟机和超导量子计算机求解了结构的自振频率. Trahan 等 (2023) 基于有限元法离散偏微分方程, 并使用 VQLS 求解离散后的线性代数方程, 在量子虚拟机上实现了一维泊松方程、热方程以及波动方程的求解. Ali 和 Kabel (2023) 进一步使用 VQLS 在超导量子计算机上求解了一维泊松方程.

Chen 等 (2024) 结合 VQLS 和有限差分法, 在超导量子计算机上实现了非定常声波传播的流体力学仿真.

然而, 无论是 HHL 算法, 还是变分量子算法, 其均面临数据输入和输出的困难. 具体而言, 将系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 及向量 $\boldsymbol{b}$ 输入至量子计算机中, 需设计高效的量子线路. 同时, 将求解所得的量子态 $|x\rangle$ 完整地从量子计算机中输出, 需对量子态的每个振幅 (amplitude) 进行测量. 这些输入和输出操作, 均可能会破坏量子算法的复杂度优势 (Morales et al. 2024). 针对输入问题, 需依赖量子硬件的研制 (如 qRAM, Giovannetti et al. 2008) 以实现高效的初态制备. 针对输出问题, 可设计量子算法来高效地获得力学问题解的部分信息, 从而避免整个量子态的读取. 例如, Henderson 等 (2024) 结合 HHL 算法和 Hadamard Test 量子算法求解地质裂缝网络问题, 仅需测量一个量子比特即可获得局部区域的平均应力信息.

此外, 值得注意的是, 许多力学问题可通过显式 (explicit) 求解格式来避免线性代数方程的直接求解. 例如, Liu 等 (2023) 提出了一种用于求解对流—扩散方程的量子计算框架, 将微分方程的微分算子转化为幺正算符, 继而利用量子门执行该幺正运算, 在量子虚拟机上实现了针对 Helmholtz 方程、Burgers 方程和 Navier-Stokes 方程在内的一系列流体动力学问题的求解.

2.2 薛定谔方程

很多力学问题由微分方程刻画, 故而微分方程求解是计算力学的基本任务. 在量子力学中, 薛定谔方程 $i\hbar\partial\left|\Psi\left(t\right)\right\rangle/\partial t = H\left|\Psi\left(0\right)\right\rangle$ 是描述量子态演化的基本方程, 其形式同样为微分方程. 受此启发, 部分研究者通过将力学微分方程转换为薛定谔方程, 进而利用量子计算完成求解.

求解薛定谔方程的一个核心方法是量子模拟 (quantum simulation), 其核心任务是: 给定一个量子系统的哈密顿量 H, 根据薛定谔方程模拟该系统的量子态随着时间的演化 $\left|\Psi\left(t\right)\right\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H/\hbar t}\left|\Psi\left(0\right)\right\rangle$. 实现该模拟的途径有很多种 (Georgescu et al. 2014), 其中基于量子门的方法称为数字量子模拟 (digital quantum simulation), 它的核心是将时间演化算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H/\hbar t}$ 近似为量子门操作 U, 继而在量子计算机上实现 $\left|\Psi\left(t\right)\right\rangle = U\left|\Psi\left(0\right)\right\rangle$.

Jin 等 (2023) 提出了一种薛定谔化 (Schrödingerisation) 方法, 可将任意线性偏微分方程转化为薛定谔方程. 其核心思想是: 针对形如 $\partial u(x,t)/\partial t = Au(x,t)$ 的线性偏微分方程, 引入中间变量 $w(x,p,t) = \mathrm{e}^{-p}u(x,t)$, 再对 w 进行傅里叶变换, 即可将原方程转化为薛定谔方程 $i\partial\tilde{w}/\partial t = H\tilde{w}$. 在完成该转换后, 可利用量子模拟将哈密顿量 H 的时间演化算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}$ 近似为量子门操作, 进而实现薛定谔方程的求解. 利用上述方法, 该研究开展了 Liouville、热传导等方程的数值求解. 随后基于此方法, Lu 和 Yang (2024) 提出了一种高效的流体力学量子算法, 将反应流方程转换成薛定谔方程, 并结合量子谱方法和量子有限差分法求解, 在量子虚拟机上对一维及二维反应流进行了模拟. 除薛定谔化之外, Sato 等 (2024) 还提出了一种用于求解双曲型偏微分方程的量子模拟方法, 可结合有限差分法构建微分算符对应的量子线路, 并在超导量子计算机上完成了一维波动方程的求解.

2.3 非线性问题

计算力学涉及纷繁多样的非线性问题求解, 例如几何非线性和材料非线性等. 有研究尝试使

用量子计算来降低非线性问题的求解成本, 这些研究可大致分为两类: 将非线性问题线性化处理得到线性代数方程组, 并利用量子线性求解器进行求解; 将非线性问题映射成薛定谔方程, 继而采用量子模拟进行求解.

针对第一类求解方式, Leyton 和 Osborne (2008) 率先结合欧拉法和 HHL 算法求解非线性微分方程, 可指数级降低由方程维度带来的信息储存成本. Liu 等 (2021) 结合卡勒曼线性化和 HHL 算法求解非线性微分方程, 其复杂度仅随方程中的时间变量多项式级增加. Xue 等 (2021, 2022) 利用牛顿—拉弗森方法和同伦摄动法将非线性代数方程线性化, 进而使用 HHL 算法完成求解. Xu 等 (2024a) 利用数值渐近法将非线性问题线性化, 并采用 VQLS 以及新提出的量子线性求解器 q-Jacobi 进行求解. 该研究在 Quafu 量子计算云平台的超导量子计算机上完成了非线性弹簧—质量问题的求解, 获得了精度达 98% 的非线性解路径.

针对第二类求解方式, Lloyd 等 (2020) 将非线性微分方程转换成非线性薛定谔方程, 并利用量子模拟完成求解, 相比经典方法可指数级降低计算复杂度. 该方法利用量子态的幅值同时表示多个初始向量, 随后利用量子门实现向量之间的信息交互, 从而完成非线性运算. Meng 和 Yang (2023) 通过推广 Madelung 变换将 Navier-Stokes 方程转化为流体薛定谔方程, 描述了含动能耗散和有限涡量的不可压/可压缩流动, 并在量子虚拟机上模拟了一维稳态流、二维泰勒格林涡. 随后基于此方法, Meng 等 (2024) 进一步利用 10 个超导量子比特实现了可压缩渐扩势流和薛定谔涡流的模拟, 较为准确地预测了流动演化过程.

需要指出的是, 利用量子计算求解非线性问题的方式并非局限于上述两类. 例如, Lubasch 等 (2020) 提出了一种基于变分量子算法的非线性求解器, 利用多个变分量子态来高效地处理非线性关系, 并在超导量子计算机上演示了一维非线性薛定谔方程的求解.

2.4 傅里叶变换

傅里叶变换在计算力学中有广泛应用, 核心原因在于它能够将复杂的时域/空间域问题转换到频域, 从而使问题变得更易求解. 例如, 傅里叶变换可以把二阶导数变成平方运算, 进而简化微分方程的求解. 常用的快速傅里叶变换算法 (fast Fourier transform, FFT) 的计算复杂度为 $O\left(N\log N\right)$, 而量子傅里叶变换算法 (quantum Fourier transform, QFT, Coppersmith 1994) 的计算复杂度仅为 $O\left(\log^2 N\right)$. 因此, 一些研究尝试将量子傅里叶变换应用到力学问题的求解中.

基于快速傅里叶变换的均匀化 (FFT-Homogenization, Moulinec & Suquet 1998) 是一种复合材料多尺度仿真方法. 该方法通过代表体元 (representative volume element, RVE) 的均匀化计算获得复合材料的等效力学性质, 例如等效刚度矩阵. 其核心思想是将 RVE 均匀化计算问题转换成 Lippmann-Schwinger 方程, 并利用快速傅里叶变换进行求解, 可避免传统有限元方法中复杂的网格划分. Liu B 等 (2024) 在该方法中引入了量子傅里叶变换算法, 以替换经典计算中的快速傅里叶变换算法, 指数级降低了均匀化计算的复杂度, 并在量子虚拟机上执行了一维和二维泊松方程以及一维复合杆结构的均匀化计算. Givois 等 (2022) 进行了类似的研究, 还采用了振幅估计量子算法来加速量子态的读取, 并利用量子虚拟机求解了二维复合材料的等效刚度矩阵.

此外, 需要指出的是, 量子傅里叶变换是前文很多算法的重要组成部分. 例如, HHL 算法

(Harrow et al. 2009) 利用量子傅里叶变换将系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值编码至量子态的相位中. 又如, 薛定谔化方法 (Jin et al. 2023, Lu & Yang 2024) 利用量子傅里叶变换完成线性偏微分方程到薛定谔方程的映射. 因此, 这些方法在计算力学中的应用, 同样可以被视为量子傅里叶变换的应用.

2.5 距离计算

由于可评估数据之间的相似度, 距离度量在数据科学中至关重要. 量子计算可通过交换测试 (swap test, Buhrman et al. 2001) 实现两个数据间的距离计算, 且相比经典计算可指数级降低计算复杂度. 在数据科学中, 距离计算量子算法已经得到了一系列应用. 例如, Lloyd 等 (2013) 在监督和无监督机器学习中实现了欧氏距离的量子计算, 提出了高效的数据聚类算法. Rebentrost 等 (2014) 在最小二乘支持向量机中使用了余弦距离量子算法, 完成了数据的高效分类. Wiebe 等 (2015) 在 K 近邻搜索中结合多种量子算法计算了余弦距离并完成了数据搜索, 求得了余弦距离的最小值.

上述研究表明, 在计算力学与数据科学的交叉领域, 距离计算量子算法具备潜在应用价值. 然而, 该算法需要利用量子态的振幅表示数据, 导致数据必须进行归一化处理. 而归一化处理增加了计算复杂度, 可能削弱量子算法的优势. 因此, 在计算力学中为距离计算量子算法寻找合适的应用场景存在挑战.

数据驱动计算力学 (Kirchdoerfer & Ortiz 2016) 通过最小化本构数据和守恒约束之间的距离, 以完成力学边值问题的求解, 其中距离计算带来主要的成本. 在该方法中, 由于本构数据为离线准备, 其归一化过程亦能离线完成, 可避免增加在线计算复杂度. 因此, 数据驱动计算力学为距离计算量子算法提供了理想的应用场景. Xu 等 (2024b) 将距离计算量子算法引入数据驱动计算力学, 提出了量子计算增强的数据驱动计算力学方法, 指数级降低了距离计算的复杂度. 该方法在本源超导量子计算机“悟源”上进行了物理实现, 成功求解了涉及材料非线性的弹簧—杆问题, 完成了固体力学问题在真实量子计算机上的求解. Kuang 等 (2025) 进一步将该方法推广至复合材料结构的多尺度仿真, 分析了基于交换测试和 Hadamard 门的两类距离计算量子算法在含噪量子计算机上的表现, 同时使用零噪声外推 (zero-noise extrapolation, Temme et al. 2017, Li & Benjamin 2017) 量子误差缓解技术提高了计算精度, 并在量子虚拟机上实现了编织型复合壳体的多尺度仿真 (见**图 2**).

2.6 量子退火

前文介绍的研究大多基于通用量子计算机, 可通过量子门的编程设计实现通用量子计算任务. 实际上, 还有另一类用于求解特定问题的量子计算机. 例如, 用于解决优化问题的量子退火机 (quantum annealer, Kadowaki & Nishimori 1998)、用于实现高斯玻色取样的“九章”光量子原型机 (Zhong et al. 2020), 以及近期成功求解费米子哈伯德模型的“天元”超冷原子量子模拟机 (Shao et al. 2024).

其中, 量子退火机因其在优化计算中的独特优势, 受到计算力学研究者的广泛关注. 在使用

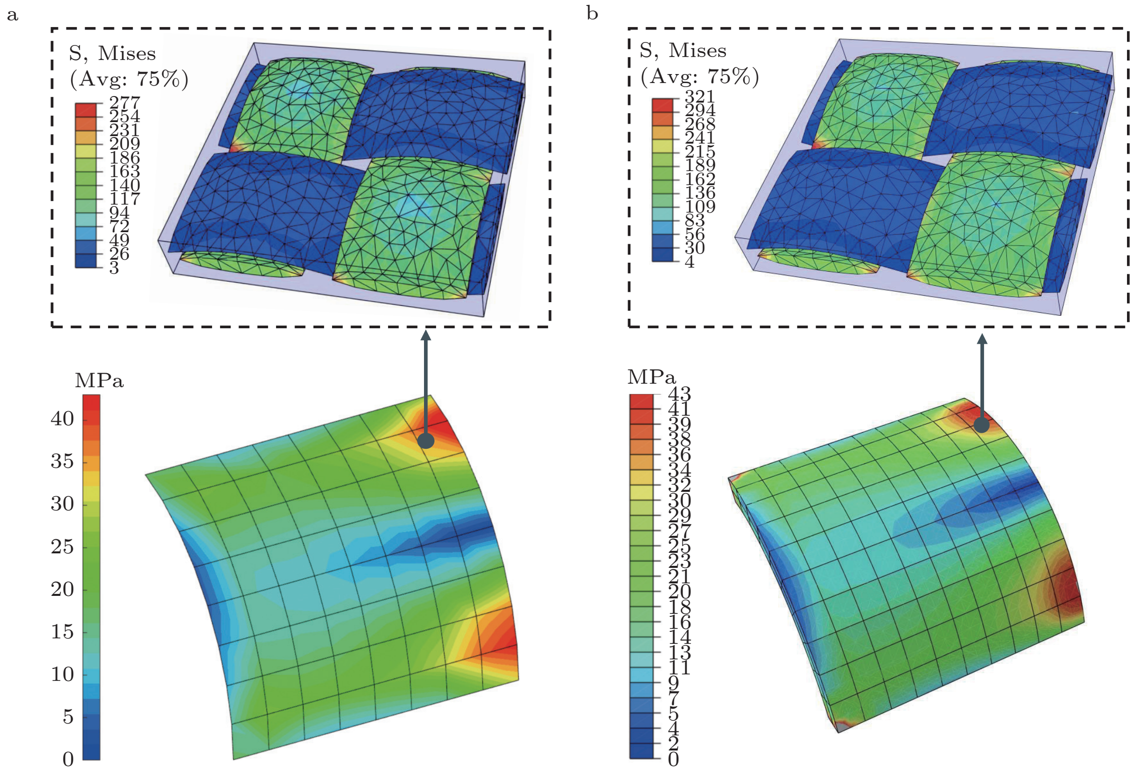

图 2

编织型复合壳体的多尺度仿真对比 (Kuang et al. 2025). (a) 量子计算增强的数据驱动计算均匀化方法, (b) 并发多尺度有限元方法

量子退火机求解问题时, 首先需将问题转换为伊辛模型 (Ising model) 或二次无约束二进制优化问题 (quadratic unconstrained binary optimization, QUBO, Yarkoni et al. 2022), 然后在解空间中搜索目标函数的全局最小值. 相比经典模拟退火, 量子退火利用量子隧穿效应, 能够更有效地跨越能量屏障, 避免陷入局部最优解, 从而更高效地找到全局最优解.

很多研究将力学问题转化为 QUBO 问题, 从而利用量子退火机完成求解. Raisuddin 和 De (2022) 利用有限元法将方程离散得到线性代数方程, 继而将线性代数方程转化成 QUBO 问题, 并利用 D-Wave 量子退火机求解了一维和二维泊松方程以及一维波动方程. Wils 和 Chen (2023) 采用符号计算方法将桁架优化问题转化为 QUBO 问题, 并利用 D-Wave 量子退火机求解了桁架质量优化问题, 得到了与经典计算参考解一致的结果. Ye 等 (2023) 提出了基于量子退火的拓扑优化方法, 可在材料使用量不变的条件下优化材料的分布, 并利用 D-Wave 量子退火机实现了二维材料的拓扑优化. Key 和 Freinberger (2024) 提出了基于最小余能原理的量子优化算法, 在利用量子退火算法求解结构响应的同时优化设计参数, 并实现了自重载荷下杆件系统的截面积的优化. Xiao 等 (2024) 将机器学习模型的训练过程转化为 QUBO 问题, 进而利用量子退火机优化超参数和物理输入参数, 并在量子虚拟机上进行了滑坡风险评估中流动距离的预测.

3 结 语

目前, 量子计算在计算力学中的应用仍处探索阶段, 尚面临算法和硬件的双重挑战. 在算法方面, 具备复杂度优势的量子算法数量有限, 且应用场景亟待拓展. 为此, 一方面应融合量子信息理论与力学问题特性, 开发新的量子求解算法, 另一方面还需发掘更多能够发挥量子优势的计算力学问题. 例如, 开发可高效结果输出的量子算法; 探索有限元法和量子信息的深度融合; 降低多尺度、多物理场、极端环境等问题的计算复杂度等. 在硬件方面, 现有量子计算机的量子比特数量受限且存在噪声干扰, 难以支持大规模问题的高精度求解. 为此, 一方面要依赖物理学家研发更先进的量子硬件, 另一方面亟需发展误差纠正与缓解技术以降低硬件噪声对精度的干扰. 例如, 提高量子门和测量操作的精度、量子比特的数目和相干时间; 制造用于高效数据输入的量子硬件; 开发量子计算与经典计算的协同框架等. 展望未来, 随着算法与硬件的持续进步, 量子计算有望在求解特定力学问题上展现“量子优越性”, 即在计算效率或规模上显著超越经典计算, 而这将成为计算力学发展史上里程碑式的突破.

致 谢 国家科技部重点研发计划 (2022YFE0113100) 和国家自然科学基金项目 (12432009, 11920101002, 12202322, 12172262) 资助.

参 考 文 献

郭光灿. 2022. 颠覆: 迎接第二次量子革命. 北京: 科学出版社 (Guo G C. 2022. Subversion: Embracing the second quantum revolution. Beijing: Science Press).

Ali M, Kabel M. 2023. Performance study of variational quantum algorithms for solving the poisson equation on a quantum computer. *Physical Review Applied*, **20**: 014054.

Arute F, Arya K, Babbush R, et al. 2019. Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, **574**: 505-510.

Bharadwaj S S, Sreenivasan K R. 2023. Hybrid quantum algorithms for flow problems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **120**: e2311014120.

Bravo-Prieto C, LaRose R, Cerezo M, et al. 2023. Variational quantum linear solver. *Quantum*, **7**: 1188.

Buhrman H, Cleve R, Watrous J, et al. 2001. Quantum fingerprinting. *Physical Review Letters*, **87**: 167902.

Chen Z, Ma T, Ye C, et al. 2024. Enabling large-scale and high-precision fluid simulations on near-term quantum computers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **432**: 117428.

Coppersmith D. 1994. An approximate Fourier transform useful in quantum factoring. *IBM Research Report*: RC-19642.

Feynman R P. 1982. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics*, **21**: 6-7.

Geers M G, Kouznetsova V G, Brekelmans W. 2010. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **234**: 2175-2182.

Georgescu I M, Ashhab S, Nori F. 2014. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, **86**: 153-185.

Giovannetti V, Lloyd S, Maccone L. 2008. Quantum random access memory. *Physical Review Letters*, **100**: 160501.

Givois F, Kabel M, Gauger N. 2022. QFT-based homogenization. *arXiv preprint arXiv*: 2207.12949.

Grover L K. 2001. From Schrödinger's equation to the quantum search algorithm. *American Journal of Physics*, **69**: 769-777.

Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. 2009. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Physical Review Letters*, **103**: 150502.

Henderson J M, Kath J, Golden J K, et al. 2024. Addressing quantum's "fine print" with efficient state preparation and information extraction for quantum algorithms and geologic fracture networks. *Scientific Reports*, **14**: 3592.

Jin S, Liu N, Yu Y. 2023. Quantum simulation of partial differential equations: Applications and detailed analysis. *Physical Review A*, **108**: 032603.

Kadowaki T, Nishimori, H. 1998. Quantum annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*, **58**: 5355.

Key F, Freinberger L. 2024. A formulation of structural design optimization problems for quantum annealing. *Mathematics*, **12**: 482.

Kim Y, Eddins A, Anand S, et al. 2023. Evidence for the utility of quantum computing before fault tolerance. *Nature*, **618**: 500-505.

Kirchdoerfer T, Ortiz M. 2016. Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **304**: 81-101.

Kuang Z, Xu Y, Huang Q, et al. 2025. Quantum computing with error mitigation for data-driven computational mechanics. *Composite Structures*, **351**: 118625.

Leyton S K, Osborne T J. 2008. A quantum algorithm to solve nonlinear differential equations. *arXiv preprint arXiv*: 0812.4423.

Li Y, Benjamin S C. 2017. Efficient variational quantum simulator incorporating active error minimization. *Physical Review X*, **7**: 021050.

Liu B, Ortiz M, Cirak F. 2024. Towards quantum computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **432**: 117403.

Liu B F, Zhu L X, He G W. 2023. Quantum implementation of numerical methods for convection-diffusion equations: Toward computational fluid dynamics. *Communications in Computational Physics*, **33**: 425-451.

Liu J P, Kolden H Ø, Krovi H K, et al. 2021. Efficient quantum algorithm for dissipative nonlinear differential equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **118**: 2026805118.

Liu Y, Liu J, Raney J R, et al. 2024. Quantum computing for solid mechanics and structural engineering - A demonstration with variational quantum eigensolver. *Extreme Mechanics Letters*, **67**: 102117.

Lloyd S, Mohseni M, Rebentrost P. 2013. Quantum algorithms for supervised and unsupervised machine learning. *arXiv preprint arXiv*: 1307.0411.

Lloyd S, De Palma G, Gokler C, et al. 2020. Quantum algorithm for nonlinear differential equations. *arXiv preprint arXiv*: 2011.06571.

Lu Z, Yang Y. 2024. Quantum computing of reacting flows via Hamiltonian simulation. *Proceedings of the Combustion Institute*, **40**: 105440.

Lubasch M, Joo J, Moinier P, et al. 2020. Variational quantum algorithms for nonlinear problems. *Physical Review A*, **101**: 010301.

Lundstrom M. 2003. Moore's law forever. *Science*, **299**: 210-211.

Lye K O, Mishra S, Ray D. 2020. Deep learning observables in computational fluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, **410**: 109339.

Morales M E, Pira L, Schleich P, et al. 2024. Quantum linear system solvers: A survey of algorithms and applications. *arXiv preprint arXiv*: 2411.02522.

Meng Z, Yang Y. 2023. Quantum computing of fluid dynamics using the hydrodynamic Schrödinger equation. *Physical Review Research*, **5**: 033182.

Meng Z, Zhong J, Xu S, et al. 2024. Simulating unsteady fluid flows on a superconducting quantum processor. *Communications Physics*, **7**: 349.

Montanaro A, Pallister S. 2016. Quantum algorithms and the finite element method. *Physical Review A*, **93**: 032324.

Moulinec H, Suquet P. 1998. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **157**: 69-94.

Mukherjee S, Lu D, Raghavan B, et al. 2021. Accelerating large-scale topology optimization: State-of-the-art and challenges. *Archives of Computational Methods in Engineering*, **28**: 4549-4571.

Nielsen M A, Chuang I L. 2010. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: Cambridge University Press.

Peruzzo A, McClean J, Shadbolt P, et al. 2014. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, **5**: 4213.

Preskill J. 2018. Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*, **2**: 79.

Raisuddin O M, De S. 2022. FEqa: Finite element computations on quantum annealers. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **395**: 115014.

Rebentrost P, Mohseni M, Lloyd S. 2014. Quantum support vector machine for big data classification. *Physical Review Letters*, **113**: 130503.

Sato Y, Kondo R, Hamamura I, et al. 2024. Hamiltonian simulation for hyperbolic partial differential equations by scalable quantum circuits. *Physical Review Research*, **6**: 033246.

Schaller R R. 1997. Moore's law: Past, present and future. *IEEE spectrum* **34**: 52-59.

Shao H J, Wang Y X, Zhu D Z, et al. 2024. Antiferromagnetic phase transition in a 3D fermionic Hubbard model. *Nature*, **632**: 1-6.

Song C, Xu K, Li H, et al. 2019. Generation of multicomponent atomic Schrödinger cat states of up to 20 qubits. *Science*, **365**: 574-577.

Temme K, Bravyi S, Gambetta J M. 2017. Error mitigation for short-depth quantum circuits. *Physical Review Letters*, **119**: 180509.

Trahan C J, Loveland M, Davis N, et al. 2023. A variational quantum linear solver application to discrete finite-element methods. *Entropy*, **25**: 580.

Wiebe N, Kapoor A, Svore K M. 2015. Quantum nearest-neighbor algorithms for machine learning. *Quantum Information and Computation*, **15**: 318-358.

Wils K, Chen B Y. 2023. A symbolic approach to discrete structural optimization using quantum annealing. *Mathematics*, **11**: 3451.

Xiao J, Endo K, Muramatsu M, et al. 2024. Application of factorization machine with quantum annealing to hyperparameter optimization and metamodel-based optimization in granular flow simulations. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, **48**: 3432-3451.

Xu Y, Kuang Z, Huang Q, et al. 2024a, A robust quantum nonlinear solver based on the asymptotic numerical method. *arXiv preprint arXiv*: 2412.03939.

Xu Y, Yang J, Kuang Z, et al. 2024b. Quantum computing enhanced distance-minimizing data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **419**: 116675.

Xue C, Wu Y, Guo G. 2021. Quantum Newton's method for solving the system of nonlinear equations. *World Scientific Publishing Company*, **11**: 2140004.

Xue C, Xu X, Wu Y, et al. 2022. Quantum algorithm for solving a quadratic nonlinear system of equations. *Physical Review A*, **106**: 032427.

Yarkoni S, Raponi E, Bäck T, et al. 2022. Quantum annealing for industry applications: Introduction and review. *Reports on Progress in Physics*, **85**: 104001.

Ye Z, Qian X, Pan W. 2023. Quantum topology optimization via quantum annealing. *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, **4**: 1-15.

Zhong H S, Wang H, Deng Y H, et al. 2020. Quantum computational advantage using photons. *Science*, **370**: 1460-1463.

(责任编委：杨越)

Quantum computing: The new focus in computational mechanics

XU Yongchun[1] KUANG Zengtao[1] HUANG Qun[1] YANG Jie[1] HU Heng[1,2,*]

[1] School of Civil Engineering, Wuhan University, Wuhan 430072, China
[2] School of Mathematics and Statistics, Ningxia University, Yinchuan 750021, China

Abstract Quantum computing has the potential to exponentially surpass classical computing in terms of computational power, but its practical applications need further expansion. At the same time, computational mechanics offers a wide range of applications, but faces challenges of significant computational power requirements arising from multi-scale, multi-physics, and extreme conditions, among others. Therefore, the complementary development of quantum computing and computational mechanics holds great promise. This paper reviews the current state of quantum computing applications in computational mechanics and discusses future trends in this field.

Keywords quantum computing, computational mechanics, computing power, computational complexity

胡衡, 宁夏大学教授, 武汉大学弘毅特聘客座教授. 主要从事计算固体力学与复合材料力学领域研究工作. 2006 年获法国梅斯大学博士学位; 2007 年在巴黎综合理工从事博士后研究工作; 2008 至 2023 年任职武汉大学; 2024 年入职宁夏大学. 入选教育部长江学者特聘教授, 主持国家自然科学基金重点项目、重点国际合作研究项目及国家重点研发计划重点专项等; 兼任 Composite Structures 联席主编 (Co-Editor-in-Chief)、国际计算力学学会 (IACM) 理事、中国力学学会理事.

Received: 28 October 2024; accepted: 30 December 2024; online: 3 January 2025

* E-mail: huheng@whu.edu.cn