用于具有非周期边界条件的高分辨率偏微分方程的量子启发式张量列谱求解器

萨沙·H. 豪克[a, b, *]，尼斯-卢卡·范许尔斯特[c]，马蒂亚斯卡贝尔[a]，迪特尔雅克施[c, d]和尼古拉斯·R. 高格[b]

[a]弗劳恩霍夫 *ITWM*，流动与材料模拟系，凯撒斯劳滕，*67663*，莱茵兰-普法尔茨州，德国[b]凯撒斯劳滕-兰道大学（*RPTU*），科学计算讲席，凯撒斯劳滕，*67663*，莱茵兰-普法尔茨州，德国[c]汉堡大学，量子物理研究所，汉堡，*20146*，汉堡，德国[d]牛津大学，克拉伦登实验室，帕克斯路，牛津，*OX1 3PU*，英国

arXiv:2611.32968v1 [math.NA] 24 Nov 2026

文章信息

关键词：张量列车（TT） 量子启发式方法 谱方法 离散余弦变换（DCT） 离散正弦变换（DST） 计算流体动力学 计算均匀化

摘要

张量列车（TT）方法通过利用离散化场和算子中的低秩结构，实现了高分辨率计算力学模拟。尽管超快速傅里叶变换（SFFT）已实现适用于周期问题的高效基于张量列车的谱求解器，但针对非周期边界条件的相应表示仍有待深入研究。我们引入超快速余弦与正弦变换（SFCT 和 SFST），分别将 TT 谱框架扩展至齐次 Neumann 和 Dirichlet 边界条件。基于离散余弦与正弦变换的量子电路构造，我们从共享的张量列车算子表示中推导出这两种变换，并证明它们的 TT 秩均受 $6r_S$ 的约束，与离散化阶数无关；其中，r_S 是给定精度下 SFFT 的秩。对于最大达到 2^{26} 个点的网格规模，实测秩稳定在约 32。对于瑞利–贝纳德对流，谱压力投影在泊松方程求解中相较于预条件物理空间张量列车求解器实现了最高 7 倍的加速比，同时保持了相当的精度。与现有的基于张量列车的方法相比，三维计算均匀化实现了 2–6 倍的加速比，并将内存占用降低了 4–7 倍。研究结果为具有非周期边界条件的谱偏微分方程求解器建立了高效的 TT 框架。

1. 引言

偏微分方程（PDEs）描述了广泛的物理现象，包括流体流动、热传输以及非均质材料的响应。在细网格上对其进行数值求解可能需要大量内存和计算时间。张量列车（TT）方法通过一串小型张量近似离散化解 [1, 2]。连接这些张量的维度称为张量列车秩，其决定了存储成本和可达到的近似精度。计算可以基于压缩表示进行；当秩保持适中时，有望节省资源。TT 方法已在广泛的高分辨率应用中展现出优势，包括流体动力学 [3, 4], 动力学等离子体动力学 [5], Gross–Pitaevskii方程的模拟 [6, 7], 结构力学问题 [8, 9]以及计算均质化 [10–13]。

对于形如 2^n with $n \in \mathbb{N}$ 的网格维度，TT 表示建立了基于张量的数值方法与量子计算之间的联系（综述见 [14] ）。这种联系可以双向利用：张量网络已用于构造求解微分方程的量子电路 [15], 以及用于非线性流动问题的混合算法 [16], ；反过来，量子电路构造也可用于推导低秩 TT 表示。对于量子傅里叶变换（QFT），这种低秩表示已通过超快速傅里叶变换（SFFT）的形式建立 [17, 18]。SFFT 可直接对压缩 TT 形式的场进行变换，避免重构完整的网格向量。其计算效率取决于中间 TT 秩。对于周期问题，这种方法可在 TT 求解器 [11]中直接进行傅里叶空间运算。

虽然 SFFT 为周期性问题提供了一种高效方法，但实际应用还涉及非周期性边界条件，例如狄利克雷条件、诺伊曼条件或二者的组合。谱方法提供了一种自然方式，可通过适用于底层边值问题的基函数来处理这些条件。对于均匀笛卡尔网格上的适当算子，离散余弦变换和正弦变换分别可将齐次诺伊曼条件和狄利克雷条件对应的有限差分算子对角化。这使得离散方程可以在谱空间中求解，不过具体采用哪种变换取决于网格排列和边界离散化 [19]。这类算子例如出现在壁面约束不可压缩流的压力修正方程 [20]，以及具有预设位移或牵引边界条件的计算均质化问题中 [21, 22]。

非周期边界值问题的 TT 方法包括有限元求解器 [23, 24]以及一维离散拉普拉斯逆算子的显式表示 [25]。在热均匀化方面，Risthaus 和 Schnei- der [13] 比较了基于传统正弦和余弦变换的求解器与基于格林算子 QTT 近似的求解器。然而，谱变换本身的直接 TT 表示尚未

*通讯作者电子邮箱：sascha.hannes.hauck@itwm.fraunhofer.de（S.H. Hauck）ORCID（研究者和贡献者身份识别码）：0009-0002-4800-0598 （S.H. Hauck）

得到发展。为弥补这一空白，我们改编 [26] 的量子电路构造，并从一个共享的基于量子傅里叶变换的张量列车算子推导出 II 型超快速余弦与正弦变换（SFCT 和 SFST）。我们证明，其秩上界为 $6r_S$，其中 r_S 为 SFFT秩，且与网格大小无关。我们评估了网格规模最大为2^{26} 个网格点时，这些变换的数值精度、秩、存储需求和运行时间。最后，我们展示了这些变换在计算力学中两个相关问题上的适用性。对于瑞利–贝纳德对流，我们比较了混合傅里叶–余弦压力求解器与预条件物理空间张量列车求解。在三维计算均质化中，我们将谱变换应用于具有混合且与周期性相容的均匀边界条件的问题。

本文其余部分的组织如下。第2 节概述 TT格式的基础知识。在第3节中，我们构建 SFCT 和 SFST，并利用其量子电路构造建立表达能力定理。随后，我们通过数值实验评估其精度和计算成本。第4 节和第5 节介绍计算力学中的两个互补应用：瑞利–贝纳德对流和计算均匀化。最后，第6节总结本文的主要进展和研究发现。

2. 张量列车格式

本文采用张量列车（TT）格式，将一个 T 阶张量表示为一串相互连接的三阶张量，这些张量称为张量列车核心。 T 的分解形式为 [1]

$$T(i_1,...,i_n) = \sum_{\boldsymbol{\alpha}} A_{\alpha_0}^{\alpha_1}(i_1)\cdots A_{\alpha_{n-1}}^{\alpha_n}(i_n) \tag{1}$$

$$= A_1(i_1)\cdots A_n(i_n), \tag{2}$$

其中， A_k 表示第 k个张量列车核，其物理维度为d，形状为 $(r_{k-1}\times d\times r_k)$。元组 $\boldsymbol{\alpha}=(\alpha_0,\dots,\alpha_k,\dots,\alpha_n)$汇集了虚指标。相应的张量列车秩 r_k决定了该表示的表达能力，进而决定其计算成本。为获得封闭表示，边界秩通常固定为平凡维度 $r_0 = r_n = 1$。

对于一个 n阶张量，其统一物理维度为d时，直接存储需要 $O(d^n)$ 个元素，而TT表示仅需 $O(ndr^2)$个参数，前提是TT秩被限制在 r以内。因此，对于足够低的秩，该表示将存储需求从随张量阶数 n呈指数增长降低为线性增长。这种低秩结构还支持在不显式构造完整张量 [27, 28], 的情况下高效处理高阶张量，从而有可能显著改善运行时间。

为了将TT格式应用于空间离散场（例如本文始终研究的这类场），我们首先通过将网格索引表示为二进制形式，把其采样值重新整形为高阶张量。对于均匀网格在 $[0,1)$上有 2^n 个点时，每个坐标都可以表示为

$$x(i_1,\dots,i_n) = \sum_{m=1}^{n} i_m 2^{-m}, \qquad i_m \in \{0,1\}. \tag{3}$$

因此，每个网格点都由一个二进制字符串 $(i_1,\dots,i_n)\in\{0,1\}^n$标识。将这一思想推广到张量积网格上的三维采样场，可得到一个$3n$ 阶张量。因此，定义元组 $\boldsymbol{i}=(i_1,\dots,i_n)$，并类似地定义 $\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$，我们得到高阶张量

$$F(\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}) := f\big(x(\boldsymbol{i}),y(\boldsymbol{j}),z(\boldsymbol{k})\big).$$

由于这一过程仅是一项记账操作，因此不会对采样场引入任何额外近似。通过采用TT-SVD算法 [1],，可以将所得高阶张量转换为TT格式，从而得到物理维度为 $d = 2$的量化张量列车（QTT）表示。这一表示在数学上类似于量子多体系统的张量积结构，其中每个二进制模态对应一个量子比特，而量子比特具有二维希尔伯特空间 [29]。后续章节将利用这一类比。

标量乘法、加法、逐元素乘法以及线性算子的应用都可以直接在 TT 格式中进行。标量乘法不会改变秩，而加法、逐元素乘法和算子应用则可能增加 TT 秩，随着连续执行这些操作，表示的计算成本可能不断上升。不过，TT 舍入可以在控制相对 Frobenius 误差 $\varepsilon_{\mathrm{TT}}$ [1] 的同时降低这些秩。另一种方法是将 TT 秩截断至指定的最大值，从而直接控制表示的复杂度，但代价是近似误差可能更大。

要应用一般的线性映射，算子本身也必须用合适的张量格式表示。张量列车算子（TTO）以 TT 形式表示线性映射，并可通过对应算子核与张量核之间的局部缩并，作用于 TT 张量。与 TT 表示类似，每个 TTO 核都包含两个物理指标，分别对应输入空间和输出空间。因此，TTO 可写为

$$\mathcal{T}(i_1,j_1,\dots,i_n,j_n) = \mathcal{G}_1(i_1,j_1)\cdots\mathcal{G}_n(i_n,j_n), \tag{4}$$

其中， $\mathcal{G}_k$ 表示第 k 个 TTO 核。对于本文所考虑的方阵算子，每个 TTO 核的维度为 $(\rho_{k-1}\times d\times d\times\rho_k)$，其中 ρ_k 表示算子秩，$\rho_0=\rho_n=1$。索引 i_k 和 j_k 分别对应输出和输入。将 TTO 应用于 TT 时，会将每个输入指标 j_k 与 TT 中对应的物理索引进行缩并。压缩前，所得表示的键维度为 $\rho_k r_k$。

另一个核心运算是 Hadamard乘积 $\odot$，它指离散化场的逐点乘法。例如，在计算

非线性项以及在谱空间中应用对角算子时，都会用到这类运算；它们可能成为基于 TT 的求解器中的主要计算瓶颈。对于 TT格式中的两个场 x 和 y，Hadamard乘积可写为 $x \odot y = \mathrm{diag}(y)x$。若 A_k 是 y 的第 k 个张量列车核，则 $\mathrm{diag}(y)$ 中对应的核定义为

$$\mathcal{G}_k(i_k, j_k) = A_k(i_k)\,\delta_{i_k j_k}. \tag{5}$$

将对角张量列车算子应用于 x 是标准的张量列车算子–张量列车收缩。如果两个输入张量列的秩均为 r，则乘积的秩可能达到 r^2。使用标准 TT舍入将这些秩降低至 $O(nr^6)$的代价为。

变分压缩（VAR）则拟合一个输出张量列z，而无需构造秩为r^2 的中间结果。该拟合可以通过交替最小二乘法（ALS）计算， [30],其对 $\|z - \mathrm{diag}(y)x\|_F^2$ 的一个核 z 逐次进行最小化。对于输入秩和输出秩相当的情况，每次扫描的代价为$O(nr^4)$ [31]。秩自适应方法包括双站点修正交替最小二乘（MALS）方法 [30],，该方法同时更新两个相邻的核；以及交替最小能量法（AMEn）， [32], 该方法利用残差信息扩充局部基。

能够实现 TT 秩立方级缩放的 Hadamard乘积算法包括张量列乘法（TTM）、 [31], 交替交叉插值（ACI）、 [33],以及递归草图插值（RSI） [34]。在第4节中，我们在谱泊松求解器内针对 Hadamard乘积测试 RSI，以将其作为 VAR 的替代方法。

3. 边界适配谱变换的 TT 格式

本节将构建边界
适配谱变换的 TT 表示，将经典谱方法与量子电路构造及其经典张量网络表示联系起来。我们重点研究 II 型离散余弦变换和离散正弦变换（DCT-II 和 DST-II），它们与本文所考虑的边界条件相关。该构造也可类似地扩展到其他类型的余弦变换和正弦变换。从这些变换的经典构造出发，我们推导出一种酉量子表述，并利用其电路结构，建立所得变换算子的 TT 秩上界。这一分析为后续章节介绍的超快速余弦与正弦变换奠定了基础。

3.1. 经典谱方法

为说明边值问题中谱方法的构造，我们简要回顾用于求解有界区域上椭圆型偏微分方程的傅里叶型变换。作为一个简单示例，我们考虑一维泊松问题，以阐明后续公式所依据的基本概念。令 $\Omega = (0, L) \subset \mathbb{R}$，并考虑问题

$$-\frac{\mathrm{d}^2 u(x)}{\mathrm{d}x^2} = f(x), \qquad \forall x \in \Omega, \tag{6}$$

其满足齐次诺伊曼边界条件

$$\left.\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\mathrm{d}u(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=L} = 0.$$

一般而言，需要将连续问题重新表述为离散化形式，以获得计算上可处理的公式。因此，域 Ω将使用单元中心网格表示

$$x_m = \left(m + \frac{1}{2}\right) h, \qquad h = \frac{L}{N},$$

其中 $m = 0, \ldots, N-1$。为与后续章节保持一致，我们假设网格点数为二的幂， $N = 2^n$，其中 $n \in \mathbb{N}$。将式（6）中的连续函数在网格点处采样，得到场和源项的离散值 $u_m = u(x_m)$ 和 $f_m = f(x_m)$。接下来，我们构造u 的偶延拓：

$$\widetilde{u} = [u_0, u_1, \cdots, u_{N-1}, u_{N-1}, \cdots, u_1, u_0]^T,$$

其中包含 $2N$ 个元素，索引方式与 m =0，…，$2N-1$ 类似。对于 f，也构造类似的偶延拓。

随后，对这些扩展向量应用离散傅里叶变换（DFT），得到

$$\widetilde{u}_m = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k=0}^{2N-1} \hat{u}_k e^{i\pi \frac{mk}{N}}, \tag{7}$$

$$\widetilde{f}_m = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k=0}^{2N-1} \hat{f}_k e^{i\pi \frac{mk}{N}}, \tag{8}$$

ˆ其傅里叶系数分别为 $\hat{u}_k$ 和 f_k。此外，分量形式的泊松方程（6）可写为

$$(\mathcal{L}u)_m \equiv \frac{u_{m+1} - 2u_m + u_{m-1}}{h^2} = -f_m. \tag{9}$$

为使上述有限差分运算在边界点处闭合，我们通过离散诺伊曼条件 $u_{-1} = u_0$ 和 $u_N = u_{N-1}$引入两个虚点。

将变换（7）和（8）代入按分量离散的泊松方程（9），可得到原问题在傅里叶空间中的另一种表示

$$\sum_{k=0}^{2N-1} e^{\frac{i\pi km}{N}} \left[\frac{\hat{u}_k}{h^2}\left(e^{\frac{i\pi k}{N}} + e^{\frac{-i\pi k}{N}} - 2\right) + \hat{f}_k\right] = 0. \tag{10}$$

因此，我们最初的微分方程被转换为傅里叶空间中的代数方程。由于傅里叶模态的正交性，上述表达式进一步简化为逐分量方程

$$\xi_k^2 \hat{u}_k = \hat{f}_k,$$

其中 $\xi_k = 2N\sin\left[\pi k/(2N)\right]/L$ 对应 $k \in \{1, \cdots, 2N-1\}$。由于 $\xi_0 = 0$，零模 $k = 0$ 施加了可解性条件，即离散源项的均值为零

$$\hat{f}_0 = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{m=0}^{2N-1} \widetilde{f}_m = 0. \tag{11}$$

此外，零模意味着解 u 并不唯一，因为其平均分量仍未确定。具体而言，如果 u 是一个解，那么对于任意常数 C，$u \to u + C$ 也同样是解。

偶延拓使得可以使用离散傅里叶变换求解泊松问题，但网格点数量从 N 增加到 $2N$，却没有引入新的信息。离散余弦变换将偶对称性直接融入变换中，从而避免了这种冗余，使得无需显式构造扩展信号即可求解原始的 N点问题。

为了解释这是如何实现的，我们考察偶延拓 $\widetilde{u}$的傅里叶变换

$$\begin{aligned}
\hat{u}_k &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{m=0}^{2N-1} \widetilde{u}_m e^{-i\pi\frac{km}{N}} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{m=0}^{N-1} \left[\widetilde{u}_m e^{-i\pi\frac{km}{N}} + \widetilde{u}_{2N-1-m} e^{-i\pi\frac{k(2N-1-m)}{N}} \right] \\
&= \frac{e^{i\frac{\pi k}{2N}}}{\sqrt{2N}} \sum_{m=0}^{N-1} \left[\widetilde{u}_m e^{-i\pi\frac{k(2m+1)}{2N}} + \widetilde{u}_{2N-1-m} e^{i\pi\frac{k(2m+1)}{2N}} \right].
\end{aligned}$$

由于采用了偶延拓，对称条件 $\widetilde{u}_m = \widetilde{u}_{2N-1-m} \equiv u_m$ 得以满足。因此，我们可以将上述关系简化为

$$\begin{aligned}
\hat{u}_k &= \sqrt{\frac{2}{N}} e^{i\frac{\pi k}{2N}} \sum_{m=0}^{N-1} u_m \cos\left[\frac{\pi k}{N}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&\equiv e^{i\frac{\pi k}{2N}} b_k^{-1} C_N^{\mathrm{II}}[u]_k,
\end{aligned}$$

其中，$k \neq 0$ 和$b_0 = 1/\sqrt{2}$对应的正交归一化因子为 $b_k = 1$。

上述表达式通过正交归一 DCT-II 变换 C_N^{II}，将原始的 N点向量 u 与其在傅里叶空间中的分量联系起来。因此，无需显式进行偶延拓，我们便可以求解带有诺伊曼边界条件的一维泊松问题。

对于不同的离散化方案，也可以进行类似推导，从而得到不同类型的 DCT；对于狄利克雷边界条件，也可进行类似推导，得到离散正弦变换（DST）[19, 35]。更复杂的非齐次狄利克雷边界条件可通过提升函数 $g(x)$ 来处理，该函数满足给定的边界值。写作 $u = v + g$ 可得到关于 v的齐次问题，其右端项经过了修正。诺伊曼边界条件和混合边界条件也可通过选择适当的对称延拓或反对称延拓，以类似方式处理，从而得到余弦谱基或混合正弦谱基 [36]。

3.2. 量子谱方法

量子谱方法基于针对不同边界条件调整的量子傅里叶变换（QFT）变体。周期性边界条件采用直接基于 QFT 的算法处理，而狄利克雷边界条件和诺伊曼边界条件则分别自然地对应于量子正弦变换（QST）和量子余弦变换（QCT）。

QFT 的量子电路实现如图 1 （a）所示，其中 n量子比特 QFT 通过一个乘积表示

$$\mathcal{QFT}_n = \mathcal{R}_n \mathcal{Q}_n \tag{12}$$

纯变换 $\mathcal{Q}_n$ 和重排序操作$\mathcal{R}_n$ [37]。纯变换仅依赖 Hadamard 门 H 和相位门$P(\theta)$等基本门，而重排序操作则依赖多个 SWAP 门。这些门在很大程度上依赖 CNOT 门，即使在量子环境中，CNOT 门仍然是相对较具挑战性的组成部分 [38]。此外，重排序并非实际变换所必需，而是文献中为匹配经典离散傅里叶变换方法所采用的排序约定而引入的。与其经典对应方法相比，后者的时间复杂度随量子比特数量呈指数增长，需要执行 $\mathcal{O}(n2^n)$次操作；而 QFT 的时间复杂度为二次，达到 $\mathcal{O}(n^2)$ [37, 39]。

在经典情况下，DCT 和 DST 分别可以通过对输入数据进行偶延拓和奇延拓，从 DFT 推导得到。然而，简单地丢弃冗余的傅里叶系数并不是酉操作，因此无法直接在量子计算机上实现。合适的量子电路必须在保持酉性的同时，实现所需的变换。

通过将正弦和余弦变换嵌入统一的酉框架，而不是将其视为傅里叶变换的彼此独立的约简，可以避免这一障碍。具体而言，可以将傅里叶变换F_{2N}分解为作用于互补子空间的两个适应对称性的分量

$$U_N^\dagger F_{2N} V_N = C_N^{\mathrm{II}} \oplus (-i) S_N^{\mathrm{II}}, \tag{13}$$

其中，C_N^{II} 和 S_N^{II} 分别表示 II 型离散余弦变换和离散正弦变换 [35]。对于其他类型的离散余弦变换和离散正弦变换，也可以推导出类似的分解。该恒等式在维数为 $2N = 2^{n+1}$ 的完整希尔伯特空间上定义了一个酉映射。因此，将经典 FFT 替换为 QFT，并为 U_N 和 V_N [26] 构造量子电路，可以自然地将其推广到量子情形。

实现组合量子余弦-正弦变换（量子余弦正弦变换）的完整量子电路，与公式（13）类似，如图 1（b）所示。我们强调，该电路完全采用约化变换 $\mathcal{Q}_n$，参见公式（12）。尽管这一限制对于量子实现而言并非严格必要，但对于获得高效的经典张量列表示至关重要。完整电路

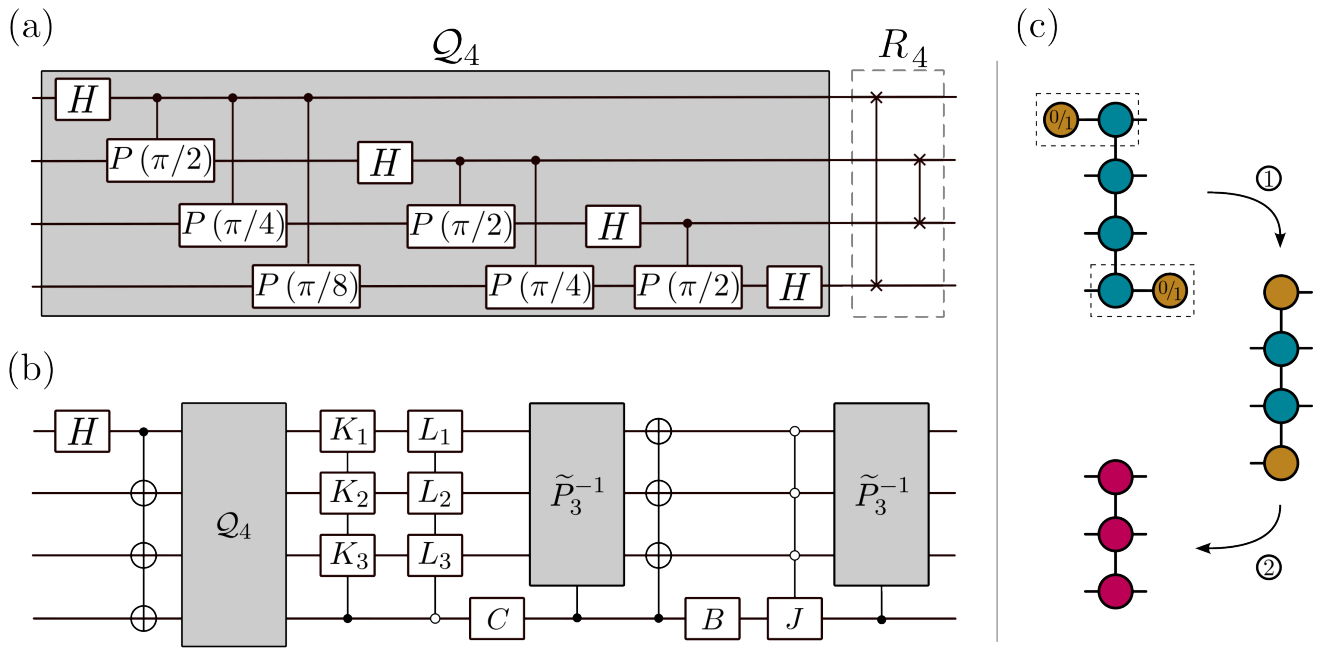


图1： 用于 $n = 4$ 个量子比特的量子电路：(a) QFT 和 (b) QCST。(c) 从二者共享的 TTO 表示中提取 SFCT 或 SFST。通过将边界核固定为平凡的 0– 或 1–向量，即可选择 SFCT 或 SFST。该过程通常会产生倾斜 TTO 表示，随后通过重塑步骤将其恢复为标准规范 TTO 形式。(a) 和 (b) 中的电路基于 [37] 和 [26], 中介绍的构造，并进行了正文所述的修改。

表示采用了一组定义如下的非标准门

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \qquad J = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

以及 $K_j = \mathrm{diag}(\omega^{2^{j-1}}, 1)$、$L_j = \mathrm{diag}(1, \omega^{2^{j-1}})$ 和 $C = \mathrm{diag}(1, \bar{\omega})$，其中 $\omega = \exp\left[2\pi i/(4N)\right]$。此外，该构造还使用了位逆序的逆算子置换门

$$\widetilde{P}_n^{-1} = R_{\mathrm{inv}} P_n^{-1} R_{\mathrm{inv}}$$
$$P_n^{-1} : |x\rangle \to |(x-1) \bmod 2^n\rangle,$$

其中 $x \in \{0, \ldots, 2^n - 1\}$。算子 R_{inv} 构成位逆序操作 $R_{\mathrm{inv}} |b_1 b_2 \cdots b_n\rangle = |b_n \cdots b_2 b_1\rangle$。原始置换门 P_n 是一种广为人知的构造，仅由多重受控非门组成 [40]。

3.3. 量子启发式谱方法

在建立了 QCST 的完整量子电路表示后，我们现在来探讨其经典可模拟性。具体而言，我们要考察该变换在经典 TT 表示中的复杂度如何扩展。众所周知，约化量子傅里叶变换 $\mathcal{Q}_n$ 是构造 QCST 的核心，它可以用 TT 格式高效地表示，这种表示称为快速傅里叶变换（SFFT）[17, 18]。这表明 QCST 结构也具备类似的性质。由此得出本文的一项核心结果：

定理1 (表达能力定理)。 实现 *QCST* 的量子电路具有 *TT* 表示，其最大 *TT* 秩 $\hat{r}$ 有界于

$$\hat{r} \le 12\, r_S,$$

其中，r_S 表示与相对精度 $\varepsilon_{\mathrm{TT}}$对应的 *SFFT* 的 *TT*秩。如果将电路限制为仅实现量子版 *DCT* 或 *DST* 中的任一种，则相应的 *TT*秩满足更严格的界

$$\hat{r} \le 6\, r_S.$$

证明对图中电路进行算子施密特分解，1并沿约化量子傅里叶变换左右两侧的每一种量子比特二分划分 $\mathcal{Q}_n$。初始的 Hadamard 门–CNOT 块的施密特秩为二。在 $\mathcal{Q}_n$右侧，受控 K/L 块可化简为秩一的乘积算子，而两个受控置换的秩为三，CNOT-*B*-*J* 块的秩为四。由于这些分量共享算子因子，组合后的右侧块并未达到这些秩的简单乘积，而是其施密特秩恰为六；固定最后一个量子比特的输出指标后，该秩降至三。将前导因子二与 r_S 的秩 $\mathcal{Q}_n$结合起来，其中该秩由规定的算子精度 $\varepsilon_{\mathrm{TT}}$决定，可分别得到以下界$\hat{r} \le 2 \cdot 6\, r_S$和 $\hat{r} \le 2 \cdot 3\, r_S$。定理 1的详细证明见附录 A。遵循 SFFT 所采用的命名惯例，我们将 QCT 和 QST 的 TTO 表示分别称为超快速余弦变换（SFCT）和超快速正弦变换（SFST）。

更紧的界可直接应用于 SFCT 和 SFST：二者均由 QCST 固定边界物理指标得到，见图 1(c)。固定指标不会增加键维数，因此这些变换的秩受 QCST 的秩所界定。将得到的张量重塑为标准 TTO形式（步骤 2）可能会导致秩进一步增加，但如第 $6\,r_S$节所示，观测到的秩仍远低于 3.4。SFFT 达到规定精度 $\varepsilon_{\mathrm{TT}}$ 所需的秩会随着离散化不断细化而趋于饱和。因此，上述秩界意味着 QCST 也具有相同的饱和行为，进而 SFCT 和 SFST 亦然。接下来的问题是，在什么条件下应优先采用 TTO 版本而非经典变换。

在继续分析之前，我们使用所谓的 Zip-Up算法将量子电路转换为TTO表示。该算法逐片依次构造算子 [41]。随后依次对得到的各片进行收缩和压缩，从而获得表示完整变换的单个TTO。

重要的是，在张量网络框架中，不再需要满足酉性约束。这使我们能够从完整的QCST算子中构造余弦变换和正弦变换各自的TTO表示，而无需显式丢弃信息。为此，我们利用式（13）中分解的块对角结构。通过固定TTO的边界物理指标，可以提取DCT和DST分量。具体而言，我们将第一个核的输入指标和最后一个核的输出指标投影到基态 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$，见图1（c）。这种选择反映了底层算子的结构：第一个核的输入指标决定选取式（13）中矩阵表示的上块还是下块，而最后一个核的输出指标则区分左块和右块。这是因为采用的动量空间约定会反转各个核的排列顺序。因此，第一个核同时编码了最高有效输入位和最低有效输出位。

执行所得的缩并会产生一种略有变形的 TTO，其中边界核分别带有单个输入指标或单个输出指标，见图1（c），步骤 1。为恢复标准的 TTO 结构，我们依次进行缩并和重塑操作。首先，将最上方的核与其相邻核进行缩并，并重塑为显式包含一个输入指标和两个输出指标的形式。所得张量随后与下一个核进行缩并并再次重塑，从而有效地将输出指标传递到下一个核。接着进行奇异值分解，将复合张量重新拆分为两个核：第一个核恢复标准的 TTO 结构，而第二个核暂时带有两个输出指标。重复这一过程，使输出指标沿链逐个核地移动，直到到达最后一个核。在此过程中，输出指标沿链传播，而第一个核由于失去其外部指标，被吸收到相邻核中。这样便恢复了规则的 TTO形式，如图所示1（c），步骤 2。

3.4. 验证

在将超快速谱变换应用于实际问题之前，我们首先通过将 SFCT 与经典DCT 在一系列具有代表性的输入信号上进行比较，评估 SFCT 的性能。具体而言，我们研究其准确性、计算成本以及 TTO秩增长随离散化阶数的变化，而离散化阶数由量子比特数量 n 表征。

为探究不同的谱特性，我们考虑以下几类输入：（i）光滑周期信号；（ii）高频振荡信号；（iii）不连续信号；（iv）局部化高斯剖面；以及（v）独立同分布的高斯白噪声样本。这些测试案例涵盖了不同范围的正则性和谱局部化特性，已知这些特性会显著影响TT可压缩性。具体定义见附录B。所有实验均在大小为$N = 2^n$的一维均匀网格上进行，其中 n 取值范围为2 至 26。经典参考解采用正交归一型II DCT计算。然而，由于DCT-II的计算成本不依赖于具体输入，因此仅报告一次具有代表性的运行结果。基于TT的计算采用带容差 $\varepsilon_{\mathrm{TT}} = 10^{-8}$的误差控制截断方案。因此，参考解与TT近似之间的误差保持在所设定容差的量级，无需单独绘图展示。不施加显式的秩约束，从而允许TT秩动态调整。

图 2(a) 展示了经典DCT与SFCT的运行时间比较。经典实现呈现出预期的 $\mathcal{O}(N \log N)$ 渐近趋势 [42], ，而基于TT的方法在所有结构化输入类型上都表现出良好的渐近行为。相比之下，非结构化白噪声输入无法实现压缩，其渐近趋势与经典方法相近，仅相差一个常数因子。对于结构化输入，所有基于TT的方法在约 $n \in [19, 21]$处与经典方法出现交叉。超过这一范围后，SFCT 的效率会不断提高，运行时间可缩短数个数量级。

SFCT 表示的最大TT秩演化如图 2(b) 所示。对于较小的 n，秩在初始增长阶段后趋于稳定，平台值约为 32。这一行为与定理1一致，其前提是底层约化 QFT算子在固定秩处饱和（$r_S = 8$针对所选精度）。

最后，图 2（c）比较了SFCT算子与经典DCT所需的内存。由于经典变换通过FFT计算，无需构造变换矩阵，因此其内存主要由信号向量决定，并随 $\mathcal{O}(N) = \mathcal{O}(2^n)$ 增长；而稠密 $2^n \times 2^n$变换矩阵仅作为参考展示。当TT秩达到平台后，SFCT的内存仅随 n 线性增长。两条曲线在 $n = 15$ 和$n = 16$之间相交；在 $n = 26$ 处，SFCT算子需要 0.67 MB

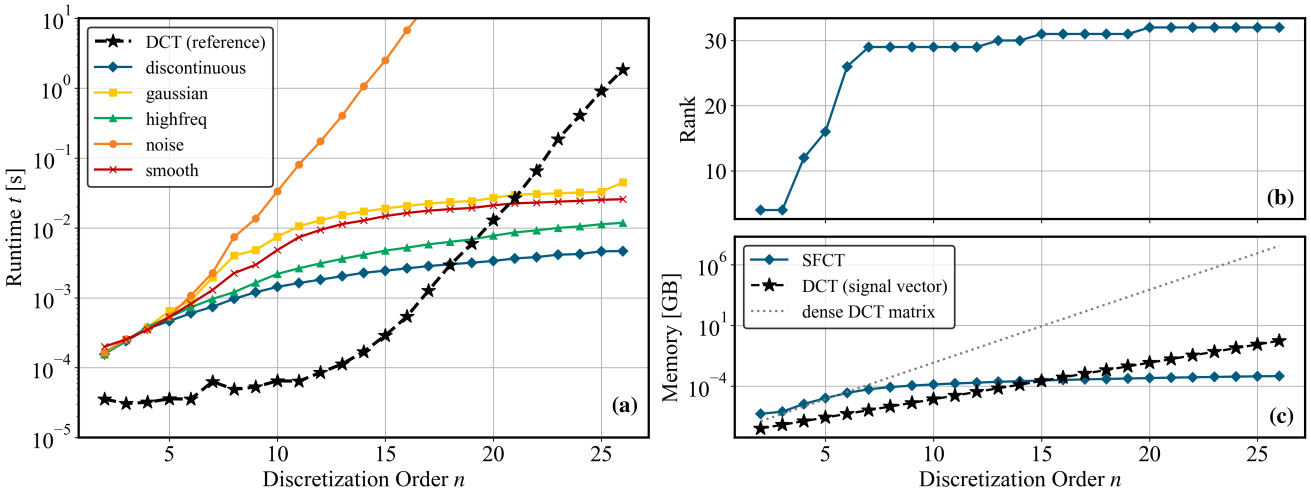


图2： (a) 对于不同输入类别，经典DCT与SFCT在不同离散化阶数 n下的运行时间比较；(b) SFCT的TTO秩演化；(c) SFCT算子的内存占用，并与经典FFT的DCT所需的信号向量（虚线）以及作为参考的稠密DCT矩阵（点线）进行比较。

与信号向量的 540 MB 相比，内存减少了约800倍。

总体而言，这些结果表明，对于能够进行紧凑TT表示的输入，SFCT能够高效且准确地表示谱变换，尤其是在大 n的高分辨率区域。DST-II和SFST的相应结果见附录 C。

4. 应用I：量子启发式CFD

TT 方法已被用于模拟周期性 [3, 43, 44] 和壁面边界区域中的不可压缩流 [4,45, 46]。其中一些方法在物理空间中求解压力或流函数的泊松方程。对于参考文献 [47], 中的二维Rayleigh–Bénard基准算例，我们将两种谱TT压力求解器与一种预条件物理空间TT求解器进行比较。在该问题中，流体层从下方加热、从上方冷却 [48]。水平方向是周期性的，并且在平板处对速度施加无滑移条件，在压力投影中施加齐次Neumann条件 [20, 49]。离散压力算子可通过水平方向的傅里叶变换和壁法向方向的DCT-II对角化（第3节）。

根据参考文献 [47], ，我们采用Oberbeck–Boussinesq近似，以板间距 L为长度尺度，以温差 Δ为温度尺度，并以 $U_{\mathrm{ff}} = \sqrt{g\beta\Delta L}$为速度尺度，其中 g 是重力加速度， β 是热膨胀系数。时间以$t_0 = L/U_{\mathrm{ff}}$为单位。瑞利数和Prandtl数分别为 $Ra = g\beta\Delta L^3/(\nu\kappa)$ 和 $Pr = \nu/\kappa$，其中运动黏度为 ν，热扩散率为 κ。控制方程为

$$\partial_t u_i + u_j\partial_j u_i = -\partial_i p + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}}\,\partial_j\partial_j u_i - \theta\delta_{iy}, \tag{14}$$

$$\partial_t\theta + u_j\partial_j\theta = \frac{1}{\sqrt{Ra\,Pr}}\,\partial_j\partial_j\theta, \tag{15}$$

$$\partial_j u_j = 0. \tag{16}$$

这里， $u_x = u$和$u_y = v$， 重复指标 i， $j \in \{x, y\}$采用求和约定， δ_{iy} 为Kronecker delta。坐标y 向下增大，与参考文献 [47]中的定义相同。压力 p 以参考密度乘以 U_{ff}^2为尺度， θ表示相对于板平均温度的温度。我们在宽度为$2L$的区域内使用$Ra = 10^8$ 和 $Pr = 1$ 。在无量纲坐标下，板面处$y = \pm 1/2$、 $u = v = 0$和 $\theta = \pm 1/2$。图中使用相对于下板的高度 $z/L = 1/2 - y$和向上速度 $w = -v$。

我们采用参考文献 [47] 中描述的均匀交错网格、二阶有限差分和两阶段隐式–显式 Runge–Kutta（IMEX-RK2）格式。离散阶数为 $n_x = 9$ 和 $n_y = 8$，对应 $N_x = 2^{n_x} = 512$和 $N_y = 2^{n_y} = 256$ 个网格点，以及 $\Delta t/t_0 = 1/512$。令 D_h和 ∇_h 分别表示交错网格散度和梯度。每次压力投影均求解

$$D_h\nabla_h p = \frac{D_h \boldsymbol{u}^*}{\Delta t_{\mathrm{p}}}, \tag{17}$$

其中， $\boldsymbol{u}^*$ 为中间速度， Δt_{p} 在第一阶段为 $\Delta t/2$ ，在第二阶段为 Δt。速度修正为$-\Delta t_{\mathrm{p}}\nabla_h p$。

为了比较求解器，我们为 r 速度、温度和压力规定秩上限，而不是像第3.4节那样使用压缩容差。构造压力方程右端项（RHS）时，我们也采用相同的秩上限。为评估存储效率，我们使用每个场的张量列车系数与全网格数组条目数之比：

$$S_{\mathrm{rel}} = \frac{\sum_{k=1}^{n_x+n_y} 2r_{k-1}r_k}{N_x N_y}.$$

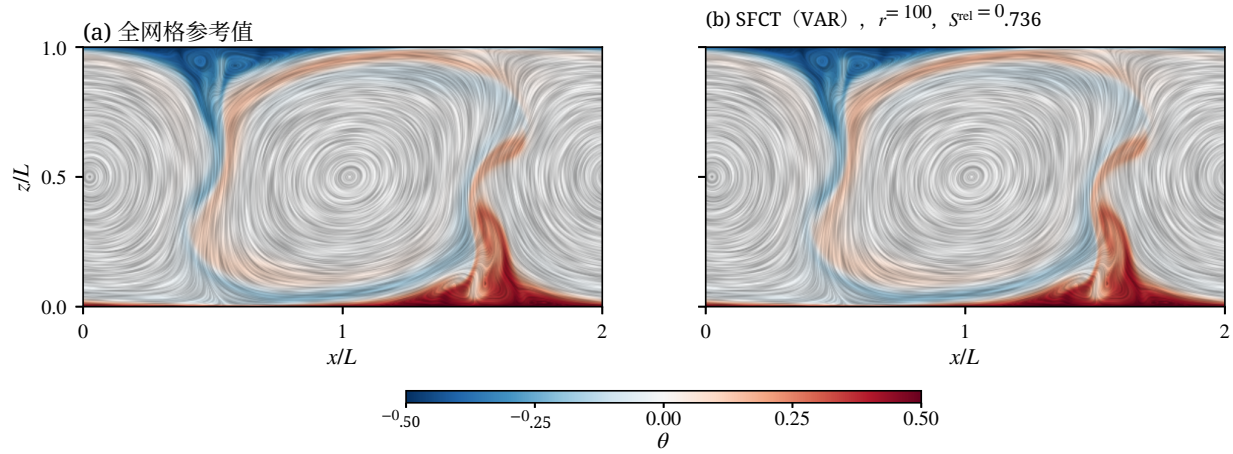


图 3： $t/t_0 = 2$处的瑞利–贝纳德对流。(a) 全网格参考值和 (b) $r = 100$处的 SFCT 解，采用 VAR 进行逆谱乘积。参数为 $Ra = 10^8$, $Pr = 1$, $n_x = 9$ 和 $n_y = 8$（512×256 个网格点）。颜色表示温度，线积分卷积（LIC）表示速度方向。

三种压力求解器如下，其中两种谱求解器均在水平方向使用 SFFT，但以不同方式计算壁面法向的 DCT-II：

1.预条件 *ALS*。 我们使用 ALS 求解物理空间压力方程 [30],，采用左预条件子 P，最大算子秩为 r_{P} [46]。构造 P及其在局部线性系统中的应用详见附录D。2. *SFCT*。 SFCT 直接对 n_y个壁法向位置应用 DCT-II，而不对场进行扩展。3. 偶延拓 + *SFFT*。 通过偶延拓以及对 $n_y + 1$ 个位置应用 SFFT 来计算壁法向 DCT-II，随后进行限制和相位校正。其余压力求解操作与方法 2 相同。

周期–Neumann 拉普拉斯算子具有常数零模态。根据方程（11）的要求，我们在求解前减去右端项的离散均值。交替最小二乘法将压力固定在一个网格点上。谱求解器则将其均值设为零。对于相容右端项的精确求解，这两种规范给出的压力梯度相同。将 b 记为右端项，并用带帽符号表示混合傅里叶–余弦变换，谱求解器计算

$$\widehat{p} = G \odot \widehat{b}, \qquad G_{k\ell} = \begin{cases} (\lambda_k^{(x)} + \lambda_\ell^{(y)})^{-1}, & (k,\ell) \neq (0,0), \\ 0, & (k,\ell) = (0,0). \end{cases} \tag{18}$$

这里 $k = 0, \ldots, N_x - 1$和 $\ell = 0, \ldots, N_y - 1$，其中 $(0,0)$为常数模态。对于缩放后的网格间距 $h_x = 2/N_x$ 和 $h_y = 1/N_y$，特征值为

$$\lambda_k^{(x)} = -\frac{4}{h_x^2} \sin^2 \frac{\pi k}{N_x}, \qquad \lambda_\ell^{(y)} = -\frac{4}{h_y^2} \sin^2 \frac{\pi \ell}{2N_y}.$$

法向壁面的特征值具有第 3 节推导出的余弦谱。对于 SFCT，我们近似

使用 VAR 计算逆谱乘积。对于偶延拓 +SFFT，我们将 VAR 与 RSI [34] 在相同乘积下进行比较。我们将这三种谱配置与预条件 ALS 进行比较。我们使用张量交叉插值（TCI）构造 G 的 TT表示 [50]。谱构造容差 ϵ_{spec} 控制 G、特征值向量和相位因子。逆变换后进行实化（附录 F），并舍入至 r。

从相同的已发展对流状态出发，我们通过 $t/t_0 = 2$ 比较各条轨迹。我们在 $r = 50$、100、150 处运行三种谱配置，并且仅在 $r = 100$ 处运行预条件交替最小二乘法。另行进行的短时运行用于比较全部四种求解器配置在 $r = 100$ 处的计算成本。

对于速度和温度，我们采用

$$e_{\boldsymbol{u}} = \frac{\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{ref}}\|_2}{\|\boldsymbol{u}_{\mathrm{ref}}\|_2}, \qquad e_\theta = \frac{\|\theta - \theta_{\mathrm{ref}}\|_2}{\|\theta_{\mathrm{ref}}\|_2}. \tag{19}$$

速度范数包含两个分量。参考解采用相同的空间和时间离散化，但不使用 TT 压缩。我们使用以下指标评估热传输和不可压缩性：

$$Nu_V(t) = 1 - \sqrt{Ra\,Pr}\,\langle v\theta \rangle_V, \qquad d_{\mathrm{div}}(t) = \frac{\|D_h \boldsymbol{u}\|_2}{\sqrt{N_x N_y}}. \tag{20}$$

此处 $\langle \cdot \rangle_V$ 表示体积平均值。负号源于向下的速度 $v = -w$。

图 3 比较了$t/t_0 = 2$处的全网格参考值和 SFCT 场。秩-100 TT 场的相对存储需求为 $S_{\mathrm{rel}} = 0.736$。图 4（a、b）中的所有四次秩-100 计算均重现了参考热传输，其相对偏差在采样时间内均低于 1.1×10^{-5}。

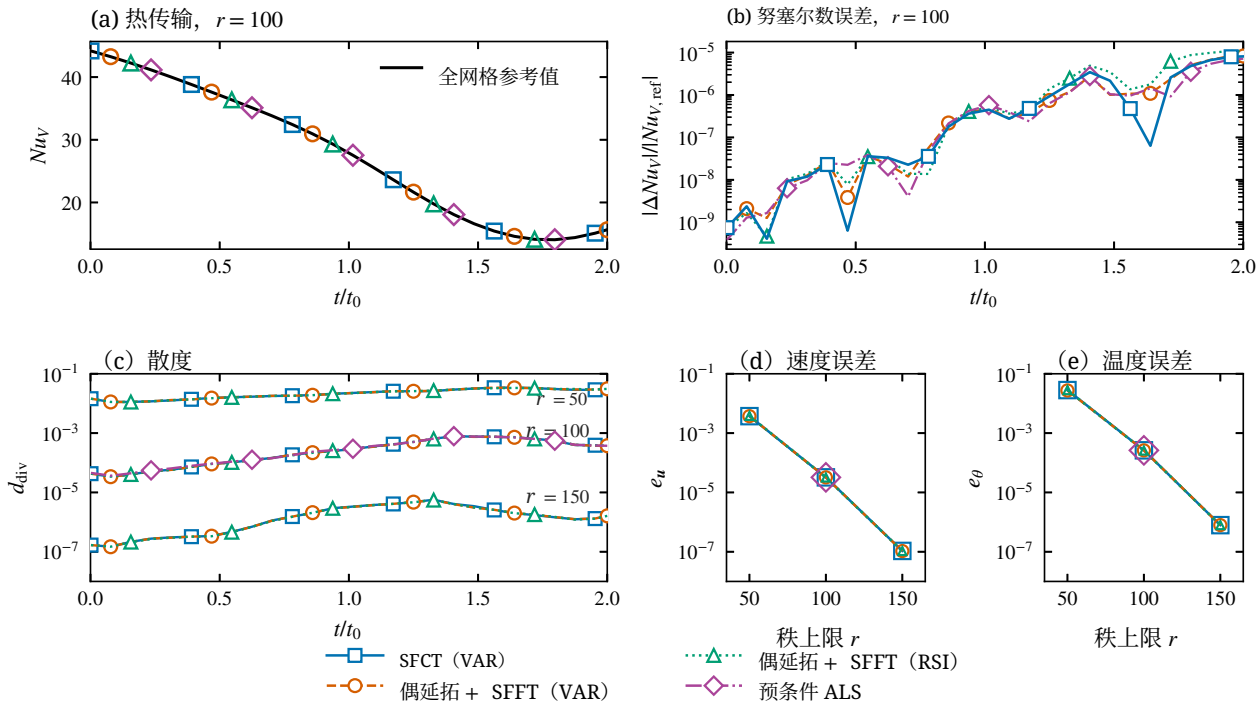


图 4： 四种压力求解器配置下的热传输、速度散度和场误差。谱构造使用 $\epsilon_{\mathrm{spec}} = 10^{-10}$。(a) $r = 100$处的体积努塞尔数及其相对误差 (b)。(c) 所示秩下的散度均方根。(d) 相对速度误差和 (e) $t/t_0 = 2$ 处的相对温度误差。仅显示预条件 ALS 的结果，见 $r = 100$。

提高场秩可同时减小散度和场误差（图 4（c–e））。SFCT，以及先进行偶延拓再使用 SFFT，在三个秩下给出了相近的误差。它们的端点散度均方根从约 3.1×10^{-2}（在 $r = 50$ 时）降至 1.6×10^{-6}（在 $r = 150$时）。在 $r = 100$时，四种配置的端点速度误差和温度误差均约为 3.2×10^{-5}和 2.6×10^{-4}，散度均方根值为 $(3.74–3.84)\times10^{-4}$。在 $r = 150$时，谱方法计算将场误差分别降至约 1.1×10^{-7}和7.9×10^{-7}，约比 $r = 100$时小 300 倍。全网格参考值的散度保持低于 8.5×10^{-15}。在张量列车计算中，即使压力求解准确，散度仍可能存在，因为我们将右端项和更新后的速度舍入到秩 r。在采用偶延拓的 SFFT 计算中，将 VAR 改为 RSI 对场误差的影响相对较小。

图 5 比较了四种配置在$r = 100$ 时的压力求解和完整时间步耗时。在第 10 步，四种配置的速度相对误差均约为 7.7×10^{-7}，温度相对误差均约为 6.2×10^{-6}。与预条件 ALS 相比，采用 VAR 的 SFCT 在压力求解方面的 3.75 倍加速比，以及在完整时间步方面的 1.48 倍加速比。对于先进行偶延拓再使用 SFFT 的方案，相应的加速比分别为3.45 和1.45 （采用 VAR），以及7.30 和 1.62（采用 RSI）。动量和温度求解占据了剩余耗时的大部分。

5. 应用II：量子启发均匀化

对于给定的复合材料，基于傅里叶方法的均匀化 [51, 52] 通过求解代表性体积单元（RVE）上的微观边值问题 $\Omega = [0, L]^D$ [53]，确定其宏观力学响应。对于给定的宏观应变 $\mathbf{E}$，目标是确定有效刚度张量 $\mathbf{C}_{\mathrm{eff}}$，它通过以下关系将宏观应力与应变联系起来

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{eff}} = \mathbf{C}_{\mathrm{eff}} : \mathbf{E}.$$

本文考虑的代表性体积单元由不同材料相组成，具有分片常值性质和清晰界面。局部本构响应由下式描述:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}). \tag{21}$$

我们首先回顾经典的基于 FFT 的均匀化方案及其张量列车扩展，然后将后者推广至与周期性兼容的混合均匀边界条件（PMUBC）。这种边界条件尤其适用于本身并非周期性的有限微结构样本。其谱处理依赖于前文介绍的 DCT-II 和 DST-II 公式。

在本节中，应力张量和应变张量均以 Voigt 记号表示为向量 $\boldsymbol{\sigma}$，$\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^{n_v}$，其中$n_v = 3$ 在二维中，而 $n_v = 6$ 在三维中。刚度张量相应地表示为矩阵 $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n_v\times n_v}$ [52]。

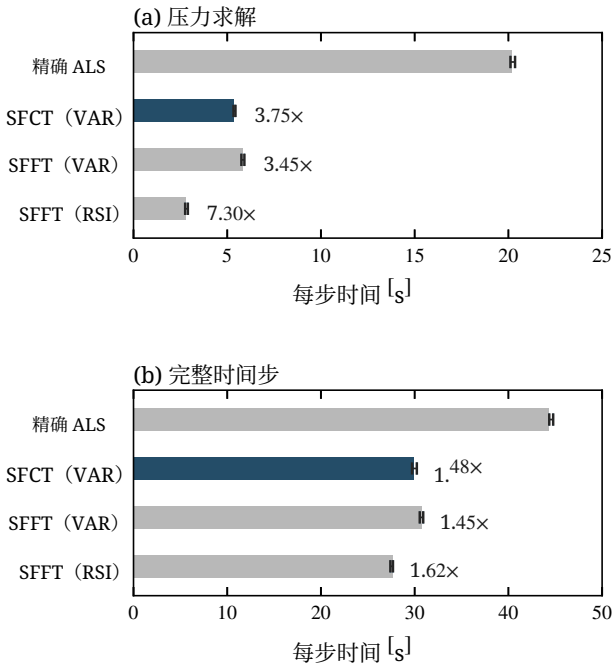


图5： 每步时间：$r = 100$ 其中 (a) 为两个压力投影的总时间，(b) 为完整步骤的时间。SFFT 表示偶延拓运行。柱形显示中位时间。误差线涵盖三次重复运行。每个标签显示相对于预条件 ALS（Prec. ALS）的中位加速比，该比值根据匹配的运行计算得出。计时流程和求解器详情见附录E 。

算法1： 基于FFT的均质化算法

输入： 宏观应变 $\mathbf{E}$、刚度 $\mathbf{C}$、容差 δ_{tol}
输出： 局部应变场 $\boldsymbol{\varepsilon}$
$\boldsymbol{\varepsilon}^{(0)} \leftarrow \mathbf{E}$
$m \leftarrow 0$
当未收敛**时**
  $\boldsymbol{\tau}^{(m)} \leftarrow (\mathbf{C} - \mathbf{C}^0)\boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}$
  $\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(m)} \leftarrow \mathcal{F}\left[\boldsymbol{\tau}^{(m)}\right]$
  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)} \leftarrow \hat{\Gamma}^0\,\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(m)}$
  $\boldsymbol{\varepsilon}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{E} - \mathcal{F}^{-1}\left[\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)}\right]$
  如果 $\left\|\boldsymbol{\varepsilon}^{(m+1)} - \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}\right\|_F < \delta_{\mathrm{tol}}\,\|\mathbf{E}\|_F$ **则**
    中断
  end
  $m \leftarrow m + 1$
end
返回 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}$

5.1. 基于FFT的均匀化

在周期性代表性体积单元 Ω上，总位移场表示为 $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$，其中 $\mathbf{E}\mathbf{x}$ 表示给定的宏观部分，$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ 是周期性涨落。局部应变场由位移场通过下式获得：

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} + \nabla^S \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}), \tag{22}$$

其中 ∇^S 表示梯度的对称部分。我们还要求涨落在单元上的平均梯度为零，

$$\frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega \nabla\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \mathbf{0},$$

这确保了 $\mathbf{E}$ 等于体积平均应变。

要求局部应力场满足平衡，并引入均匀参考刚度 $\mathbf{C}_0$ 以及极化场

$$\tau(\mathbf{x}) = [\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{C}_0]\,\varepsilon(\mathbf{x}),$$

局部平衡问题可改写为众所周知的 Lippmann–Schwinger 方程 [51, 54]

$$\varepsilon(\mathbf{x}) = \mathbf{E} - \left\{\Gamma_0 * \left[(\mathbf{C} - \mathbf{C}_0)\,\varepsilon\right]\right\}(\mathbf{x}). \tag{23}$$

符号 Γ_0 表示与均匀参考刚度 $\mathbf{C}_0$相关联的 Green–Eshelby 算子。该算子在傅里叶空间中具有闭式表达 [55],此外，在该表示下，Lippmann– Schwinger 方程中的卷积可简化为逐点乘积。因此，可利用快速傅里叶变换（FFT）（记作 $\mathcal{F}$）高效求值，从而得到基于FFT的均匀化算法1。该算法从 $\varepsilon_0 = \mathbf{E}$开始迭代求解式（23），直至满足收敛准则 δ_{tol}。此处及下文中，我们令 $\delta_{\mathrm{tol}} = 10^{-4}$。

收敛后，根据每个给定宏观应变 $\mathbf{E}$对应的体积平均应力，可得到有效刚度张量 $\mathbf{C}_{\mathrm{eff}}$。具体而言，

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{eff}} = \frac{1}{|\Omega|}\int_\Omega \mathbf{C}(\mathbf{x})\,\varepsilon(\mathbf{x})\,\mathrm{d}\mathbf{x}, \tag{24}$$

所得应力–应变关系确定了 $\mathbf{C}_{\mathrm{eff}}$ [56]。

对于 N^D 离散化，基于 FFT 的方案的计算成本随 $\mathcal{O}(N^D \log N)$ 增长。这促使我们在下一小节中引入张量列车表述，旨在降低高分辨率代表性体积单元的计算和内存需求。

5.2. 基于张量列车的扩展

基于 FFT 的均匀化方案可以通过将离散化的场和算子表示为低秩张量表示，并用超快速傅里叶变换（SFFT）替代经典傅里叶变换，转化为张量列格式。所得基于 SFFT 的均匀化方案的详细推导见 [11]；此处我们总结与当前 formulation 相关的方面。所有场和算子均采用第 2节中的量化张量列表示。

与 TT 形式体系常规应用中常考虑的标量场不同，均质化算法中的量还带有额外的

张量指标，其维度为 n_v 与 Voigt 表示相关。因此，TT 表示除了必须包含与离散化过程相关的指标外，还必须考虑这些指标。为此，我们在 TT 表示的开头引入一个额外的 控制核 ，其维度对应于 Voigt 分量的数量；在本文的三维形式中，该数量为六。Green–Eshelby 算子需要特别注意，因为其动量空间表示要求采用特定的 TT 核排序，且该排序必须符合 SFFT 所规定的约定（参见第 3节）。对于多维张量积变换，可通过在每个空间维度内分别反转 TT 核的排序来实现这一点。

采用这些表示后，只需将傅里叶变换 $\mathcal{F}$ 和 $\mathcal{F}^{-1}$ 分别替换为 SFFT 及其逆变换（记作 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{S}^{-1}$），即可将基于 FFT 的均匀化过程直接转换为 TT 格式。Green–Eshelby 算子 $\hat{\Gamma}_0\hat{\tau}_m$的逐点应用则由快速 AMEn TT-TT O 收缩算法取代，该算法记作 $\mathcal{A}(\hat{\Gamma}_0, \hat{\tau}_m)$ [32]。

因此，最终得到的基于 SFFT 的均匀化方案遵循与经典快速傅里叶变换表述相同的不动点迭代。收敛后，通过收缩所得的张量列表示，即可获得局部应变场。如果所有场和算子的 TT 秩都保持有界，则每次迭代的计算成本仅随 N呈多对数级增长，与经典的基于 FFT 的方案 [11]的 $\mathcal{O}(N^D \log N)$复杂度形成对比。能否达到这一状态取决于微结构。

5.3. 谱张量列车均质化

我们将基于 SFFT 的均质化框架推广至谱张量列车（STT）均质化，具体做法是以周期性兼容混合均匀边界条件（PMUBC）[21, 57]取代纯周期性边界条件。这些边界条件结合了位移约束与牵引约束，对周期性并非固有属性的有限微结构样本尤其适用。具体而言，对于多孔介质，微结构的有限体积表示可能呈现明显的尺寸效应和边界效应，而人为进行周期延拓可能改变孔隙连通性等特征，进而导致预测的有效性质出现显著差异 [58–60]。为便于阅读，以下构造以二维情形为例。将其推广至三维十分直接，数值实验中采用的正是这一推广形式。

对于以 Voigt 记号表示的给定宏观拉伸载荷 $\mathbf{E} = E_1\mathbf{e}_1$，相应的 PMUBC 为

$$
\begin{aligned}
&u_1(0,y) = -\frac{E_1 L_1}{2}, && u_1(L_1,y) = \frac{E_1 L_1}{2},\\
&\sigma_3(0,y) = 0, && \sigma_3(L_1,y) = 0,\\
&\sigma_3(x,0) = 0, && \sigma_3(x,L_2) = 0,\\
&u_2(x,0) = 0, && u_2(x,L_2) = 0.
\end{aligned}
$$

这里，沿加载方向规定法向位移，而横向位移和剪切牵引则按照 PMUBC 规定进行约束。

对于宏观剪切载荷 $\mathbf{E} = E_3\mathbf{e}_3$，相应条件的形式有所不同，满足

$$
\begin{aligned}
&\sigma_1(0,y) = 0, && \sigma_1(L_1,y) = 0,\\
&u_2(0,y) = -\frac{E_3 L_1}{4}, && u_2(L_1,y) = \frac{E_3 L_1}{4},\\
&u_1(x,0) = -\frac{E_3 L_2}{4}, && u_1(x,L_2) = \frac{E_3 L_2}{4},\\
&\sigma_2(x,0) = 0, && \sigma_2(x,L_2) = 0.
\end{aligned}
$$

在这里，位移约束和牵引力约束的作用按分量互换。因此，边界条件的具体选择取决于所施加的宏观应变分量，而非对所有载荷工况都相同。三维 formulation 中所有分量的详细信息见附录 H。

PMUBC 也可以通过扩展的镜像域来解释。具体而言，在位移场按如下方式扩展的前提下，原始域 $\Omega = [0, L]^2$ 上的 PMUBC 等价于 $\widetilde{\Omega} = [-L, L]^2$ 上的周期性边界条件

$$
\begin{aligned}
&u_1(-x,y) = -u_1(x,y), && u_2(-x,y) = u_2(x,y),\\
&u_1(x,-y) = u_1(x,y), && u_2(x,-y) = -u_2(x,y).
\end{aligned}
$$

这些反射对称性会使局部应变和应力分量呈现相应的偶对称和奇对称。所得扩展在镜像单元边界处满足相应的匹配条件，因此在扩展域 [57] 上定义了周期场。

尽管这种构造可以直接在镜像域上应用基于 FFT 的均匀化方案，但它会使二维中的网格点数量增加四倍，三维中增加八倍。为避免这种显著开销，我们遵循 [21]，直接在原始域上利用镜像域构造所引入的对称性。具体而言，相对于给定坐标，每个场分量均为偶对称或奇对称，其具体对称性取决于所施加的宏观应变和场分量。利用这一结构，只需使用原始网格的一半即可计算相应的傅里叶变换。

该构造与第3节的偶延拓类似，但有两点不同：此处的对称性由边界条件决定，而非人为选择；并且场分量与载荷工况所对应的对称性各不相同。首先考虑离散化体积分量 f_j，$j = 0, \ldots, N-1$，其在镜像域上的偶对称或奇对称可转换为网格层面的关系

$$
f_j = \pm f_{N-1-j}, \qquad \begin{cases} + & \text{even symmetry},\\ - & \text{odd symmetry}. \end{cases}
$$

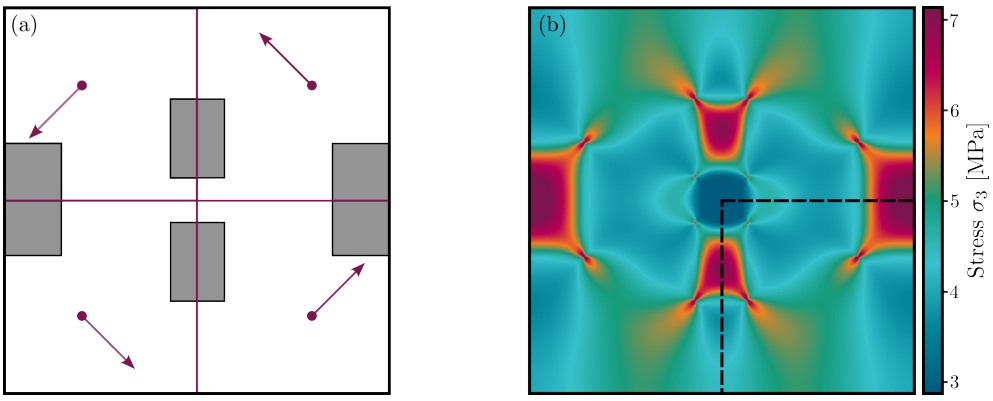


图6： 三维代表性体积单元的切片：(a) 输入几何；(b) 剪切载荷作用下对应的局部应力场 σ_3。箭头表示各象限内位移向量之间的关系。虚线框表示STT均匀化方法所用的缩减区域。灰色区域的杨氏模量为 $E_1 = 20\,\mathrm{GPa}$，白色区域的杨氏模量为 $E_2 = 1\,\mathrm{GPa}$。两个区域的泊松比均为 $\nu_1 = \nu_2 = 1/3$。

将此关系代入离散傅里叶系数的公式

$$\hat{f}_k = \sum_{j=0}^{N-1} f_j \exp\left(\frac{2\pi \mathrm{i} jk}{N}\right)$$

将每个索引 $j < N/2$与其镜像对应项 $N-1-j$ 配对，对于偶数个网格点，可得

$$\hat{f}_k^{\mathrm{even}} = 2\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\pi k}{N}\right) \sum_{j=0}^{N/2-1} f_j \cos\left(\frac{\pi(2j+1)k}{N}\right),$$

$$\hat{f}_k^{\mathrm{odd}} = 2\mathrm{i}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\pi k}{N}\right) \sum_{j=0}^{N/2-1} f_j \sin\left(\frac{\pi(2j+1)k}{N}\right).$$

相位因子考虑了反射对称中心位于网格点之间这一事实，而其余求和项则为实值余弦变换和正弦变换 [21, 61]。

对于剪切分量，相应的对称关系形式为 $f_j = \pm f_{N-j}$，因此得到

$$\hat{f}_k^{\mathrm{even}} = f_0 + (-1)^k f_{N/2} + 2\sum_{j=1}^{N/2-1} f_j \cos\left(\frac{2\pi jk}{N}\right),$$

$$\hat{f}_k^{\mathrm{odd}} = 2\mathrm{i}\sum_{j=1}^{N/2-1} f_j \sin\left(\frac{2\pi jk}{N}\right).$$

因此，PMUBC 表述需要使用带有额外相位因子的离散余弦变换和正弦变换，分别通过 SFCT 和 SFST 在 TT格式中实现。

根据施加的宏观应变，位移、应变和应力场的不同分量呈现不同的对称类型，因此需要采用不同的 SFCT 和 SFST 组合，如图6所示。因此，所用 Hex8R 离散化 [62] 的完整分量变换模式仅依赖于 DCT-II 和 DST-II，详见附录H。与第二类变换一致，其对称轴位于两个样本之间，微结构在体素中心处采样，因此镜像平面与体素边界重合。

在 TT格式中组装这些分量变换时，余弦变换和正弦变换采用的频率集合不同，因此需要统一的频率布局。然而，对于变换长度 $M = N/2$，余弦变换得到的频率为 $k = 0$、…、$M-1$，而正弦变换得到的频率为 $k = 1$、…、M。因此，我们将每个正弦系数存储在槽位 $k \bmod M$，并将奈奎斯特频率 $k = M$ 映射到槽位 0。由于频率 $k = 0$ 处的正弦系数恒为零，这种循环移位不会造成信息损失。然而，此时槽位 0 对余弦分量和正弦分量代表不同的物理频率。应用格林–埃谢尔比算子时必须保留这一区别，因为该算子会耦合 Voigt 分量：在槽位 0，余弦分量在 $k = 0$处耦合，正弦分量在 $k = M$处耦合，而奇偶性不同的分量彼此解耦。其余频率槽位均保持不变。

返回算法1，通过用依赖于载荷、按分量划分的 SFCT 或 SFST 及其相关相位因子，以及上述修正算子，替代标准 SFFT 和周期Green算子，即可将 PMUBC 纳入基于傅里叶的均匀化算法。对于每个 Voigt 分量和载荷工况，沿各空间方向应用指定的一维变换，并依据附录H中列出的对称模式，以可分离方式构造多维变换。相应的一维 TTO 沿连续的方向张量列车核串接，并通过秩一键连接。

相位因子也以秩一的 TT格式表示。它们仅取决于模态索引 k，其定义与式（3）类似，沿相应方向给出。相位TT的 l阶核满足 $v_l(i_l = 0) = 1$，而当 $i_l = 1$时，则有

$$v_l(i_l = 1) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi\, 2^l}{2N}\right).$$

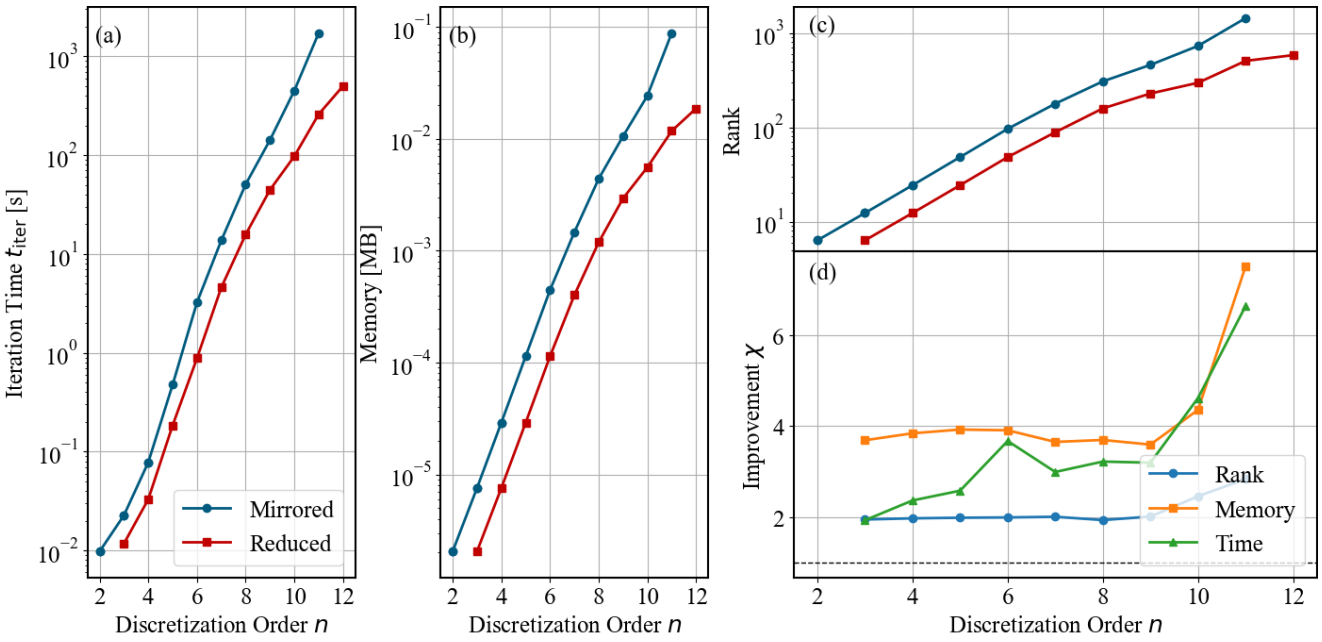


图 7： 三维盒状纤维几何中镜像方法与缩减域方法的计算扩展性：(a) 迭代时间，(b) 内存占用，(c) 最大 TT 秩，以及 (d) 缩减方法相对于镜像方法的改进因子 χ。

根据式（5），可将所得的秩一相位表示提升为张量列算子，并与相应的 SFCT 或快速正弦变换张量列算子直接组合。

5.4. 均匀化算法的评估

在明确了 SFCT 和 SFST 在基于 STT 的均匀化算法中的作用后，我们评估了三维盒状纤维几何，如图6所示。离散化阶数n 决定了 $N = 2^n$ 每个空间维度上的离散点数，以及 $N^3 = 2^{3n}$ 整个三维区域中的点数。因此，所考察的最高阶数 n =12 对应于 $N = 4096$ 每个维度上的点，以及整个区域中约 6.87×10^{10} 个点。对于缩减域表述，PMUBC 表述中明确考虑了较小的计算区域，其中阶数为 n 的镜像域由阶数为 $n-1$的缩减域表示，因此两种方法均在相同的物理分辨率下进行评估。所有实验均采用固定的 TT 压缩容差 $\varepsilon_{\text{TT}} = 10^{-8}$。在经典的基于 FFT 的方案仍可行的范围内，基于 TT 的均匀化能够复现其有效刚度，见附录G。

在所研究的离散化范围内，缩减域表述始终能够降低计算成本，如图7所示。为量化这一降低幅度，我们将改进因子定义为

$$\chi = \frac{Q_{\text{mirrored}}}{Q_{\text{reduced}}}, \tag{25}$$

其中，Q 表示内存占用、迭代时间或最大 TT 秩。因此，$\chi > 1$ 表明存在优势简化形式的优势。在相当广泛的离散化阶数范围内，内存占用约减少至原来的 1/4，而迭代时间的提升幅度约为2至4 倍，适用于 $3 \le n \le 10$，与此前稠密情形下报告的范围一致 [21]。对于最高阶离散化，两方面的提升都进一步增大，达到约 $\chi \approx 7$，见图7(d)。简化形式使最大 TT 秩约减半，这与观察到的内存占用降低相符。

达到收敛所需的迭代次数对于两种表述大致相同，仅在较低离散化阶数下存在小幅变化。因此，迭代时间的缩短主要源于每次迭代计算成本的降低，而不是迭代次数的减少。总体而言，缩减域表述在保持相同物理离散化分辨率的同时，提供了稳定的计算优势。

6. 结论

我们构造了 II 型离散余弦变换和正弦变换（SFCT 和 SFST）的张量列（TT）表示。为此，我们将用于组合量子余弦-正弦变换的量子电路转换为一个张量列算子，并从中提取出这两种变换。该构造还使我们能够推导出一个表达能力定理，为单个变换的 TT 秩建立上界 $6r_S$，且该上界与离散化阶数无关。这里，r_S 表示超快速傅里叶变换（SFFT）的 TT 秩，其值在约$r_S \approx 10$处趋于饱和。数值实验进一步表明，秩

SFCT 和 SFST 的秩均在约 32 处趋于饱和。对于结构化输入，两种变换的运行时间和内存扩展性都较好；当离散化规模超过 2^{20} （约 100 万）时，其运行时间优于经典方法；当离散化点数超过2^{15} （约 3.2 万）时，其内存效率也更高。

对于 $r = 100$ 下的瑞利–贝纳德对流，四种压力求解器配置得到的速度误差和温度误差相近。谱轨迹也准确再现了参考努塞尔数。采用 VAR 计算 Hadamard乘积时，相较于预条件 ALS，SFCT 以及偶延拓后接 SFFT 分别将泊松方程求解加速了 3。75 和 3。45 倍。在偶延拓求解器中使用 RSI 替代 VAR，使泊松方程求解的加速比达到 7。3 倍，完整时间步的加速比达到 1。6 倍。现在，动量和温度求解占据了每步时间的大部分。因此，我们计划测试将递归草图插值（RSI） [34]和交替交叉插值（ACI） [33]应用于动量方程和温度方程中的非线性乘积，能否进一步缩短完整时间步的耗时。

在计算均匀化中，SFCT 和 SFST 使得能够以 TT 格式直接实现高分辨率三维问题中的与周期性相容的均匀边界条件（PMUBC），网格点数最高可达 700 亿。与传统的基于 SFFT 的均匀化算法相比，这种直接实现将速度提高了 2–6 倍，并将内存占用降低了 4–7 倍。

所提出的方法可以进行多种扩展。其他类型的离散余弦变换和正弦变换也可以用类似方式处理。此外，由于切比雪夫–高斯节点上的切比雪夫变换等价于 DCT-II，SFCT 也可应用于非均匀网格上的切比雪夫谱方法。基于量子电路的构造还提供了一个经典框架，用于模拟和基准测试具有非周期边界条件的量子谱算法 [63]。更广泛而言，SFCT 和 SFST 扩展了可在 TT 格式中高效表示的谱变换范围，为具有非周期边界条件的高分辨率偏微分方程求解器开辟了新的可能性。

7. 致谢

S.H.H.、M.K. 和 N.R.G. 衷心感谢德国国家高性能计算（NHR）协会为 NHR西南中心提供资助。N.-L.v.H. 和 D.J. 感谢欧盟地平线欧洲计划根据编号为 101080085（QCFD）的资助协议提供支持。他们关于谱压力求解器的研究是第16届德以联合研发项目提案征集——尤里卡网络的一部分。N.-L.v.H. 和 D.J. 感谢汉堡大学的 Hummel-2集群提供计算资源，该集群由德国研究基金会（DFG）资助，项目编号为 498394658。

A. 表达能力定理的证明

设 U 作用于 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$，并满足 $\dim(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) = 2^n$。对于量子比特 j 和 $j+1$之间的二分划分，算子施密特分解为

$$U = \sqrt{2^n} \sum_{k=1}^{\hat{r}} \sigma_k \, A_k \otimes B_k, \tag{26}$$

其中 $\mathrm{Tr}\left(A_k^\dagger A_{k'}\right) = \mathrm{Tr}\left(B_k^\dagger B_{k'}\right) = \delta_{k,\,k'}$ 和 $\sum_k \sigma_k^2 = 1$。非零系数的数量 $\hat{r}$即为算子施密特秩；它等于该二分划分下的 TT秩，因此，所有二分划分中的最大值就是精确 TT表示的键维数。下文所有算子均针对这样一个固定的二分划分，其索引予以省略；在 j 中明确说明了秩取决于该划分的情形。

全文将用到两个界。将其展开为 m乘积算子 $U = \sum_{k=1}^{m} A_k \otimes B_k$ 可得

$$\mathrm{rank}_S(U) \le m, \tag{27}$$

无需因子的正交性，且秩满足次乘性，

$$\mathrm{rank}_S(UV) \le \mathrm{rank}_S(U)\,\mathrm{rank}_S(V). \tag{28}$$

唯一的外部输入是变换本身：Chen 等人[18] 表明，约化量子傅里叶变换$\mathcal{Q}_n$ 的施密特系数满足

$$\lim_{n\to\infty} \sigma_k(\mathcal{Q}_n) \le \frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left[-\tfrac{2k+1}{2} \log\left(\tfrac{4k+4}{e\pi}\right)\right],$$

因此 $\mathcal{Q}_n$ 具有称为 SFFT 的低秩 TT表示，其秩记为 r_S。接下来需要界定图1(b) 中量子傅里叶变换左右两侧的模块。

A.1. 各个电路组件的施密特秩

组件

在全文中，QFT 后的受控置换是第 $\widetilde{P}_n^{-1}$3.2 节约定的位反转移位，该约定由约化变换引入并作用于后续部分 $\mathcal{Q}_n$。它通过以下递归关系实现

$$\begin{aligned}\widetilde{P}_n^{-1} = &\Big[\,|0\rangle\langle 0|^{\otimes j} \otimes \mathbb{1}^{\otimes(n-j)} + |1\rangle\langle 1|^{\otimes j} \otimes \widetilde{P}_{n-j}^{-1}\Big] \\ &\times \left(\widetilde{P}_j^{-1} \otimes \mathbb{1}^{\otimes(n-j)}\right),\end{aligned} \tag{29}$$

其中，前面的 j 个量子比特承载低位，因此进位要么停留在前 j 个量子比特内，要么传播越过分界线。

QFT 左侧的模块由哈达玛门和多目标 CNOT 门组成，

$$\begin{aligned}U_1 = &\Big(\,|0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1}^{\otimes(n-1)} + |1\rangle\langle 1| \otimes X^{\otimes(n-1)}\Big) \\ &\times \left(H \otimes \mathbb{1}^{\otimes(n-1)}\right),\end{aligned}$$

其已经呈现为（26）在量子比特 j之后的二分划分处，且

$$A_1 = \tfrac{1}{\sqrt{2^{j-1}}}\big(\,|0\rangle\langle 0|\,H\big) \otimes \mathbb{1}^{\otimes(j-1)},$$

$$A_2 = \frac{1}{\sqrt{2^{j-1}}}\big(\,|1\rangle\langle 1|\,H\big)\otimes X^{\otimes(j-1)},$$
$$B_1 = \frac{1}{\sqrt{2^{n-j}}}\,\mathbb{1}^{\otimes(n-j)},$$
$$B_2 = \frac{1}{\sqrt{2^{n-j}}}\,X^{\otimes(n-j)}.$$

由于 $|0\rangle\langle 0|\cdot|1\rangle\langle 1| = 0$和 $\mathrm{Tr}(X^{\otimes(n-j)}) = 0$，且两个系数相等，$\sigma_1 = \sigma_2 = 1/\sqrt{2}$，这两个族都是正交归一的。因此，左侧块在每个二分划分处都具有$\mathrm{rank}_S(U_1) = 2$。

在量子傅里叶变换右侧，$K/L/C$ 块 U_2 进一步收缩。由于 $K_l = \omega^{2^{l-1}}L_l$，其两个受控分支仅相差一个全局相位，因此受控结构消失，U_2 成为单个乘积算子。将对最后一个量子比特的作用收集到

$$\bar{C} := \big(\,|0\rangle\langle 0| + \overline{\omega}^{2^{n-1}-1}\,|1\rangle\langle 1|\,\big)C,$$

量子比特 j 之后的切分处，得到唯一的一对

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2^j}}\,L_1\otimes\cdots\otimes L_j,$$
$$B_1 = \frac{1}{\sqrt{2^{n-j}}}\,L_{j+1}\otimes\cdots\otimes L_{n-1}\otimes\bar{C},$$

其中 $\sigma_1 = 1$，因此 $\mathrm{rank}_S(U_2) = 1$。

这两个受控置换完全相同，

$$U_3 = U_5 = \mathbb{1}^{\otimes(n-1)}\otimes|0\rangle\langle 0| + \widetilde{P}_{n-1}^{-1}\otimes|1\rangle\langle 1|,$$

并插入 (29)，在量子比特 j 之后将它们分开，得到

$$\begin{aligned}
A_1 &= |1\rangle\langle 1|^{\otimes j}\,\widetilde{P}_j^{-1}, \quad & B_1 &= \widetilde{P}_{n-j-1}^{-1}\otimes|1\rangle\langle 1|,\\
A_2 &= |0\rangle\langle 0|^{\otimes j}\,\widetilde{P}_j^{-1}, \quad & B_2 &= \mathbb{1}^{\otimes(n-j-1)}\otimes|1\rangle\langle 1|,\\
A_3 &= \mathbb{1}^{\otimes j}, & B_3 &= \mathbb{1}^{\otimes(n-j-1)}\otimes|0\rangle\langle 0|.
\end{aligned}\tag{30}$$

这三项分别对应穿过切分处的进位、在切分处之前被吸收的进位，以及非受控分支。它们的左因子两两正交，且各项相互独立，因此 $\mathrm{rank}_S(U_3) = \mathrm{rank}_S(U_5) = 3$对于 $1 \le j \le n-2$，在 $j = n-1$处降至两项，并在此终止递归。相应的施密特系数并非全都相等，因此 (30) 可确定秩，无需按照 (26) 的意义进行归一化。

剩余部分 U_4 由一个多目标 CNOT 门、作用于最后一个量子比特的门 B 以及一个反向的多重控制门J组成。令 $D := (J-\mathbb{1})B$和 $P := |0\rangle\langle 0|^{\otimes(n-1)}$，多重控制结构可化简为 $\mathbb{1}^{\otimes(n-1)}\otimes B + P\otimes D$，再与前置 CNOT 门相乘，得到四项展开式

$$\begin{aligned}
U_4 = {}& \mathbb{1}^{\otimes(n-1)}\otimes B\,|0\rangle\langle 0| + P\otimes D\,|0\rangle\langle 0|\\
&+ X^{\otimes(n-1)}\otimes B\,|1\rangle\langle 1|\\
&+ P\,X^{\otimes(n-1)}\otimes D\,|1\rangle\langle 1|.
\end{aligned}$$

其四个左因子保持线性无关 $j \le n-2$，因此界限（27）得以达到，且 $\mathrm{rank}_S(U_4) = 4$，在 $j = n-1$时又降为二。无需给出 U_4 的显式施密特对，因为下文只涉及其秩，而组装后的右侧块的精确秩可直接得到。

A.2. QFT 右侧完整块的秩

将（28）应用于四组件子电路 $V := U_2U_3U_4U_5$ 只能得到较宽松的估计

$$\mathrm{rank}_S(V) \le 1\cdot 3\cdot 4\cdot 3 = 36,\tag{31}$$

这种做法忽略了各分量共享算子因子这一点：两个置换相同，均为 $S := \widetilde{P}_{n-1}^{-1}$，而投影算子$P$也出现在 U_4 中。因此，我们直接分解 V。

作为一个乘积算子，U_2 不会改变秩，因此省略。最后一个量子比特控制两个置换，并承载 B和 J，因此自然可以按其计算基展开。令 $b_{ab} := \langle a|\,B\,|b\rangle$和 $d_{ab} := \langle a|\,D\,|b\rangle$分别表示所得标量，可得 $V = \sum_{a,b} W_{ab}\otimes|a\rangle\langle b|$ 其中

$$W_{ab} = S^a\left(b_{ab}T_b + d_{ab}PT_b\right)S^b$$

其中，T_b 矩阵定义为 $T_0 = \mathbb{1}^{\otimes(n-1)}$ 和$T_1 = X^{\otimes(n-1)}$。指数 a和 b 记录了置换是否作用于出分支和入分支，因此每个 W_{ab} 都是先移位、再经过一个门、然后再次移位。

在量子比特 j 之后的切分处，作为张量积作用的因子会平凡地分解为 $\mathbb{1} = \mathbb{1}_A\otimes\mathbb{1}_R$、$P = P_A\otimes P_R$和$X^{\otimes(n-1)} = X_A\otimes X_R$。移位则不同：进位可能跨越切分；当最前面的 j 个量子比特全为 1 并变为全 0 时，恰好会发生这种情况。这给出了如下的二项分解：

$$S = S_A\otimes\mathbb{1}_R + E_A\otimes\bar{S}_R,$$

其中包含进位算子和余数

$$E_A := |1^j\rangle\langle 0^j|, \qquad \bar{S}_R := S_R - \mathbb{1}_R,$$

并记 $E_R := |1^{n-1-j}\rangle\langle 0^{n-1-j}|$为切分另一侧对应的算子。由于 E_A 将单个基态映射为单个基态，包含它的乘积会化简；下文需要的关系如下：

$$\begin{aligned}
X_AE_A &= P_A, \qquad & P_AX_AS_A &= P_A,\\
E_AX_AS_A &= E_A, \qquad & E_AP_A &= E_A,\\
S_AP_A &= E_A.
\end{aligned}$$

应用它们后，每个 W_{ab} 都从四个乘积项化简为两个，而保留下来的八项只涉及六个不同的左因子。将它们合并后，V具有如下形式(26)，其中

$$A_1 = \mathbb{1}_A, \qquad A_2 = P_A, \qquad A_3 = X_AS_A,$$
$$A_4 = S_A, \qquad A_5 = E_A, \qquad A_6 = S_AX_AS_A,$$

and

$$
\begin{aligned}
B_1 &= b_{00}\,\mathbb{1}_R \otimes |0\rangle\langle 0|\,,\\
B_2 &= \left(b_{01} X_R \bar{S}_R + d_{01} P_R X_R S_R\right) \otimes |0\rangle\langle 1|\\
&\quad + d_{00}\, P_R \otimes |0\rangle\langle 0|\,,\\
B_3 &= b_{01}\, X_R \otimes |0\rangle\langle 1|\,,\\
B_4 &= b_{10}\,\mathbb{1}_R \otimes |1\rangle\langle 0|\,,\\
B_5 &= \Big[b_{11}\left(X_R \bar{S}_R + \bar{S}_R X_R + \bar{S}_R X_R \bar{S}_R\right)\\
&\quad + d_{11}\, E_R X_R S_R\Big] \otimes |1\rangle\langle 1|\\
&\quad + \left(b_{10}\bar{S}_R + d_{10} E_R\right) \otimes |1\rangle\langle 0|\,,\\
B_6 &= b_{11}\, X_R \otimes |1\rangle\langle 1|\,.
\end{aligned}
\tag{32}
$$

根据(27，这已将(31)中的 36 项改进为 6项。接下来需要证明六项确实可以达到，也就是说，这些左因子线性无关。它们的格拉姆矩阵分解为两个相同的块，一个由 $\{\mathbb{1}_A, P_A, X_A S_A\}$ 张成，另一个由 $\{S_A, E_A, S_A X_A S_A\}$张成，每个块的形式如下

$$
G_{\text{block}} = \begin{pmatrix} 2^j & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2^j \end{pmatrix}, \quad \det\left(G_{\text{block}}\right) = 2^j\left(2^j - 2\right),
$$

因此 $\det G = [2^j(2^j-2)]^2$。对于 $j \geq 2$，行列式非零，且六个因子彼此独立；而 $j = 1$会使其为零，Gram矩阵的秩降至四。因此

$$
\operatorname{rank}_S(V) = \begin{cases} 4, & j = 1 \text{ or } j = n-1, \\ 6, & 2 \leq j \leq n-2, \end{cases}
\tag{33}
$$

因此，因子六是右侧块的精确性质，而非乘积界造成的假象。

A.3. 边界固定电路与表达能力界

对于 SFCT 和 SFST，最后一个量子比特的物理索引是固定的，因此（32）中只有一半的项有贡献。对于固定的输出指标 a_0，保留下来的左因子为$\{\mathbb{1}_A, P_A, X_A S_A\}$，当 $a_0 = 0$ 时，以及 $\{S_A, E_A, S_A X_A S_A\}$，当$a_0 = 1$ 时——恰好是上面的两个 Gram 块，且当 $j \geq 2$时二者的秩均为满秩。因此 $\operatorname{rank}_S(V_{\text{fixed}}) = 3$，当 $2 \leq j \leq n-2$时成立，在最外侧切分处则降为二。

结合 $\operatorname{rank}_S(U_1) = 2$，QFT 的秩 r_S 和（33）可得

$$
\hat{r} \leq 2\, r_S\, 6 = 12\, r_S
$$

对于具有开放边界索引的 QCST，以及

$$
\hat{r} \leq 2\, r_S\, 3 = 6\, r_S
$$

对于边界固定的 SFCT 和 SFST。这两个界均与离散化阶数 n 无关，这表明 SFCT 和 SFST 存在秩趋于饱和的高效 TT 表示。

仍有一点需要说明。由于右侧块与量子傅里叶变换组合时会产生更多线性相关性，组装后电路的秩可能低于乘积界。因此，方程（33）给出的是严格的电路级上界，而非声称整个电路能达到该界。

B. 输入函数

我们给出第 3.4 节和附录 C 中数值实验所用输入函数的明确定义。所有函数均定义在 $x \in [0, 1)$ 上，并通过以下方式在大小为 $N = 2^n$ 的均匀网格上离散化

$$
x_k = \frac{k}{N}, \quad k = 0, \ldots, N-1.
$$

平滑信号。

$$
f_{\text{smooth}}(x) = \cos(2\pi x) + \tfrac{1}{2}\cos(4\pi x).
$$

高频信号。

$$
f_{\text{high}}(x) = \cos(20\pi x).
$$

不连续信号。

$$
f_{\text{disc}}(x) = \begin{cases} 1, & x < 0.5, \\ 0, & x \geq 0.5. \end{cases}
$$

高斯信号。

$$
f_{\text{gauss}}(x) = \exp\left(-100(x-0.5)^2\right).
$$

噪声信号。 此外，我们还考虑了一个由高斯白噪声给出的随机输入：

$$
f_{\text{noise}}(x_k) \sim \mathcal{N}(0, 1),
$$

每个网格点上的样本相互独立。

这些测试案例既包括结构化确定性信号，也包括随机信号，使我们能够评估 SFCT 和 SFST 对不同输入正则性和噪声水平的鲁棒性。

C. DST-II 数值实验

图8 展示了第3.4 节中使用附录B所定义函数，对 DST-II 和 SFST 进行实验所得的结果。运行时间和内存趋势分别与 DCT-II 和 SFCT 的观测结果一致。此外，对于所有测试值 n，TT秩均保持一致，这与 SFCT 和 SFST 在每个二分划分下的精确算子施密特秩相等这一预期相符。

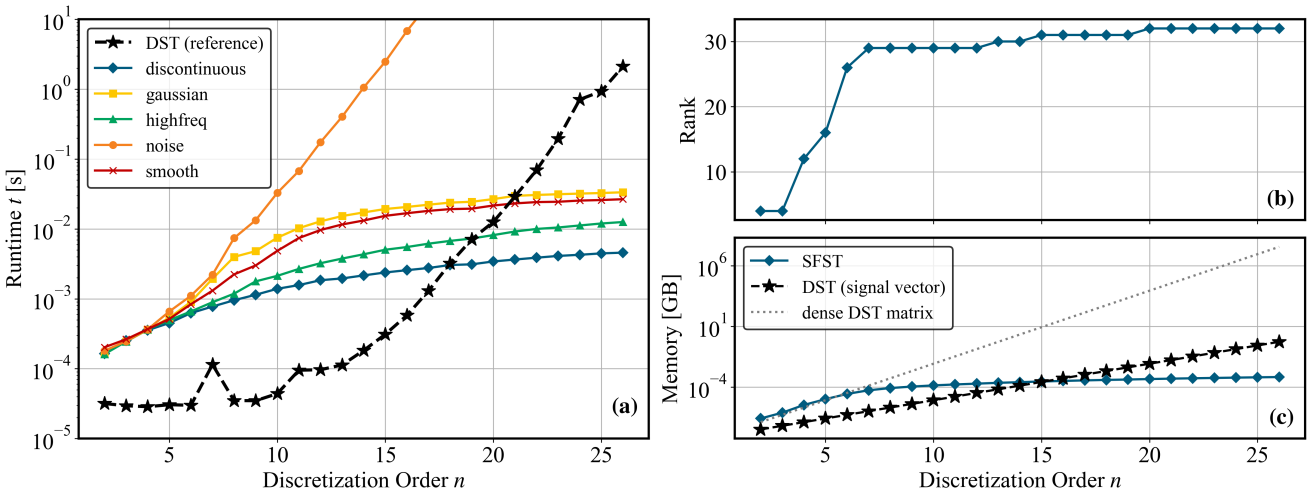


图 8： (a) 不同输入类别下，经典 DST 与 SFST 的运行时间随离散化阶数 n 的变化；(b) SFST 的 TTO 秩演化；(c) SFST 算子的内存占用，与经典基于 FFT 的 DST 所需信号向量（虚线）以及作为参考的稠密 DST 矩阵（点线）进行比较。

D. TT格式中的预条件线性求解

线性系统的条件数性质较差会减缓迭代方法，包括基于 TT 的求解器。在交替线性方案（ALS）中 [30], , 这会同时增加前向–后向扫描的次数，以及求解每个局部线性系统所需的工作量。

为消除常数零模，我们将与一个压力网格点 $D_h\nabla_h$ 对应的行和列替换为 $-I$的相应行和列，其中 I 是单位矩阵。我们将所得矩阵记为 A，并将该位置称为固定点。我们将压力 p 和右端项 b 表示为 TT，并将A 和预条件子 P 表示为张量列算子，即 TTOs，具体参见第 2 节。对于 Rayleigh–Bénard基准算例，我们在时间积分之前构造一次左预条件子 P，并在所有采用相同压力矩阵的运行中重复使用该预条件子 A。在每次压力求解中，交替最小二乘法（ALS）在 TT 格式中求解预条件系统 $PAp = Pb$ [46]。

离线构造。 我们通过以 TT 形式求解 $PA = I$ 来构造近似左逆 P。令 vec 表示按列向量化，令 $\otimes$表示克罗内克积。向量化系统为

$$(A^{\mathsf{T}} \otimes I)\,\mathrm{vec}(P) = \mathrm{vec}(I). \tag{34}$$

我们采用单点交替最小二乘法，并在每次扫描后进行残差扩充，方法受 AMEn [32], 启发，同时将算子秩限制为 r_{P}。

在线压力求解。 在位置 k，未知量是 $p_k = \mathrm{vec}(p^{[k]})$ 中的元素，该核在图9中单独显示。其余压力核心固定，并定义框架矩阵 F_k [32]，其中 $p = F_k p_k$。将此表示代入预条件系统，并使用 $F_k^{\dagger}$ 进行投影，可得单点交替最小二乘系统 [2, 30]

$$(F_k^{\dagger} P A F_k) p_k = F_k^{\dagger} P b. \tag{35}$$

图9展示了与 P 和 A 的缩并，并将其保留为独立的张量列算子。我们使用广义最小残量法迭代求解该局部线性系统。扫描结束后，将固定点处的压力设为零。

E. 瑞利–贝纳德对流的数值细节

图 4 和 5 中的所有谱方法计算均 $\varepsilon_{\mathrm{spec}} = 10^{-10}$。

在图 5中的计时比较中，四种配置均以 $r = 100$为步长，将同一压缩初始状态推进 12 步。预条件子秩为 $r_{\mathrm{P}} = 50$。预条件化 ALS 采用一次前向–后向扫描，局部广义最小残量法的绝对容差和相对容差均为 10^{-8}。VAR 最多进行五次前向–后向扫描，当目标函数或迭代量的相对变化低于 10^{-8}时停止。

RSI 使用中间秩上限 $r_{\mathrm{int}} = r + 30$。对于二进制 TT 核，局部高斯草图矩阵的大小为 $2 \times m_{\mathrm{sk}}$ [34]，其中 $m_{\mathrm{sk}} = \lfloor r_{\mathrm{int}}/2 \rfloor + 25$ 为草图宽度。RSI 从包含八个张量列车核的块开始，并对插值分解采用 10^{-15} 的相对容差。随后将乘积舍入至秩上限 r。

我们在 AMD EPYC 9654 处理器上使用 Julia 1.12.6，配置一个 Julia 线程和一个 BLAS线程，进行三次连续重复实验。每次重复实验中的方法顺序有所变化，而随机种子保持不变。每次调用时都会重置 RSI草图种子。对于每次重复实验，我们对第 3–10 步的每步时间取平均值。压力求解时间汇总两个阶段，并包括收敛测试、规范固定和实化。完整步时间还包括右端项构造和所有状态更新。两者均不包括设置、诊断报告或输出。我们报告相对于预条件 ALS 的三次重复实验内部加速比的中位数。

作为对图中计时测试所进行的压力求解的检查5，我们在计时区域之外计算了未固定的相对残差

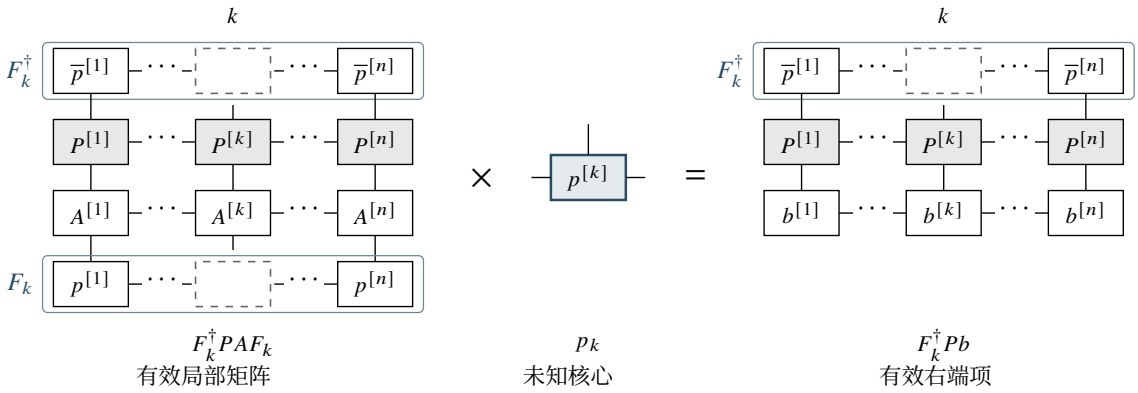


图 9： 公式 (35)中的有效局部线性系统，其中未知压力核心单独显示。上标 $[j]$ 表示 TT 或 TTO 核心，其中 $n = n_x + n_y$；上划线表示复共轭。虚线轮廓表示省略的核心，使有效矩阵保留三个输入腿和三个输出腿。所有其他压力核心均已固定。

压力方程，$\|b - D_h \nabla_h p\|_2 / \|b\|_2$。在步骤 3–10 的两个投影阶段中，预条件 ALS 的中位数为 1.04×10^{-3}，而三种谱配置的数值范围为 6.20×10^{-4} 至 6.53×10^{-4}。

F. 实核心张量列车表示的实值状态

实值状态可以具有复核心的 TT表示。在两种谱压力求解器中，逆傅里叶余弦变换得到的压力场为实值，但其张量列车核仍可能是复数。我们通过将内部键维度加倍，构造具有实核心的等价表示。对于复矩阵 M，定义

$$\mathscr{R}(M) = \begin{pmatrix} \operatorname{Re} M & -\operatorname{Im} M \\ \operatorname{Im} M & \operatorname{Re} M \end{pmatrix}. \tag{36}$$

对于维度相容的复矩阵 M_1 和 M_2，$\mathscr{R}(M_1 M_2) = \mathscr{R}(M_1)\mathscr{R}(M_2)$，因此该映射保持矩阵乘积不变。

将复数 TT 表示为式（1），

$$T(i_1, \dots, i_n) = A_1(i_1) A_2(i_2) \cdots A_n(i_n),$$

其开放边界秩为 $r_0 = r_n = 1$。我们将 $\mathscr{R}$ 应用于每个矩阵切片，并在两个边界处选取实部。令 $e_0 = (1, 0)^\top$，则实核心为

$$\begin{aligned} B_1(i_1) &= e_0^\top \mathscr{R}\big(A_1(i_1)\big), \\ B_k(i_k) &= \mathscr{R}\big(A_k(i_k)\big), \qquad k = 2, \dots, n-1, \\ B_n(i_n) &= \mathscr{R}\big(A_n(i_n)\big)\, e_0. \end{aligned}$$

实化张量列车的缩并结果为

$$\begin{aligned} T_{\mathbb{R}}(i_1, \dots, i_n) &= B_1(i_1) B_2(i_2) \cdots B_n(i_n) \\ &= e_0^\top \mathscr{R}\big(A_1(i_1) A_2(i_2) \cdots A_n(i_n)\big)\, e_0 \\ &= \operatorname{Re} T(i_1, \dots, i_n). \end{aligned} \tag{37}$$

对于实值张量，该构造在舍入误差范围内保留了所表示的值。重新压缩前，内部键维度为 $\tilde{r}_k = 2 r_k$，对应 $k = 1, \dots, n-1$，其中 $\tilde{r}_0 = \tilde{r}_n = 1$。在压力求解器中，实化张量列车被舍入至秩上限 r。

G. 均匀化验证

均匀化过程的评价指标是通过基于傅里叶的算法获得的宏观刚度张量。我们通过两种互补的比较来评估基于 TT 的均匀化方法的准确性，如图10所示。

首先，我们比较采用图6所示镜像域表示、分别通过基于 TT 的均匀化和传统的基于快速傅里叶变换的均匀化获得的刚度张量。相应的相对验证误差定义为

$$\sigma_{\mathrm{val}}^{(\mathrm{F})} = \frac{\|\mathbf{C}_{\mathrm{TT}} - \mathbf{C}_{\mathrm{FFT}}\|_{\mathrm{F}}}{\|\mathbf{C}_{\mathrm{FFT}}\|_{\mathrm{F}}}.$$

该比较旨在验证张量列车实现与成熟的基于快速傅里叶变换的方法在传统快速傅里叶变换方法仍具备计算可行性的离散化阶数范围内的一致性。

对于最低的两个离散化阶数，$n = 2$和$n = 3$，相对误差低于 10^{-13}，表明结果几乎完全一致。对于更高的阶数，误差略微增大至 10^{-5} 以上。这种行为与均匀化算法中预设截断容差$\delta_{\mathrm{tol}} = 10^{-4}$ 所控制的精度一致。因此，观察到的差异处于基于张量列车的过程预期精度范围内，并且通过减小 δ_{tol}还可以进一步降低。

其次，我们通过比较使用镜像域方法和直接周期性微观边界条件（PMUBC）获得的均匀化刚度张量，研究域表示方式的影响；两种计算均采用基于 TT 的

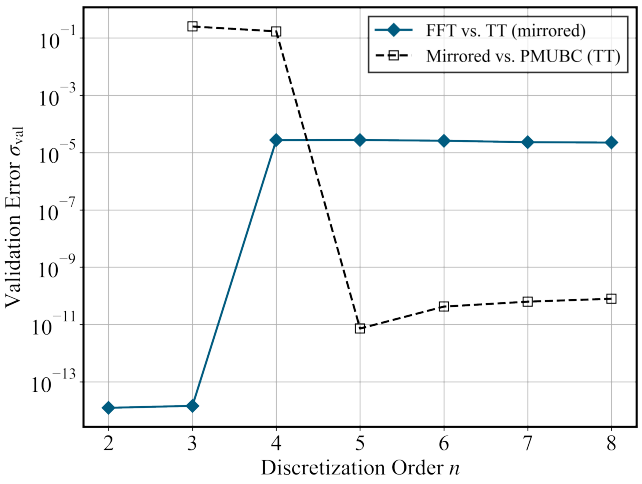


图10： 通过比较采用镜像域方法（蓝色实线）的基于 TT 和基于 FFT 的均匀化结果，以及采用基于 TT 的均匀化时镜像域方法与直接 PMUBC 的结果（黑色虚线），验证谱-TT均匀化方法。图中显示均匀化刚度张量的相对误差随离散化阶数 n 的变化，其中每个维度有 2^n 个网格点。

均匀化算法。相应的相对差异定义为

$$\sigma_{\text{val}}^{(\text{P})} = \frac{\|\mathbf{C}_{\text{mirrored}} - \mathbf{C}_{\text{PMUBC}}\|_{\text{F}}}{\|\mathbf{C}_{\text{PMUBC}}\|_{\text{F}}}.$$

对于 $n = 3$和 $n = 4$，相对差异起初约为 10^{-1}。然而，随着离散化阶数增加，该差异迅速降至约 10^{-11}，随后保持在约 10^{-10}的水平。这表明，对于足够精细的离散化，两种域表示所得的均匀化刚度张量几乎完全相同。

H. 对称性与谱方法

本文采用 Hex8R离散 [62]，即在规则体素网格上使用缩减积分的三线性六面体单元。位移位于体素角点处，而所有应变和应力分量均在体素中心的单个积分点处计算，见表1。基于 FFT 的方案仅变换应变类量。因此，对于这些量，镜像域的每种反射对称性均为半采样对称，其满足$f_j = \pm f_{N-1-j}$，所需变换仅为偶对称时的 DCT-II 和奇对称时的 DST-II。表2 列出了六种单位载荷工况下，各应变分量相对于三个坐标方向的对称性。每个字母表示沿相应方向采用的变换：E 表示 DCT-II，O 表示 DST-II。例如，在沿 x方向施加拉伸载荷时，具有 OOE 模式的剪切应变ε_{12} 在 x 和 y方向采用 DST-II 变换，在 z方向采用 DCT-II 变换。

表 1 Hex8R离散中位移和应变分量的位置 [62]。

变量	位置
u_1, u_2, u_3	$(ih_1, jh_2\ kh_3)$
$\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}$	$\left(\left(i+\frac{1}{2}\right)h_1, \left(j+\frac{1}{2}\right)h_2, \left(k+\frac{1}{2}\right)h_3\right)$
$\varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}$	$\left(\left(i+\frac{1}{2}\right)h_1, \left(j+\frac{1}{2}\right)h_2, \left(k+\frac{1}{2}\right)h_3\right)$

表2不同加载情况下载荷的应变分量的对称性。E/O 表示相对于 (x, y, z) [21] 的偶/奇对称性。

Load	ε_{11}	ε_{22}	ε_{33}	ε_{23}	ε_{13}	ε_{12}
11	EEE	EEE	EEE	EOO	OEO	OOE
22	EEE	EEE	EEE	EOO	OEO	OOE
33	EEE	EEE	EEE	EOO	OEO	OOE
23	EOO	EOO	EOO	EEE	OOE	OEO
13	OEO	OEO	OEO	OOE	EEE	EOO
12	OOE	OOE	OOE	OEO	EOO	EEE

参考文献

[1] I. V. Oseledets，张量列分解，《SIAM科学计算杂志》33（2011）2295–2317。[2] U. Schollwöck，矩阵乘积态时代的密度矩阵重整化群，《物理学年鉴》326（2011）96–192。[3] N. Gourianov，M. Lubasch，S. Dolgov，Q. Y. van den Berg，H. Babaee，P. Givi，M. Kiffner，D. Jaksch，利用湍流结构的量子启发方法，《自然·计算科学》2（2022）30–37。[4] M. Kiffner，D. Jaksch，壁面约束流动的张量网络降阶模型，《物理评论·流体》8（2023）124101。[5] E. Ye，N. F. G. Loureiro，求解Vlasov–Poisson方程的量子启发方法，《物理评论E》106（2022）035208。[6] R. J. J. Connor，C. W. Duncan，A. J. Daley，细网格上Gross–Pitaevskii方程的张量网络方法，New Journal of Physics 28（2026）023203。[7] F. Gómez-Lozada，N. Perico-García，N. Gourianov，H. Salman，J. J. Mendoza-Arenas，利用矩阵乘积态模拟量子湍流，《物理评论应用》（2026）。[8] M. Ali，A. Cortines，S. Morales，S. Mugel，M. Olave，R. Orús，S. Palmer，H. Usabiaga，用于模拟材料变形的量子启发求解器，2025。doi：10.48550/arXiv.2501.12151。arXiv:2501.12151。[9] L. Risthaus，M. Schneider，张量列格式中的相场断裂问题求解，《应用数学与力学论文集》22（2023）e202200098。[10] J. Vondřejc，D. Liu，M. Ladecký，H. G. Matthies，通过低秩张量近似加速的基于FFT的均质化，Com- put. Methods Appl. Mech. Eng. 364（2020）112890。[11] S. H. Hauck，M. Kabel，M. Ali，N. R. Gauger，基于SFFT的均质化：利用张量列增强基于FFT的均质化，《力学学报》42（2026）724928。[12] S. H. Hauck，M. Kabel，N. R. Gauger，在张量处理器、图形处理器和中央处理器架构上对用于量子启发均质化的张量列进行性能基准测试，《未来一代计算机系统》186（2027）108709。[13] L. Risthaus，M. Schneider，采用基于FFT和张量列的格林算子方法为热计算均质化问题施加不同边界条件，《国际数值方法与工程杂志》125（2024）e7423。[14] M. G. Cecile，N.-L. van Hülst，T. Hashizume，P. Siegl，A. Setty等，计算流体动力学的量子算法，2026。ArXiv:2609.39962。

[15] P. Siegl，G. S. Reese，T. Hashizume，N.-L. van Hülst，D. Jaksch，用于求解微分方程的张量可编程量子电路，《Physical Review Research》8（2026）013052。[16] P. Siegl，N.-L. van Hülst，M. Mandelt Buxadé，T. Hashizume，D. Jaksch，利用混合张量网络高效处理量子计算流体动力学中的非线性，2026。ArXiv:2608.24150。[17] S. Dolgov，B. Khoromskij，D. Savostyanov，使用QTT近似的超快速傅里叶变换，J. Fourier Anal. Appl. 18（2012）915–953。[18] J. Chen，E. M. Stoudenmire，S. R. White，量子傅里叶变换具有小纠缠，PRX Quantum 4（2023）040318。[19] G. Strang，离散余弦变换，SIAM Review 41（1999）135–147。[20] J. L. Guermond，P. Minev，J. Shen，不可压缩流投影方法概述，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 195（2006）6011–6045。[21] H. Grimm-Strele，M. Kabel，具有混合均匀边界条件的基于FFT的均质化，Int. J. Numer. Methods Eng. 122（2021）7241–7265。[22] A. Javili，S. Saeb，P. Steinmann，通过半Dirichlet边界条件在计算均质化中实现恒定牵引边界条件的若干方面，Computational Mechanics 59（2017）21–35。[23] C. Marcati，M. Rakhuba，J. E. M. Ulander，一维奇异摄动边值问题的低秩张量近似，Calcolo 59（2022）2。[24] E. Kornev，S. Dolgov，M. Perelshtein，A. Melnikov，TetraFEM：使用张量列有限元方法求解偏微分方程的数值方法，Mathematics 12（2024）3277。[25] V. A. Kazeev，B. N. Khoromskij，拉普拉斯算子及其逆算子的低秩显式QTT表示，《SIAM矩阵分析与应用杂志》33（2012）742–758。[26] A. Klappenecker，M. Rötteler，量子计算机上的离散余弦变换，载于：ISPA 2001。第二届图像与信号处理及分析国际研讨会论文集，与第23届信息技术接口国际会议联合举办（IEEE目录号01EX480），2001，第464–468页。doi: 10.1109/ISPA.2001.938674。[27] W. Hackbusch，S. Kühn，张量表示的新方案，J. Fourier Anal. Appl. 15（2009）706–722。[28] W. Hackbusch，层次矩阵：算法与分析，Springer，2015。[29] M. Fannes，B. Nachtergaele，R. F. Werner，量子自旋链上的有限关联态，Commun. Math. Phys. 144（1992）443–490。[30] S. Holtz，T. Rohwedder，R. Schneider，张量列格式中张量优化的交替线性方案，《SIAM科学计算杂志》34（2012）A683–A713。[31] A. A. Michailidis，C. Fenton，M. Kiffner，张量列的逐元素乘法，《SIAM科学计算杂志》47（2025）B1158–B1174。[32] S. V. Dolgov，D. V. Savostyanov，高维线性系统的交替最小能量方法，《SIAM科学计算杂志》36（2014）A2248–A2271。[33] M. K. Ritter，采用交替交叉插值的张量列快速逐元素运算，2026。doi: 10.48550/arXiv.2604.00037。arXiv:2604.00037。[34] Z. Meng，Y. Khoo，J. Li，E. M. Stoudenmire，递归草图插值：张量列的高效Hadamard乘积，arXiv预印本arXiv:2602.17974（2026）。[35] M. V. Wickerhauser，自适应小波分析：从理论到软件，A.K. Peters，Wellesley，MA，1994。[36] F. de Prenter，C. V. Verhoosel，E. H. van Brummelen，M. G. Larson，S. Badia，浸入式有限元方法的稳定性与条件数性质：分析与改进，《计算方法工程档案》30（2023）3617–3656。[37] M. A. Nielsen，I. L. Chuang，量子计算与量子信息，十周年纪念版，剑桥大学出版社，2010。

[38] C. Zheng、X. Yu、K. Wang，任意量子过程的跨平台比较，npj Quantum Information 10 (2024) 4。[39] D. Coppersmith，《一种用于量子因数分解的近似傅里叶变换》，技术报告 RC19642，IBM Research Division，Yorktown Heights，纽约州，1994。[40] M. Püschel、M. Rötteler、T. Beth，非阿贝尔群中的一类快速量子傅里叶变换，载于：Applied Algebra, Algebraic Algorithms and Error-Correcting Codes (AAECC-13)，第 1719 卷计算机科学讲义，Springer，1999 年，第 148–159 页。[41] E. M. Stoudenmire、S. R. White，最小纠缠典型热态算法，New Journal of Physics 12 (2010) 055026。[42] J. Makhoul，一种适用于一维和二维的快速余弦变换，IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing 28 (1980) 27–34。[43] L. Hölscher、P. Rao、L. Müller、J. Klepsch、A. Luckow、T. Stollen- werk、F. K. Wilhelm，借助 GPU 加速的二维湍流量子启发流体模拟，Physical Review Research 7 (2025) 013112。[44] S. Pisoni、R. D. Peddinti、S. E. Guzman、E. Tiunov、L. Aolita，利用张量列压缩、模拟和合成湍流，Physical Review Research 8 (2026) 023245。[45] R. D. Peddinti、S. Pisoni、A. Marini、P. Lott、H. Argentieri、E. Tiunov、L. Aolita，计算流体动力学的量子启发框架，Communications Physics 7 (2024) 135。[46] N.-L. van Hülst、P. Siegl、P. Over、S. Bengoechea、T. Hashizume、M. G. Cecile、T. Rung、D. Jaksch，曲线坐标系中不可压缩流的量子启发张量网络分步法，Computer Physics Communications 325 (2026) 110169。[47] N.-L. van Hülst、M. G. Cecile、H.-Y. Van、T. Hashizume、E. de Villiers、D. Jaksch，二维湍流瑞利–贝纳德对流的量子启发模拟，2026。arXiv:2604.16179。[48] G. Ahlers、S. Grossmann、D. Lohse，湍流瑞利–贝纳德对流中的传热与大尺度动力学，Reviews of Modern Physics 81 (2009) 503–537。[49] A. J. Chorin、J. E. Marsden，《流体力学数学导论》，Springer-Verlag，纽约，1979。[50] I. Oseledets、E. Tyrtyshnikov，多维数组的 TT-cross 近似，Linear Algebra Appl. 432 (2010) 70–88。[51] H. Moulinec、P. Suquet，一种计算具有复杂微结构的非线性复合材料整体响应的数值方法，《计算方法与应用力学和工程》157 (1998) 69–94。[52] M. Schneider，基于非线性 FFT 的计算均质化方法综述，Acta Mechanica 232 (2021) 2051–2100。[53] D. Cioranescu、P. Donato，《均质化导论》，Oxford University Press，1999。[54] S. Brisard、L. Dormieux，复合材料力学的基于 FFT 的方法：一般变分框架，《计算材料科学》49 (2010) 663–671。[55] F. Willot，利用精确局部场计算复合材料力学响应的基于傅里叶的方案，C. R. Mécanique 343 (2015) 232–245。[56] R. Hill，复合材料的自洽力学，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 13 (1965) 213–222。[57] A. Wiegmann，矩形平行六面体上的快速泊松、快速亥姆霍兹及快速线性弹性求解器，技术报告 LBNL-43565，劳伦斯伯克利国家实验室，伯克利，加利福尼亚州，1999。[58] L. Gélébart，一种用于采用狄利克雷边界条件的非均质材料力学模拟的改进型基于 FFT 的求解器，Comptes Rendus Mécanique 348 (2020) 693–704。[59] D. H. Pahr、P. K. Zysset，边界条件对松质骨计算表观弹性性质的影响，Biomechanics and Modeling in Mechanobiology 7 (2008) 463–476。[60] L. Risthaus、M. Schneider，直接施加狄利克雷边界条件的基于 FFT 的计算微观力学，Computational Mechanics 74 (2024) 1089–1113。[61] P. N. Swarztrauber，对称 FFT，Mathematics of Computation 47 (1986) 323–346。

[62] M. Schneider、D. Merkert、M. Kabel，基于 FFT 的均质化：针对线性六面体单元离散化的微结构，Int. J. Numer. Methods Eng. 109 (2017) 1461–1489。[63] E. Febrianto、Y. Wang、B. Liu、M. Ortiz、F. Cirak，一种用于非周期边值问题的量子谱方法，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 457 (2026) 118934。