

基于有限元法求解偏微分方程的量子经典混合算法

李乐¹, 曹梦圆¹, 李永乐¹, 王庆乐², 张志超^{1*}

1. 北京科技大学数理学院, 北京 100083

2. 华北电力大学控制与计算机工程学院, 北京 102206

* 联系人, E-mail: zhichao@ustb.edu.cn

2025-08-25 收稿, 2025-11-19 修回, 2025-11-19 接受, 2025-11-20 网络版发表

北京市自然科学基金(4252006)和国家自然科学基金(62471180)资助

摘要 偏微分方程(partial differential equations, PDEs)在科学与工程领域应用广泛, 但传统数值方法在求解高维或大规模问题时面临维数灾难. 量子计算的发展为解决这一难题提供了新思路, 然而现有量子算法存在一些局限, 如对硬件要求高, 量子电路的表达能力有限等. 针对以上问题, 本文对Helmholtz方程提出了一种融合量子退火(quantum annealing, QA)与高斯-赛德尔(Gauss-Seidel, GS)迭代的混合计算方法. 首先, 通过有限元方法离散该方程转化为线性方程组, 进而构造出二次无约束二进制优化(quadratic unconstrained binary optimization, QUBO)问题. 然后, 用量子退火求得该方程组全局最优的初始解, 并在此过程中引入了残差补偿机制. 最后, 通过高斯-赛德尔迭代来提升解的精度. 结果表明该算法不仅得到的数值解收敛到比较理想的精度, 而且迭代效率也得到了很好的提高. 另外, 该混合算法对量子硬件的要求低, 在含噪声中等规模量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)时代为高维、大规模偏微分方程求解提供了兼具效率与精度的新路径, 也可以用于其他偏微分方程的求解, 有利于推动量子经典混合计算在科学工程领域的应用.

关键词 有限元法, 量子退火算法, 高斯-赛德尔迭代, 量子经典混合算法

量子计算是一种基于量子力学原理的新兴计算模式, 其核心在于利用量子力学特有的叠加态和纠缠态等特性来操控量子比特. 不同于经典比特, 量子比特能够同时处于多种状态的相干叠加, 并通过量子纠缠实现远超经典系统的并行计算能力. 这种独特的机制使量子计算机在一些复杂的计算任务中展现出巨大的潜力. 早在1980年, 物理学家Paul Benioff首次提出了一个基于量子力学的图灵机模型, 证明了量子力学框架下计算过程的可行性^[1]. 20世纪90年代著名的Shor算法实现了大数分解的指数级加速^[2], 同期Grover算法将非结构化数据搜索复杂度从 $O(N)$ 降至 $O(\sqrt{N})$ ^[3], 这些算法的重大突破引起了学者对量子计算的广泛研究. 2009年由Harrow, Hassidim和Lloyd提出的HHL算法^[4]是量

子计算领域针对线性方程组求解的经典量子算法, 展现了量子计算在数值计算中的潜力, 为后续量子机器学习、优化算法等奠定了基础. 尽管实际应用受限于硬件和问题本身, 但其理论框架推动了量子算法设计的进步.

偏微分方程在科学计算与工程仿真中具有广泛的应用, 如流体力学、电磁学、结构力学等领域, 传统数值方法(如有限差分法、有限元法、谱方法等)在求解PDEs时通常依赖于经典计算机, 但随着问题规模的增大, 计算复杂度呈指数级增长, 使得经典方法在求解高维或非线性PDEs时面临巨大挑战^[5,6]. 近年来, 量子计算技术的快速发展为解决传统科学计算中的难题提供了新的思路.

引用格式: 李乐, 曹梦圆, 李永乐, 等. 基于有限元法求解偏微分方程的量子经典混合算法. 科学通报, 2026, 71: 5125–5133

Li L, Cao M, Li Y, et al. Quantum classical hybrid algorithm for solving partial differential equations based on the finite element method (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 5125–5133, doi: [10.1360/CSB-2025-5418](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5418)

在线性方程组求解领域, 比较著名的算法还是HHL算法和变分量子线性求解器算法(variational quantum linear solver, VQLS)^[7], 但各自存在一些局限性. HHL算法虽然在理论上能够实现对线性方程组的指数级加速, 但其对量子硬件的要求高, 不仅需要长相干时间和高精度量子门操作, 还依赖于目前尚未成熟的量子随机存取存储器技术, 这使得该算法在当前含噪声中等规模量子(noisy intermediate-scale quantum, NISQ)时代难以实际应用. 与此同时, VQLS作为更适合NISQ设备的混合算法, 虽然通过变分量子电路优化来求解线性方程组, 但其性能严重依赖于参数化量子电路的表达能力^[8], 且优化过程容易陷入局部最优, 计算精度受到量子噪声和参数优化效率的双重制约. 针对以上问题, 研究者们已经探索了多种量子算法^[9-14], 但主要还是对之前的研究成果进行优化.

在当代科学计算与工程优化领域, 面对高维度、多约束、非凸性的复杂问题(如大规模组合优化、高维参数寻优、大型稀疏系统求解等), 单一算法往往难以兼顾全局探索能力与局部优化精度. 也有一些人用量子退火求解偏微分方程^[15], 然而这类方法同样面临硬件限制的挑战: 量子退火器的稀疏连接架构和有限精度会直接影响求解质量, 而退火过程本身的优化能力也制约着最终解的准确性. 特别是在处理大规模问题时, 量子退火器往往只能提供近似解, 难以满足高精度计算的需求.

针对以上问题, 本文提出了一种基于有限元法求解偏微分方程的量子经典混合算法. 首先, 用有限元法离散偏微分方程得到线性方程组, 再将该线性方程组转换为QUBO问题; 然后, 用量子退火求得该问题的二进制解, 再通过解码得到数值解, 并在此过程中引入残差补偿机制, 对于较高维线性方程组, 仍可以保持量子退火解的稳定性; 最后, 将量子退火得到的解作为初始解通过高斯-赛德尔迭代来提升解的精度. 这种组合不仅规避了经典算法中随机初始化或以零为初始解而导致高斯-赛德尔迭代易陷入局部最优的局限, 也弥补了量子退火在解的精度上的不足, 尤其在处理大型稀疏矩阵所表征的复杂系统时, 混合算法能充分利用稀疏结构的局部关联性, 在降低计算复杂度的同时, 也提升了求解效率与解的质量. 因此, 深入探究这一组合策略的优势, 对于推动复杂优化问题的高效求解具有重要的理论与实践意义.

1 基础知识

在本文所提出的算法框架中, 通过有限元法离散偏微分方程后得到的线性方程组需要使用量子退火算法进行求解, 关键在于将最终哈密顿量编码为QUBO问题. 下面简要回顾量子退火算法的基本原理以及QUBO问题, 为后续方法奠定理论基础.

1.1 量子退火算法

量子退火算法的核心思想是利用量子隧穿效应逃离局部最优解, 进而逼近全局最优解, 弥补了模拟退火(simulated annealing, SA)易陷入局部最优的缺陷, 示意图如图1所示: 黑色线条展示了系统状态对应的能量分布, 能量越低, 状态越稳定, 红色线条表示模拟退火算法只能通过翻越势垒的方式先到达局部最小值点(蓝色的点)再到达全局最小值(红色的点); 蓝色线条表示量子退火算法可以凭借其量子隧穿效应, 直接从局部最小点到达全局最小值. 这也是量子退火与模拟退火相比一个最大的不同^[16].

量子退火算法的主体过程是将初始哈密顿量 H_0 缓慢演变为目标哈密顿量 H_p . 初始哈密顿量 H_0 通常被设计为易制备的量子态^[16]: $H_0 = -\sum_{i=1}^n \sigma_i^x$, 其中 σ_i^x 是第 i 个量子比特的Pauli-X算符, 则 H_0 的基态为所有量子比特的叠加态 $|+\rangle^{\otimes n}$. 而目标哈密顿量为待优化问题: $H_p = \sum_{i=1}^n h_i \sigma_i^z + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$, 其中 σ_i^z 是第 i 个量子比特的Pauli-Z算符, h_i 表示第 i 个自旋的外磁场强度, J_{ij} 表示第

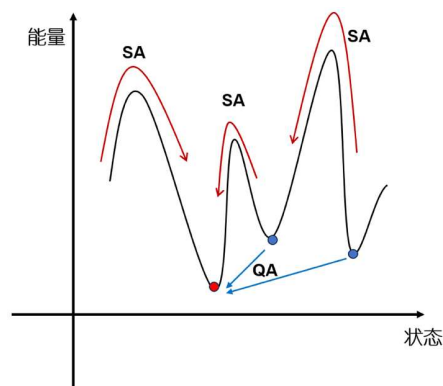


图1 模拟退火与量子退火示意图

Figure 1 Schematic diagram of simulated annealing and quantum annealing

个自旋和第 j 个自旋之间的耦合度。

演变过程主要通过时间相关的哈密顿量实现： $H(t) = A(t)H_0 + B(t)H_p$, $t \in [0, T]$, 其典型的调度函数为线性增长/衰减 $A(t) = 1 - \frac{t}{T}$, $B(t) = \frac{t}{T}$, 当 $t = T$ 时, 哈密顿量完全过渡到 H_p , 此时系统处于基态 $|\psi(T)\rangle$, 而系统状态 $|\psi(T)\rangle$ 服从薛定谔方程 $i\hbar \frac{d}{dt} \left| \psi(t) \right\rangle = H(t) \left| \psi(t) \right\rangle$, 同时演化过程要满足绝热条件 $T \gg \frac{\max_t \|\partial H(t)/\partial t\|}{\min_t \Delta^2(t)}$, 其中 $\Delta(t)$ 为 $H(t)$ 的基态与第一激发态的能隙。最终量子退火输出测量得到的经典比特串为 $\{q_i\} = \text{argmin} \langle \psi(T) | H_p | \psi(T) \rangle$ 。

1.2 QUBO问题

QUBO是一种组合优化问题模型, 广泛应用于量子计算尤其是量子退火领域, 已经成为量子退火器的标准输入格式^[17]。该模型求解通常可表示为寻找一组向量 x_t , 使得 $x_t = \text{argmin}_x Qx$, 其中 Q 为实对称矩阵, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 是二进制变量 $x \in \{0, 1\}$ 的向量。若写为矩阵形式, 可表示为 $x_t = \text{argmin}_y = \sum_i Q_{ii}x_i + \sum_{ij} Q_{ij}x_i x_j$ 。

2 数值模拟

在这一部分, 将使用量子经典混合算法来求解偏微分方程。首先需要把偏微分方程进行有限元法离散, 得到线性方程组, 然后用上述方法对该线性方程组进行转化得到QUBO问题, 随后用量子退火算法求解该QUBO问题得到初始解, 并在此过程中引入残差补偿机制, 最后用高斯-赛德尔迭代逐步提升解的精度。接下来, 我们以一、二维Helmholtz方程为例进行详细介绍。

2.1 一维Helmholtz方程

一维Helmholtz方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + k^2 u = -f, & x \in [0, 1], \\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases} \quad (1)$$

选取参数 $k = 1$, $f = (1 - \pi^2)\sin(\pi x)$, 根据参考文献^[18]可知该方程的解可以通过分离变量法求得, 最后得到方

程的解析解为 $u(x) = \sin(\pi x)$ ^[19]。

2.1.1 有限元法离散偏微分方程

对方程(1)进行伽辽金有限元法离散^[18], 首先选取基函数, 这里我们选取二次拉格朗日基函数 $\phi_i(\xi) = \prod_{j \neq i} \frac{(\xi - \xi_j)}{(\xi_i - \xi_j)}$, 并在每个单元上选取两端点和中点三个节点。然后对原始方程两边乘以测试函数 $v(x)$ (满足 $v(0) = v(1) = 0$)。在该方法中, 测试函数与基函数是一样的。接着在域 $(0, 1)$ 上积分得到: $\int_0^1 v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx + k^2 \int_0^1 v u dx = - \int_0^1 v f dx$, 然后对第一项进行分部积分, 又由于 $v(0) = v(1) = 0$, 边界项消失得到弱形式:

$$- \int_0^1 v \frac{du}{dx} \frac{du}{dx} dx + \left[v \frac{du}{dx} \right]_0^1 + k^2 \int_0^1 v u dx = - \int_0^1 v f dx, \quad (2)$$

将 $[0, 1]$ 分为 n 个单元, 再将每个子区间 $[x_e, x_{e+1}]$ 映射到参考区间 $[-1, 1]$, 映射关系为 $x = \frac{h}{2}(1 + \xi) + x_e$, 其中 $x \in [x_e, x_{e+1}]$, $\xi \in [-1, 1]$ 。

令 $u = \sum_{j=0}^n u_j \phi_j(x)$, 代入式(2)可得到全局积分, 再将这个全局积分分解为各单元积分的叠加, 进而推导出各单元层面的刚度、质量与载荷矩阵, 分别定义为 $M_{jl}^e = \int_{x_e}^{x_{e+1}} \phi_j(x) \phi_l(x) dx$, $K_{jl}^e = \int_{x_e}^{x_{e+1}} \frac{\partial \phi_j(x)}{\partial x} \frac{\partial \phi_l(x)}{\partial x} dx$, $F^e = \int_{x_e}^{x_{e+1}} f \phi_l(x) dx$ 。通过等参变换将参考单元的计算结果还原至实际单元, 并采用高斯积分完成各矩阵的数值计算。完成单元矩阵求解后, 再结合Dirichlet边界条件, 可移除边界节点对应的行和列, 最后组装全局矩阵得到 $(K_1 - k^2 M_1)U = F_1$ 。这就得到了离散化后的线性方程组。

2.1.2 转换为QUBO问题

接下来, 将线性方程组 $(K_1 - k^2 M_1)U = F_1$ 转换为QUBO问题, 为简化表达, 记 $A = K_1 - k^2 M_1$, $b = F_1$ 。那么对于线性方程组 $AX=b$, 首先将线性方程组转换为最小化残差平方和的形式:

$$g = \min \|AX - b\|^2 = \min (AX - b)^\dagger (AX - b), \quad (3)$$

再将连续变量 x_i 用 n 位二进制变量 $\{q_{i,k}\}_{k=1}^n$ 编码:

$$x_i = x_{\min} + \frac{x_{\max} - x_{\min}}{1 - 2^{-n}} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{i,k}, q_{i,k} \in \{0, 1\}, \quad (4)$$

令 $\alpha = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{1 - 2^{-n}}$, 则有

$$\begin{aligned} r_i &= AX_i - b_i = \sum_{j=1}^p A_{ij} x_j - b_i \\ &= \sum_{j=1}^p A_{ij} (x_{\min} + \alpha \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{i,k}) - b_i \\ &= \sum_{j=1}^p A_{ij} x_{\min} - b_i + \alpha \sum_{j=1}^p A_{ij} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{i,k}. \end{aligned} \quad (5)$$

$$\text{令 } C_i = \sum_{j=1}^p A_{ij} x_{\min} - b_i, \text{ 那么 } r_i = C_i + \alpha \sum_{j=1}^p A_{ij} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{i,k}.$$

将式(5)代入式(3)并展开得到:

$$\begin{aligned} g &= \min \sum_{i=1}^m r_i^2 \\ &= \min \sum_{i=1}^m \left(C_i + \alpha \sum_{j=1}^p A_{ij} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{i,k} \right)^2 \\ &= \min \sum_{i=1}^m \left[C_i^2 + 2\alpha C_i \sum_{j=1}^p A_{ij} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{j,k} \right. \\ &\quad \left. + \alpha^2 \left(\sum_{j=1}^p A_{ij} \sum_{k=1}^n 2^{-k} q_{j,k} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

再将公式整理为QUBO问题的标准形式:

$$\begin{aligned} g &= \min_{q \in \{0,1\}^{p \times n}} \left[C + \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^n L_{j,k} q_{j,k}, \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=1}^p \sum_{j'=1}^p \sum_{k=1}^n \sum_{k'=1}^n Q_{j,k,j',k'} q_{j,k} q_{j',k'} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

$$\text{其中, } C = \sum_{i=1}^m C_i^2, L_{j,k} = 2\alpha \cdot 2^{-k} \sum_{i=1}^m C_i A_{ij}, Q_{j,k,j',k'} =$$

$$\alpha^2 \cdot 2^{-k-k'} \sum_{i=1}^m A_{ij} A_{ij'}.$$

2.1.3 量子-经典混合求解器求解

得到QUBO问题的标准形式后, 将其输入到量子退火求解器中求解得到二进制解, 再解码得到数值初始解. 由于量子退火在维数较高的情况下得到的近似解的质量不稳定, 因此引入残差补偿机制: 若量子退火得到的初始解为 X_0 , 则残差为 $r = |AX_0 - b|$, 再用量子退火对 $A\Delta X = r$ 进行求解, 得到修正量 ΔX , 则新得到的近似解为 $X = X_0 + \Delta X$; 对于更高维的情况, 可以进行多次残

差补偿机制来优化近似解. 在本文的例子中, 设置当残差范数小于 10^{-6} 或最多补偿20次时停止补偿.

接下来, 以该近似解为初始解用高斯-赛德尔迭代进行迭代求解, 先将 A 分解为 $L + D + U$, 其中 L 为下三角矩阵, D 为对角矩阵, U 为上三角矩阵, 再代入迭代公式 $x^{(k+1)} = (D + L)^{-1}(b - Ux^{(k)})$ 进行求解.

这一部分求解过程均在python程序中进行, 设置高斯-赛德尔迭代结束阈值为相对误差小于 10^{-6} , 且采用 Fixstars Amplify AE求解器求解量子退火部分. 以下是该算法的伪代码:

最后求解结果如图2所示. 通过进行5次独立重复实验, 图2(b)得到了这两种算法的迭代次数的平均值以及标准差, 可以看出, 混合算法在迭代效率方面具有显著优势, 与传统的GS算法相比, 混合算法在不同单元数中都实现了迭代次数的降低, 且降幅范围在11%~33.4%之间, 虽然效率提升幅度存在一定波动, 但最低降幅仍保持在11%以上. 而出现这种波动现象是由于量子退火的输出具有本质上的概率性, 这也直接导致了其解的质量可能出现时好时坏的现象. 同时, 实际硬件中的噪声干扰、退相干效应以及控制参数的不完美性会进一步放大这种波动性, 这也间接导致了混合算法的迭代次数幅度下降的波动.

图2(c)展现了量子退火解的结果以及残差补偿对解的质量提升效果, 可以看到, 量子退火得到的初始解与解析解的误差大概在 $10^{-2} \sim 10^{-3}$ 量级, 以单元数为5单元为例, 补偿前量子退火得到的初始解为 5.2×10^{-2} , 经过1次残差范数补偿后得到 3.7×10^{-2} , 相对提升了约28.85%. 在本文的实验中, 大部分情况下实际只执行了1次残差补偿, 但在单元数为14, 15的情况下, 由于量子

算法: 基于有限元方法求解偏微分方程的量子经典混合算法

输入: 单元数列表elements_list, 量子比特数bits

输出: 各种方法的误差、迭代次数对比结果

1. #步骤1: 初始化全局参数和函数: 波数 $k = 1.0$, 高斯积分点数和权重, 源函数, 拉格朗日基函数及导数
 2. #步骤2: 有限元法离散偏微分方程: 构建系统矩阵 $(K_1 - k^2 M_1)U = F_1$
 3. #步骤3: 高斯-赛德尔(GS)求解
 4. 初始解 x_0 = 零向量, 调用函数 gauss_seidel(A, b, x0) 迭代求解
 5. #步骤4: 量子退火求解
 6. 构建QUBO问题: 构造函数 build_qubo(A, b, bits_per_variable)
 7. 求解QUBO问题: 构造并调用函数 solve_qubo(objective)
 8. 配置量子退火客户端: client = FixstarsClient()
 9. 解码二进制解: 构造函数 decode_solution(values, q, n, m, scale)
 10. 量子残差补偿: 构造函数 quantum_residual_correction()
 11. #步骤5: 量子+GS混合求解, 以量子解为初值调用函数 gauss_seidel(A, b, x0) 迭代求解
-

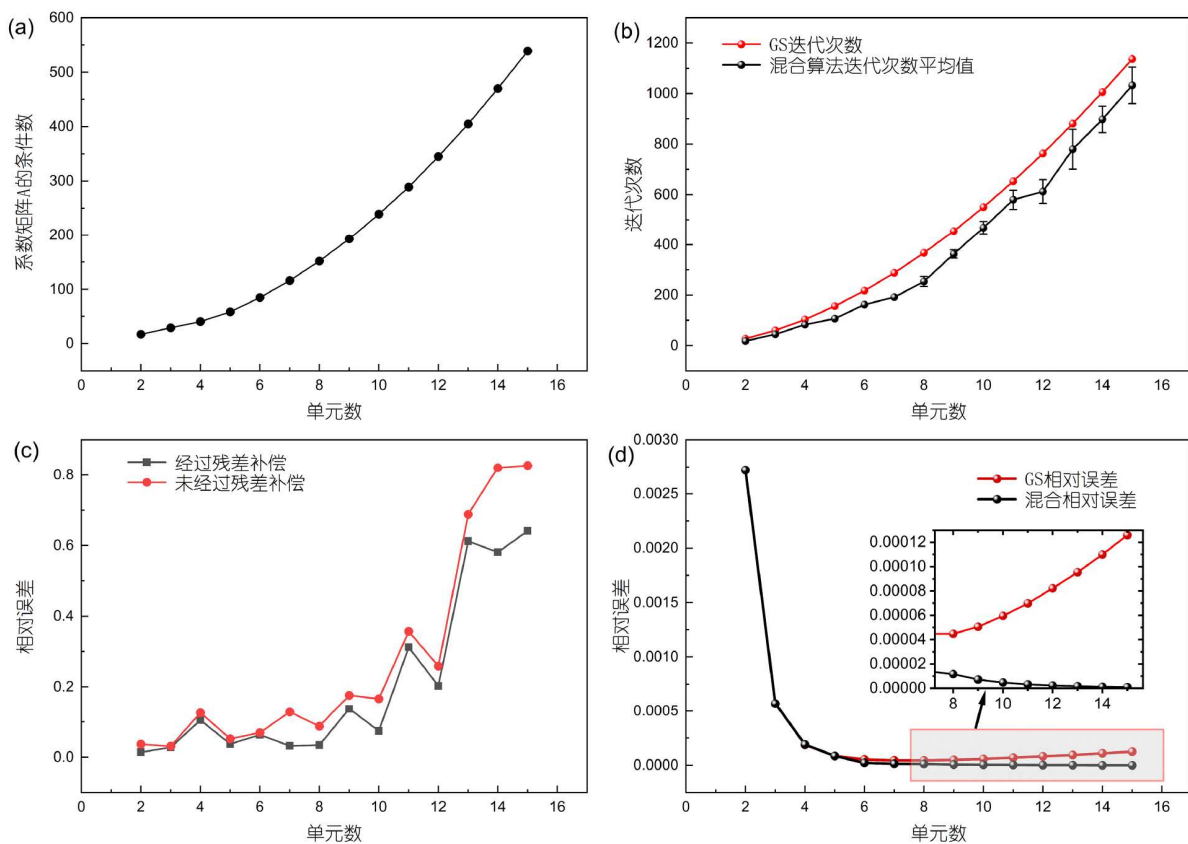


图2 (a) 系统矩阵条件数随单元数的变化曲线图; (b) GS与混合算法迭代次数平均值随单元数的变化对比图; (c) 经过残差补偿与未经过残差补偿的初始解与解析解相对误差随单元数的变化对比图; (d) GS与混合算法得到的最终解与解析解相对误差随单元数的变化对比图

Figure 2 (a) Curve of system matrix condition number versus number of elements; (b) comparative curve of the average iteration count of GS and the hybrid algorithm changing with the number of elements; (c) comparative curve of the relative error between the initial solution (with and without residual compensation) and the analytical solution changing with the number of elements; (d) comparative curve of the relative error between the final solution (from GS and the hybrid algorithm) and the analytical solution changing with the number of elements

退火得到的初始解质量较差, 残差补偿执行了2~5次。

求解器得到的解的最终情况如图2(d)所示, 图中的GS相对误差和混合相对误差是在对应节点处通过这两种方法得到的数值解与理论解析解的相对误差, 其计算公式为 $\text{error} = \frac{\|u - u_{\text{exact}}\|_2}{\|u_{\text{exact}}\|_2}$ 。可以看出, 在误差表现上, 通过混合算法得到的数值解的误差得到了改善。在8单元以后, GS方法得到的解的相对误差反而缓慢增加, 而且通过图2(a)可以发现, 随着单元数和线性方程组维数的增加, 矩阵的条件数也不断恶化, 这也是导致误差收敛出现停滞甚至回弹现象的原因。相反, 混合算法误差收敛较为稳定。这一鲜明对比充分说明, 量子退火提供的初始解为后续GS迭代搭建了优质起点, 从而降低对条件数的敏感性。条件数敏感性本质上反映了求解方

法对初始值和误差传播的依赖程度。高斯-赛德尔迭代从初始解出发, 通过逐节点修正逐步逼近最优解, 其误差传播受限于 $\|u_{k+1} - u^*\| \leq \kappa(A) \cdot \|u_k - u^*\|$, 其中 $\kappa(A)$ 为矩阵A的条件数, 对于病态矩阵(高条件数), 这一过程会显著放大误差, 导致收敛缓慢甚至失败, 因此对初始解的依赖程度较高。

相比之下, 本算法采用的量子退火步骤通过构建QUBO问题, 将连续解空间映射为二进制变量空间, 并利用概率性全局搜索生成初始解。该过程不依赖于矩阵的条件数特性, 能够在高条件数矩阵所对应的复杂解空间中, 快速定位到较优解区域。进一步地, 量子残差补偿机制通过迭代求解残差方程 $A\Delta x = r$, 持续修正量子解的偏差。这一动态修正过程有效抑制了高条件数矩阵所带来的误差累积效应。即便补偿后仍存在残

余误差, 后续的高斯-赛德尔迭代将以补偿后的高质量解作为初始值, 仅需少量迭代次数即可收敛。

2.2 二维Helmholtz方程

针对二维Helmholtz方程: $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + k^2 u = -f$,

$\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, 若令 $k = 1$, $f = (2\pi^2 - 1)\sin(\pi x)\sin(\pi y)$, 且在Dirichlet边界条件下, 同样通过分离变量法可得到其精确解为 $u_{\text{exact}} = \sin(\pi x)\sin(\pi y)$ 。

与求解一维Helmholtz方程的方法类似, 用有限元法离散该方程。首先, 通过加权残差法推导得到方程的弱形式。鉴于四面体网络具有良好的延展性且能适应复杂的几何结构, 因此有限元分析中四面体网格类型较为常见^[20]。我们将计算区域划分为若干四边形单元, 且每个单元均包含高阶节点。随后, 将所有实际单元映射至参考单元, 并在参考单元上定义基函数, 此处选用二维二次拉格朗日基函数。然后, 用同样的方法得到线性方程组并转换为QUBO问题, 再用上述算法进行求解。

最后得到的结果如图3和图4所示。从图3可以看出, 二维情况下混合算法得到的数值解与解析解接近, 但在中间节点出现误差相对较大的现象, 这主要源于以下几个因素的共同作用: 一方面, 边界条件的强约束使得边界节点误差被强制归零, 而误差向内部区域传播累积; 另一方面, 高斯-赛德尔迭代法的平滑特性会优先消除高频误差, 使得中间区域的低频误差残留更明显^[21], 这是数值方法在平衡局部精度和全局一致性时的固有特性。图4展现了不同网格规模下的混合算法与

GS算法的迭代次数的比较, 我们选取了网格为 2×2 , 3×3 , 4×4 这三种情况, 其所对应的系统矩阵维数分别为 9×9 , 25×25 , 49×49 , 足够证明算法的有效性。从图4可以看出, 随着网格规模的增大, 混合算法在迭代效率方面仍展现出显著优势, 其平均迭代次数较传统方法减少了12%以上。并且随着网格规模的增大, 混合算法迭代次数下降的幅度也呈扩大趋势。这一结果表明, 混合算法在保持计算精度的同时, 也能够有效提升求解效率。

这两个例子有力地证明了量子退火算法提供初始解对于提升整体计算效能的关键意义, 并且由于有限元法是一个比较灵活的方法, 几乎可以离散所有类型的偏微分方程, 且最终得到的线性方程组的系数矩阵为稀疏矩阵, 这就使得迭代法能够高效地求解这类大规模稀疏线性系统。此外, 对于更高维数、更大的条件数, 一些预处理技术(如Jacobi预处理)的引入可改善矩阵的数值特性, 进一步削弱矩阵条件数对迭代过程的影响, 从而保障迭代求解的效率和稳定性。

3 结论

本文引入了一种分阶段、层次化的求解策略: 首先, 利用有限元方法将偏微分方程离散为稀疏线性系统, 并将其转换为QUBO形式。然后, 通过量子退火获取具备全局特性的初始解, 并创新性地引入残差补偿机制以增强解的稳定性。最后, 结合经典的高斯-赛德尔迭代进行局部精化, 得到解与解析解的相对误差在 $10^{-4} \sim 10^{-5}$ 。本文混合算法对量子设备的要求较低, 仅利用量子退火进行一次性的全局粗解搜索, 规避了

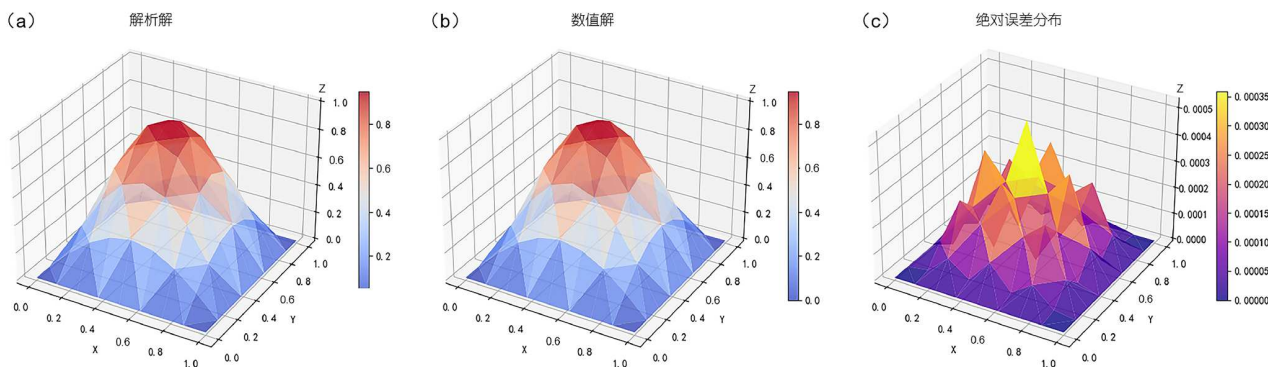


图3 二维Helmholtz方程在 4×4 网格单元情况下解析解(a)与量子数值解(b)以及绝对误差分布(c)

Figure 3 Analytical (a) and quantum numerical (b) solutions of two-dimensional Helmholtz equation with 4×4 grid elements and absolute error distribution (c)

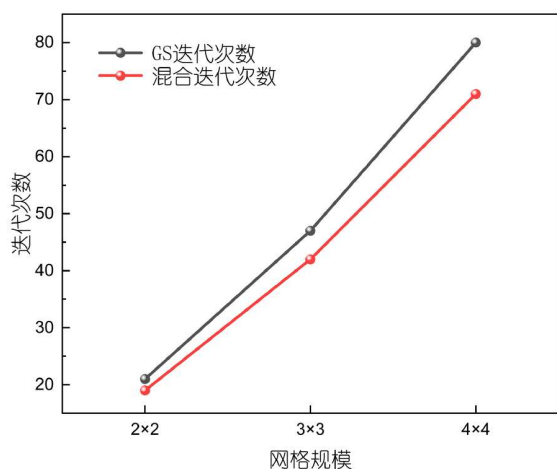


图4 二维Helmholtz方程GS算法和混合算法迭代次数对比图

Figure 4 Comparison of iterations of GS algorithm and hybrid algorithm for two-dimensional Helmholtz equation

对长相干时间和复杂量子门序列的依赖。

文献[15]同样也是使用量子退火求解PDEs，但它将微分方程直接转化为基于基函数展开的损失函数优化

问题，并依赖量子退火器进行整体求解，其性能受限于当前量子硬件的表达精度与连接度，且最终求解得到解的精度仅在 $10^{-2} \sim 10^{-3}$ ，同样地，VQLS得到的解的精度也在 $10^{-2} \sim 10^{-3}$ ，高度依赖于变分量子电路的表达能力，并且优化过程易受噪声影响而陷入局部最优，对量子门保真度和相干时间也有较高要求。而本文的混合算法不仅有效融合了量子退火在全局探索方面的潜力与经典迭代在局部收敛上的效率，还在保持对NISQ设备兼容性的同时，显著提升了最终解的精度与收敛速度，在求解偏微分方程中展现出显著优势。

未来，该方法可进一步拓展至非线性方程、高维多物理场耦合等复杂问题，其潜力广泛覆盖流体力学仿真、电力负荷分配、金融资产组合等科学工程领域。通过优化量子退火的目标函数构建与经典迭代逻辑，可进一步提升对复杂系统的适应性。随着量子硬件性能的持续发展，该方法有望突破现有规模限制，并通过与其他算法的深度融合，推动量子经典混合算法在更多实际场景中落地，为解决传统方法难以应对的“高维、多约束、强耦合”问题提供新的技术路径。

参考文献

- Benioff P. The computer as a physical system: a microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines. *J Stat Phys*, 1980, 22: 563–591
- Shor P W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring. In: Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science. Los Alamitos: IEEE Computer Society, 1994. 124–134
- Grover L K. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In: Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing. New York: ACM Press, 1996. 212–219
- Harrow A W, Hassidim A, Lloyd S. Quantum algorithm for linear systems of equations. *Phys Rev Lett*, 2009, 103: 150502
- Khoo Y, Lu J, Ying L. Solving parametric PDE problems with artificial neural networks. *Eur J Appl Math*, 2021, 32: 421–435
- Richter L, Sallandt L, Nüsken N. Solving high-dimensional parabolic PDEs using the tensor train format. In: Marina M, Tong Z, eds. Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning. 2021. 8998–9009
- Bravo-Prieto C, LaRose R, Cerezo M, et al. Variational quantum linear solver. *Quantum*, 2019, 7: 1188
- Pool A J, Somoza A D, Lubasch M, et al. Solving partial differential equations using a quantum computer. In: 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE). Broomfield: IEEE, 2022
- Zenchuk A I, Bochkina G A, Qi W, et al. Quantum algorithms for calculating determinant and inverse of matrix and solving linear algebraic systems. *Quantum Inf Computation*, 2025, 25: 195–215
- Mukherjee S, Chakrabarti B K. Multivariable optimization: quantum annealing and computation. *Eur Phys J Spec Top*, 2015, 224: 17–24
- Ji W, Meng X. Demonstration of quantum linear equation solver on the IBM qiskit platform. In: Proceedings of the 2020 19th International Symposium on Distributed Computing and Applications for Business Engineering and Science (DCABES), 2020
- Shao C, Xiang H. Quantum circulant preconditioner for a linear system of equations. *Phys Rev A*, 2018, 98: 062321
- Chen C C, Shiao S Y, Wu M F, et al. Hybrid classical-quantum linear solver using Noisy Intermediate-Scale Quantum machines. *Sci Rep*, 2019, 9: 16251
- Qi W, Zenchuk A I, Kumar A, et al. Quantum algorithms for matrix operations and linear systems of equations. *Commun Theor Phys*, 2024, 76: 035103
- Criado J C, Spannowsky M. Qade: solving differential equations on quantum annealers. *Quantum Sci Technol*, 2023, 8: 015021

- 16 Wang B N, Shui H H, Wang S M, et al. Theories and applications of quantum annealing: a literature survey (in Chinese). [Sci Sin-Phys Mech Astron](#), 2021, 51: 080301 [王宝楠, 水恒华, 王苏敏, 等. 量子退火理论及其应用综述. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2021, 51: 080301]
- 17 Jun K. QUBO formulations for a system of linear equations. [Results Control Optimization](#), 2024, 14: 100380
- 18 Zhou P. Galerkin finite element analysis of cutoff wavenumber of waveguide with arbitrary section (in Chinese). *J Nanjing Normal Univ (Nat Sci)*, 1996, (4): 27–31 [周平. 任意截面波导截止波数的伽辽金有限元分析. 南京师大学报(自然科学版), 1996, (4): 27–31]
- 19 Liang K M. *Mathematical Methods in Physics (4th ed)* (in Chinese). Beijing: Higher Education Press, 2010 [梁昆淼. 数学物理方法(第四版). 北京: 高等教育出版社, 2010]
- 20 Yu Q. Biomechanical analysis of different internal fixation methods in cervical spondylotic myelopathy based on finite element method (in Chinese). Master Thesis. Jinan: Shandong Normal University, 2024 [于群. 基于有限元法的脊髓型颈椎病不同内固定方式的生物力学分析研究. 硕士学位论文. 济南: 山东师范大学, 2024]
- 21 Briggs W L, Henson V E, McCormick S F. *A Multigrid Tutorial*. 2nd ed. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000. 20–22

Summary for “基于有限元法求解偏微分方程的量子经典混合算法”

Quantum classical hybrid algorithm for solving partial differential equations based on the finite element method

Le Li¹, Mengyuan Cao¹, Yongle Li¹, Qingle Wang² & Zhichao Zhang^{1*}

¹ School of Mathematics and Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

² School of Control and Computer Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China

* Corresponding author, E-mail: zhichao@ustb.edu.cn

Partial differential equations (PDEs) are fundamental to numerous scientific and engineering disciplines. However, traditional numerical methods encounter the significant challenge known as the “curse of dimensionality” when applied to high-dimensional or large-scale problems. The emergence of quantum computing offers a promising avenue to overcome this bottleneck, yet existing quantum algorithms face their own limitations, including high hardware demands and the constrained expressive power of quantum circuits.

To address these challenges, this paper introduces a novel hybrid quantum-classical computational method for solving the Helmholtz equation. This approach strategically integrates quantum annealing (QA) with the classical Gauss-Seidel (GS) iterative method. First, the continuous form of the Helmholtz equation is converted into a system of linear equations using the finite element method. This linear system is then transformed into a special type of optimization problem called a quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) problem, which is specifically designed to be processed by quantum annealing devices. Secondly, the QUBO problem is solved using a quantum annealer to obtain a high-quality initial solution. A key innovation in this stage is the implementation of a residual compensation mechanism. This process involves repeatedly refining the quantum solution by solving correction equations. Specifically, after obtaining an initial solution from the quantum processor, we calculate the error between this solution and the ideal result. We then use the quantum annealer again to solve for a correction term, which is added to improve the initial solution. This dynamic correction process significantly enhances the quality of the quantum-derived solution, making it an excellent starting point for subsequent classical refinement. Finally, we employ the classical Gauss-Seidel iteration method to further polish the solution. Beginning from the optimized initial solution provided by the enhanced quantum annealing step, this classical method efficiently converges to a highly accurate final result. This step effectively compensates for the precision limitations of current quantum hardware while leveraging the quantum-derived advantage to dramatically reduce the number of classical computation cycles required.

Experimental results demonstrate the dual advantages of our hybrid algorithm. The numerical solutions reliably converge to the required precision standards, while the overall computational efficiency shows an improvement of 10% to 30% compared to using the classical method alone. This performance gain stems directly from the superior initial solution provided by the quantum process, which substantially reduces the number of iterations needed for convergence. Additionally, our approach has modest requirements for quantum hardware and does not depend on the development of large-scale fault-tolerant quantum computers.

This study not only provides an efficient and accurate new pathway for solving complex Helmholtz equations in the current era of quantum computing but also establishes a flexible framework that can be adapted to solve other types of partial differential equations. This work represents a significant step toward practical applications of quantum-classical hybrid computing in scientific and engineering fields.

finite element, quantum annealing algorithm, Gauss-Seidel iteration, quantum classical hybrid algorithm

doi: [10.1360/CSB-2025-5418](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5418)