arXiv:2303.03450v1 [physics.plasm-ph] 6 Mar 2023

一种用于带碰撞的线性Vlasov方程的量子算法

Abtin Ameri*Plasma Science and Fusion Center, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139**

Paola Cappellaro
Research Laboratory of Electronics and Department of Nuclear Science and Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139

Hari Krovi*Riverlane Research, Cambridge, MA 02142*

NunoF. Loureiro*Plasma Science and Fusion Center, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139*

Erika Ye
Plasma Science and Fusion Center, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 021（日 *39* 期：2023年3月8日）

Vlasov方程是一种非线性偏微分方程，从第一性原理描述等离子体的动力学。其线性极限常用于等离子体物理，以研究等离子体振荡和稳定性。在这项工作中，我们提出了一种量子算法，用于模拟一维静电极限下有碰撞和无碰撞的线性化Vlasov方程。我们没有在该方程原生的位置与速度相空间中求解，而是采用傅里叶-厄米展开所得到的对偶空间中的高效表示。傅里叶-厄米表示的紧凑程度呈指数级提升，因此由此得到的经典算法能够达到此前针对这一问题提出的量子算法的性能。这种表示将问题转化为一组线性常微分方程，可使用成熟的量子算法求解：无碰撞情形下采用哈密顿量模拟，碰撞情形下采用量子常微分方程求解器。特别地，我们证明了系统规模上可以实现二次加速。

I. 引言

由于非线性等离子体现象通常具有广泛的时间尺度和长度尺度，使用现有计算机模拟等离子体动力学十分困难。事实上，直接数值模拟若要涵盖接近大多数真实系统所具有的尺度范围，便超出了现有超级计算机以及预计在不久的将来出现的计算机的能力。因此，自然需要寻求能够显著加速计算的替代计算平台。量子计算机是一种可能的候选方案，因为已有量子算法能够在一系列问题上胜过经典算法，例如通过量子游走进行搜索[1]，量子力学系统的模拟（也称为哈密顿量模拟）[2–8]，密码学 [9]，以及高能物理问题的模拟，例如 $1+1$ 维ϕ^4 理论 [10]，费米子场论 [11]，和共形场论[12]。此外，工业界和研究机构在量子计算机商业化方面的努力已显著推动相关技术发展，使我们离实现具有实际应用价值的量子算法更近了一步。

虽然已有用于模拟哈密顿量和求解常微分方程（ODE）的量子算法，但事先尚不清楚这些算法能否用于解决特定的等离子体物理问题；这类问题通常以耦合的非线性偏微分方程组来表述。事实上，针对非线性微分方程，尤其是等离子体物理问题设计量子算法这一领域，仍处于起步阶段。迄今为止，人们已对量子线性系统算法（QLSAs）进行了深入研究[13, 14]，线性常微分方程 [15–18]，某些情形下的非线性常微分方程 [19–23]，以及某些线性偏微分方程 [24, 25]。这些算法将哈密顿量模拟作为主要子程序。将此类算法用于等离子体动力学等现实问题并非易事，在某些情况下，原本承诺的加速效果也会消失。尽管如此，过去几年这一领域仍取得了一些进展。Dodin和Startsev[26] 调查了可用于在量子计算机上求解等离子体动力学的各种方法。其中，他们讨论了使用Madelung变换将冷电子流体的控制方程映射到薛定谔方程的可能性。Zylberman等人使用Madelung变换等人。 [27] 开发了一种用于模拟流体的混合算法。人们也研究了线性嵌入方法，并发现当非线性较弱

* aameri@mit.edu

时 [21, 28] ，或者当所得系统是稀疏的[29, 30]。其他研究则着重于为等离子体中的波问题开发量子算法，具体包括三波相互作用 [31] 以及冷等离子体中的异常波（其电场垂直于背景磁场的电磁波）[32]。正如预期的那样，这两类波问题都可以映射为薛定谔型方程¨，并可使用哈密顿量模拟算法求解。此外，人们还开发了一种更通用的量子晶格表示，用于描述等离子体中的一维波传播 [33] （但这种算法每个节点需要四个量子比特）。

理想情况下，我们希望有一种量子算法，能够求解由Vlasov方程给出的等离子体物理第一性原理描述。朝这一方向迈出的第一步，是弄清楚能否在量子计算机上高效模拟Vlasov方程的线性极限。Engel、Smith和Parker（以下简称ESP）研究了这一问题，并开发了一种量子算法，用于模拟朗缪尔波的朗道阻尼 [34], ——这是等离子体物理中的典型现象，静电波与电子发生共振，将能量传递给电子，因而受到阻尼[35]。ESP通过对耦合安培¨定律的无碰撞Vlasov方程进行线性化，将问题映射为哈密顿量模拟，进而可用近期提出的算法求解[34]。ESP采用包含 N_v 个点的空间网格，提出了一种量子算法来模拟线性化的Vlasov演化，其门复杂度为 $\mathcal{O}$(polylog$N_v$log$(1/\epsilon)$)，其中 ϵ 表示解态范数中的误差。要提取朗道阻尼率，必须通过对最终态进行采样，获得不同时刻的电场（从而得到时间历程，再通过后处理计算朗道阻尼率）。算法需要重复运行的次数与 N_v无关，仅取决于计算电场所需的绝对精度 δ，因此总运行时间为 $\mathcal{O}((1/\delta)$polylog$N_v)$，其中 $\delta \sim \epsilon$。

本文采用一种不同的数学方法重新研究这一问题。我们发现，使用与泊松方程耦合的线性化Vlasov方程，并在速度空间中用 $M+1$ 厄米多项式展开分布函数（其对应的系统规模为 $N = M+1$），可以得到一个系统矩阵；在相同精度下，该矩阵的规模比 ESP 的系统矩阵小得多，呈指数级差异 ϵ。因此，求解该系统的经典算法可以与 ESP 的量子算法同样高效。此外，傅里叶-厄米表示可以在不改变系统矩阵结构的情况下纳入碰撞。我们还发现，采用这一框架的量子算法相较于经典常微分方程求解器可实现二次加速；经典常微分方程求解器是求解这一问题最快的经典算法 [36]。

本文结构如下。章节 II 简要介绍Vlasov方程、朗道阻尼和Hermite表示的背景，并严格地定义我们旨在解决的问题及其关键参数。章节III 讨论基于Hermite形式的量子算法在无碰撞和有碰撞情形下的性能，并展示二次加速是可能的。章节 IV 回顾ESP公式，并对该系统与我们的系统进行比较误差分析。最后，章节 V 总结我们的结果并讨论其影响。

II. 背景

A. Vlasov方程

有碰撞的Vlasov-Poisson系统表示为

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla f_s + \frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}\cdot\nabla_v f_s = C[f_s], \tag{1}$$

$$\epsilon_0 \nabla\cdot\mathbf{E} = \rho, \tag{2}$$

其中， ϵ_0 为真空介电常数， s 表示一种带电粒子（离子或电子），其电荷为 q_s 、质量为 m_s；ρ 表示电荷密度。碰撞算子记为 $C[\cdot]$ ，E为电场。我们将研究范围限制在静电极限，因此 $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$，其中 φ 为静电势。

Vlasov-Poisson系统描述了三维物理空间和三维速度空间中各组分分布函数 f_s(x, v t)随时间的演化。分布函数的定义是：在位置x和速度v附近，每单位体积内的粒子数为 f_s(x, v t)d^3xd^3v。其归一化条件为

$$\int f_s(\mathbf{x},\mathbf{v},t)d^3\mathbf{v} = n_s(\mathbf{x},t), \tag{3}$$

其中 n_s 为该组分的数密度。因此，电荷密度可由分布函数表示为

$$\rho = \sum_{s=i,e} q_s \int f_s d^3\mathbf{v}. \tag{4}$$

为简单起见，本文将仅考虑一个空间维度和一个速度维度z 和 v，分别如此；这与兰道阻尼问题的教科书表述一致 [37]。此时，方程（1、2）变为

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + v\frac{\partial f_s}{\partial z} + \frac{q_s}{m_s}E\frac{\partial f_s}{\partial v} = C[f_s], \tag{5}$$

$$\epsilon_0\frac{\partial E}{\partial z} = \sum_{s=i,e} q_s \int f_s dv. \tag{6}$$

我们可以围绕麦克斯韦背景对方程（5-6）进行线性化，并考虑离子处于静止状态的情况，即它们的分布函数不受扰动，因此我们只需考虑电子分布函数的演化。然后，$f \approx F_0 + g$，其中我们

为简洁起见省略了物种下标，$g \ll F_0$是分布函数的扰动，而 F_0 是（一维）麦克斯韦分布函数：

$$F_0(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{n_0}{v_{th}} e^{-v^2/v_{th}^2}, \tag{7}$$

其中，n_0 是背景密度，且

$$v_{th} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \tag{8}$$

是电子热速度，其中 T 和 k_B 分别表示温度和玻尔兹曼常数。我们通过注意到 $C[F_0]$ =0、忽略二次扰动项，并采用以下归一化来进行线性化

$$\begin{aligned} z &\leftarrow \frac{z}{\sqrt{2}\lambda_D}, \\ t &\leftarrow \omega_p t, \\ v &\leftarrow \frac{v}{v_{th}}, \\ f &\leftarrow \frac{v_{th}}{n} f, \\ \varphi &\leftarrow \frac{e}{k_B T}\varphi, \end{aligned} \tag{9}$$

其中，e 是基本电荷，且

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_0 e^2}{\epsilon_0 m}}, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{n_0 e^2}}, \tag{10}$$

分别是等离子体频率和德拜长度。因此，线性化 Vlasov-Poisson 系统变为

$$\frac{\partial g_k}{\partial t} + ikvg_k + ikvF_0\varphi_k = C[g_k], \tag{11}$$

$$\varphi_k = \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} g_k dv, \tag{12}$$

这里我们还对两个方程都进行了傅里叶变换，其中 k 表示傅里叶波数，而 α =$2/k^2$ 是物理参数。通过选择不同的 α，使其满足 $\alpha \geq -1$，可以描述不同的目标问题；方程（11-12）考察单一物种的演化，而 α 则规定了另一物种的行为（玻尔兹曼、等温或无响应）[38, 39]。

在静电情形下，Vlasov方程通常与泊松方程耦合，但也可以与安培定律耦合：

$$\frac{\partial E_k}{\partial t} = -J_k, \tag{13}$$

其中，J_k 是电流的第 k个傅里叶模态。对于朗缪尔波，线性化的安培定律为，

与傅里叶空间中的Vlasov方程耦合后，可得到以下方程组：

$$\frac{\partial g_k}{\partial t} + ikvg_k - vF_0E_k = C[g_k], \tag{14}$$

$$\frac{\partial E_k}{\partial t} = \int vg_k \, dv. \tag{15}$$

虽然方程（11-12）和（14-15）是两种不同的表述，但描述的是相同的物理过程。

B. 朗道阻尼

朗道阻尼是一种教科书中常见的等离子体现象，在该现象中，波能量会共振地传递给等离子体粒子。尽管其名称可能让人产生这种印象，朗道阻尼是一个可逆过程：在没有碰撞的情况下，等离子体的总能量在整个过程中守恒。在朗道阻尼过程中，等离子体分布函数在速度空间中不断形成越来越精细的结构。在无碰撞等离子体中，这些结构会持续发展，直至线性阶段结束。在有碰撞等离子体中，这类结构最终会被碰撞抹平。当我们在第IV章节中进行误差分析时，这一点将变得很重要。

要计算等离子体波的朗道阻尼率，通常会追踪等离子体中电势（或等价地，电场）振幅随时间的演化。振幅可以用一个$e^{-\gamma t}$ 包络拟合，其中 $\gamma > 0$ 是朗道阻尼率。等离子体中的密度扰动也可用于计算朗道阻尼率，因为根据方程（12），电势与密度扰动成正比。图（1）展示了这一过程，其中追踪了电势范数 $|\varphi|$ 随时间的演化。峰值用一个 $e^{-\gamma t}$ 包络拟合，并由拟合结果得到正确的朗道阻尼率。

C. Hermite表示

处理线性 Vlasov-Poisson 系统时，通常将分布函数表示为 Hermite 多项式级数[38, 40–46]，这样既方便，在数值计算上也有优势：

$$g_k(v,t) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(v)F_0(v)}{\sqrt{2^m m!}} g_{m,k}(t), \tag{16}$$

其中，$H_m(v)$ 表示 m 阶厄米多项式，而 $g_{m,\,k}(t)$ 是其系数，定义为

$$g_{m,k}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{H_m(v)}{\sqrt{2^m m!}} g_k(v,t). \tag{17}$$

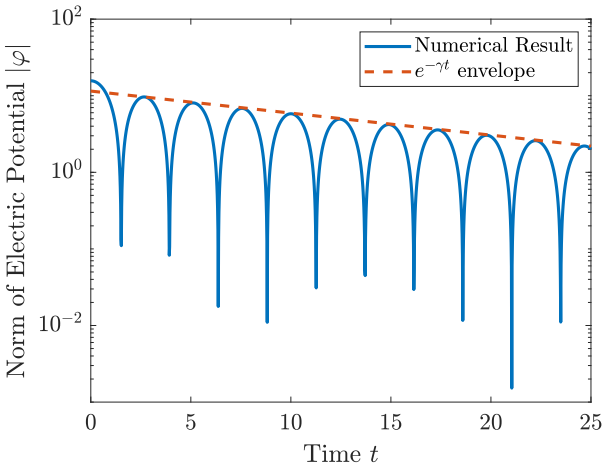

图 1. 电势范数 $|\varphi|$ 随时间的函数 t。蓝色实线通过数值求解方程（11-12）并取 $k = 0.56569$和 $\alpha = 2/k^2$得到。红色虚线为 $e^{-\gamma t}$ 包络线，其中 $\gamma = 0.066237$。

为简化起见，采用 Lenard–Bernstein 型碰撞算子 [47],

$$C[g_k] = \nu \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial v} + v\right) g_k, \tag{18}$$

其中，$\nu \geq 0$ 为碰撞频率；引入如下定义的新变量

$$\tilde{g}_{0,k} = g_{0,k}, \tag{19}$$

$$\tilde{g}_{m,k} = \frac{1}{\sqrt{1+\alpha}} g_{m,k},\ m \geq 1, \tag{20}$$

厄米变换后的方程变为关于厄米-傅里叶系数的一组耦合线性平流方程，如下所示：

$$\frac{dg_{0,k}}{dt} + ik\sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} g_{1,k} = 0, \tag{21}$$

$$\frac{dg_{1,k}}{dt} + ik\left(g_{2,k} + \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} g_{0,k}\right) = 0, \tag{22}$$

$$\frac{dg_{m,k}}{dt} + ik\left(\sqrt{\frac{m+1}{2}} g_{m+1,k} + \sqrt{\frac{m}{2}} g_{m-1,k}\right) = -\nu m g_{m,k},\ m \geq 2, \tag{23}$$

为简化记号，省略了波浪号。只要保留无限多个 Hermite 矩，形式上这些方程就等价于方程（11-12）。然而，出于实际考虑，只需保留有限个矩，即 $M+1$。由于阶数为 m 的 Hermite 矩方程与下一个矩 $m+1$耦合，因此需要进行截断，才能在计算机上对这些方程进行积分。我们采用常用闭合 $g_{M+1} = 0$，得到以下系统

$$\frac{d\mathbf{g}_k}{dt} = A\mathbf{g}_k, \tag{24}$$

其解为

$$\mathbf{g}_k(t) = e^{At}\mathbf{g}_k(t=0), \tag{25}$$

其中 $\mathbf{g}_k = [g_{0,k} \cdots g_{M,k}]^T$，$\mathbf{g}_k(t=0)$ 为初始条件，A 为一个包含相关系数的三稀疏矩阵，

$$A = -iH + \nu\,\mathrm{diag}([0, 0, 2, \ldots, M-1, M]), \tag{26}$$

with

$$H = k\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} & & & & \\ \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}} & 0 & 1 & & & \\ & 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \sqrt{\frac{M-1}{2}} & 0 & \sqrt{\frac{M}{2}} \\ & & & & \sqrt{\frac{M}{2}} & 0 \end{bmatrix}. \tag{27}$$

典范朗道阻尼问题的初始条件为 $g_0(z, v, t=0) = \bar{g}_0 \cos(k_0 z)$，其中 $\bar{g}_0$ 为常数（任意振幅）。在傅里叶–厄米空间中，该初始条件为

$$g_{m,k}(t=0) = \delta_{m,0}(\delta_{k,k_0} + \delta_{k,-k_0}), \tag{28}$$

其中我们选择了 $\bar{g}_0 = \sqrt{2/\pi}$。

虽然 M 原则上是一个自由参数，但通常希望满足 $M \gtrsim \omega/\nu$ 以便捕捉物理现象，其中 ω 是系统的特征频率，以确保碰撞能够恰当地耗散较高阶厄米矩。若 $\nu = 0$，M 将是模拟时间 T的函数。这与第IV章节的讨论相关。

III. 量子算法

本章节将证明，求解方程（24）的量子算法，与最高效的经典算法相比，在系统规模方面可实现二次加速。

A. 无碰撞情形与哈密顿量模拟

当 $\nu = 0$ 我们有一个无碰撞系统，其中 $A = -iH$ 且 H 为厄米矩阵时。该系统守恒总能量，因此由 H生成的幺正时间演化所支配：

$$\frac{d\mathbf{g}_k}{dt} = -iH\mathbf{g}_k, \tag{29}$$

由于这等价于薛定谔方程，因此可以利用哈密顿量模拟技术在量子计算机上进行模拟。用于模拟一个 s-稀疏哈密顿量的高效量子算法，其查询复杂度为 $\mathcal{O}\left(s\|H\|T + \log(1/\epsilon)\log\log(1/\epsilon)\right)$ [7]，其中 s 是稀疏度，$\|H\|$是范数，T 是最终模拟时间，而ϵ 是解态范数中的误差。在厄米系统中，系统矩阵的稀疏度为 $s = 2$。此外，系统的范数随系统规模 $N = M + 1$ 的增长满足

$$\|H\| \sim \mathcal{O}(\sqrt{N}). \tag{30}$$

这也显示在图2中，我们绘制了系统矩阵 $\|H\|$的范数随系统规模 N变化的情况，并观察到 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$的标度关系。

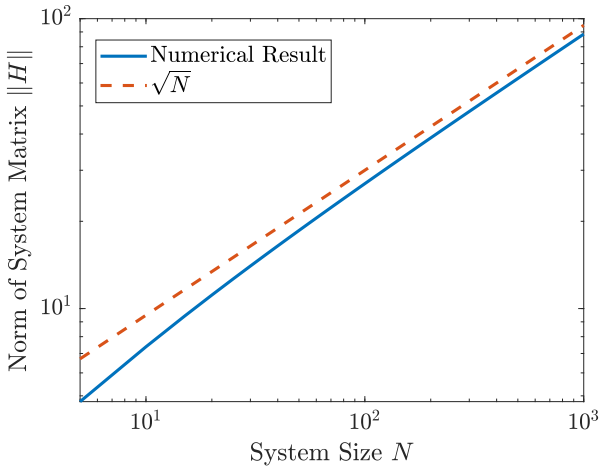

图 2. 数值计算得到的系统矩阵 $\|H\|$ (方程 (27))的范数随系统规模 $N = M + 1$变化的情况，其中M 表示厄米矩的数量。橙色虚线表示 $\sqrt{N}$ 标度关系。

B. 碰撞情形与量子常微分方程求解器

对于更符合实际的情形，由于存在碰撞项，幺正时间演化不再成立。在这种情况下，我们需要求解常微分方程，而不是模拟哈密顿量。我们采用文献 [18]，的结果，该结果指出如下。假设 A 是一个具有预言机访问权限、且为 s 稀疏的矩阵。那么，方程 (24) 可在时间 $O(\mathcal{G}\,T\,\|A\|\,\mathcal{C}(A))$ 内求解，从而得到一个与解成比例的量子态，其中 $\mathcal{G} = \max_{t\in[0,T]}\|\mathbf{g}_k(t)\|/\|\mathbf{g}_k(T)\|$ 衡量解的衰减，且 $\mathcal{C}(A) = \sup_{t\in[0,T]}\|\exp(At)\|$。对于我们的系统，矩阵 A 的负对数范数为负，因此 $\mathcal{C}(A) \leq 1$。

此外，由于 $M \sim \omega/\nu$，只要满足 $\nu \ll k$，加入碰撞并不会改变 $\|A\|$ 关于 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ 的标度。为说明这一点，我们可以通过选择 $M = 2$ 并求解色散关系来近似 ω，从而得到

$$\omega = \sqrt{\frac{1+\alpha}{2}}k. \tag{31}$$

通常，$\alpha = \mathcal{O}(1)$，因此 $\omega \sim k$。为了维持 $\mathcal{O}(\sqrt{N})$的 $\|A\|$ 标度关系，我们要求方程 (26)的非对角项占主导地位，从而得到以下约束：

$$\nu\sqrt{M} \ll k. \tag{32}$$

已知 $M \sim \omega/\nu \sim k/\nu$，可得 $\nu \ll k$。这在大多数我们关注的等离子体中都成立，因为 ν以等离子体频率 ω_p归一化后，远小于 k以德拜长度 λ_D归一化后的量。因此，即使存在碰撞，我们仍能在系统规模上获得二次加速。然而，算法在时间方面的表现会受到影响。这是因为碰撞会导致解的范数呈指数衰减，这意味着对于较大的 T，$\|\mathbf{g}_k(0)\|/\|\mathbf{g}_k(T)\|$的标度为 $e^{\nu T}$。为了高效地计算$\mathbf{g}_k(T)$，我们可以限制模拟时间，这将在第IIIC节讨论。

C. 预言机表示、态制备与输出

哈密顿量模拟和量子常微分方程求解器需要通过预言机 O_A访问系统矩阵 A。该预言机的作用如下：

$$O_A|i,j,0\rangle = |i,j,A_{ij}\rangle, \tag{33}$$

其中，A_{ij} 表示 A中第 i 行、第 j 列的元素。O_A 的表示如下：

$$\begin{aligned} O_A = &(|1,2\rangle\langle 1,2| + |2,1\rangle\langle 2,1|) \otimes \left|-ik\sqrt{\frac{1+\alpha}{2}}\right\rangle\langle 0| \\ &+ \sum_{l=2}^{M} |l,l+1\rangle\langle l,l+1| \otimes \left|-ik\sqrt{\frac{l}{2}}\right\rangle\langle 0| \\ &+ \sum_{l=3}^{M+1} |l,l-1\rangle\langle l,l-1| \otimes \left|-ik\sqrt{\frac{l-1}{2}}\right\rangle\langle 0| \\ &+ \sum_{l=3}^{M+1} |l,l\rangle\langle l,l| \otimes |(l-1)\nu\rangle\langle 0|. \end{aligned} \tag{34}$$

可以使用 [48]中的方法对该预言机进行分块编码。

厄米系统的初始条件由式（28）给出。构造这一初始条件十分简单，不会增加算法的复杂度。

通常可以获得解态中的所有厄米矩。若只想计算朗道阻尼率，则只需测量零阶厄米矩$g_{0,\ k}$，据此即可计算电势

$$\varphi_k = \alpha g_{0,k}. \tag{35}$$

为了获得朗道阻尼率，$g_{0,\ k}$ 需要在不同时间进行采样。为了获得$g_{0,\ k}$ 在特定时刻的值，可以使用振幅估计 [49]。这需要重复执行算法 $\mathcal{O}(1/\delta)$ 次，以计算$g_{0,\ k}$ 并达到绝对精度 δ。获得振幅后，必须在其他采样时刻重复执行算法。要在所有时刻高效地进行振幅估计，取决于电势是否缓慢衰减。此外，在有碰撞情形下，由于解的范数按 $e^{-\nu t}$ 衰减，模拟时间必须受到限制。通常，人们关注的是动力学效应；当 $\nu \ll \gamma$ 时，这些效应便能被捕捉到。这意味着碰撞发生的时间尺度长于所关注的时间尺度（此处为朗道阻尼）。因此，通过选择 $T \sim 1/\gamma$，我们可以确保准确地恢复朗道阻尼率，同时避免解的范数和电势的衰减损害算法性能。

为提取朗道阻尼率而进行的这些重复操作，会增加量子算法在误差方面的复杂度。用于制备解态的高效哈密顿量模拟算法，其规模为$\mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$；但若使用振幅估计提取经典参数（例如朗道阻尼率）——假设 $\delta \sim \epsilon$——则这一规模关系会变为$\mathcal{O}(1/\epsilon)$。

IV. 误差分析

A. 问题陈述

给定精度 ϵ，我们希望确定满足以下条件的系统规模： N ，以便根据式$g_{0,\ k}$ （24）获得结果；此外，还要确定根据式 N_v 获得结果所需的系统规模 E_k ，依据式（14-15）。前一种情形下，输入参数包括模拟时间 T [50]、初始条件的傅里叶系数 k_0、碰撞频率 ν和物理参数 α。对于 ESP 系统，除了T 和 k_0之外，还需要速度网格截断值 v_{max} （他们的算法仅求解无碰撞情形，$\nu = 0$）。

B. 厄米系统

厄米系统的误差分析并非易事，且取决于进行厄米展开的函数。对于本问题涉及的这类函数（按 e^{-v^2} 衰减），通常其收敛速度

厄米级数的收敛速度是超指数的 [51, 52]。也就是说，

$$\epsilon = \Omega\left(e^{-\beta M}\right), \tag{36}$$

其中 $\beta = \beta(k, T)$。

由于方程（11-12）的精确解析解尚未知，为进行误差分析，我们分析以下情形 $\alpha = 0$ （如其他研究中所做，例如[42, 43]），该情形对应于自由流方程

$$\frac{\partial g_k}{\partial t} + ikvg_k = 0, \tag{37}$$

初始条件为

$$g_k(v, 0) = e^{-v^2}, \tag{38}$$

其精确解为

$$g_k(v, t) = e^{-ikvt - v^2}. \tag{39}$$

该解的厄米系数满足方程（24），其表达式为

$$g_{m,k}(t) = \frac{e^{-k^2t^2/4}(-ikt)^m}{\sqrt{2^m m!}}. \tag{40}$$

分母中的阶乘按 $\mathcal{O}(e^m \log^m)$ 的规律增长，因此随着 m 增大，收敛呈超指数形式。图 3 绘出了零阶矩 $g_{0,k}$ 的厄米级数收敛情况。我们使用常微分方程求解器求解式（24），并将解与式（40）进行比较，以获得相对误差。图中展示了预测的收敛情况。

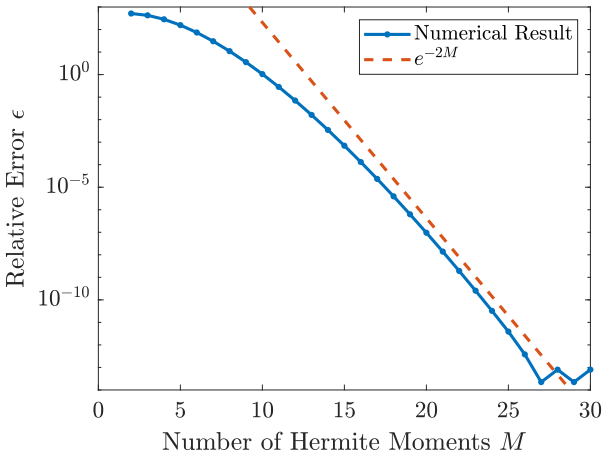

图 3. 相对误差 ϵ 随厄米矩数量 M的变化。蓝色实线表示使用常微分方程求解器、取 $\alpha = \nu = 0$, $k = 2$ $T = 2.5$ e^{-2M} 和，求解式（24）得到的误差；橙色虚线表示一种标度关系。

这种指数收敛在碰撞情形下也可以得到证明。事实上，如

参考文献 [46], 求解方程（23）的稳态解，得到的厄米谱为

$$|g_m| = \mathcal{O}\left(\frac{1}{m^{1/4}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{m}{m_c}\right)^{3/2}\right]\right), \quad (41)$$

其中， m_c 对应于碰撞截止（它是碰撞频率和问题中其他物理输入的函数）。当 m 较小时，收敛速度为关于 $1/m$ 的多项式；而当 m 较大时，渐近收敛速度则为指数级。

快速收敛意味着系统规模 $N = M+1$ 随误差呈对数级增长：

$$N = \mathcal{O}\left(\log(1/\epsilon)\right). \quad (42)$$

C. ESP 系统

这里我们将简要概述 ESP [34] 的方法，并进行误差分析。更多详情请参阅他们的论文。

与我们的公式不同，ESP 不使用泊松方程，而是将线性（无碰撞）Vlasov方程与安培定律耦合，如方程（14-15）所示，并令$C[g_k] = 0$。随后，他们将速度空间限制在区域 $[-v_{max}, v_{max}]$内，其中 v_{max} 是一个输入参数，并使用 15 个点构成的速度网格上的黎曼和来近似方程（ N_v ）中的积分。通过这一处理以及变量变换，他们得以将系统写成薛定谔型方程：

$$\frac{d\boldsymbol{\psi}_k}{dt} = -iH\boldsymbol{\psi}_k, \quad (43)$$

其中， $\boldsymbol{\psi}_k$ 存储速度空间中的（经过傅里叶变换的）分布函数，以及电场的振幅。

由式（15）得到的电场振幅误差为

$$\epsilon = \mathcal{O}\left(e^{-v_{max}^2} + \frac{2L_1 v_{max}^2}{N_v}\right), \quad (44)$$

其中 $L_1 = $ 最大值$_{v\in[-v_{max},v_{max}]}|dg_k/dv|$。第一项对应于区域截断误差 [52], , 第二项对应于黎曼和误差 [53]。由于 L_1 取决于扰动分布函数中存在的结构量，我们可以得出 $L_1 = L_1(k,\ T)$（根据章节 II B中的讨论）。例如，图 4 展示了将 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-v^2}\ dv$ 近似为区域截断黎曼和时的收敛图，说明误差相对于 N_v的收敛性。之所以专门选择高斯函数进行误差分析，是因为 g_k 在 $|v| \to \infty$时呈高斯衰减。我们可以看到总误差和黎曼和误差，并观察到后者按 N_v^{-1}收敛，正如预测的那样。随着 N_v 增加，总误差趋于饱和

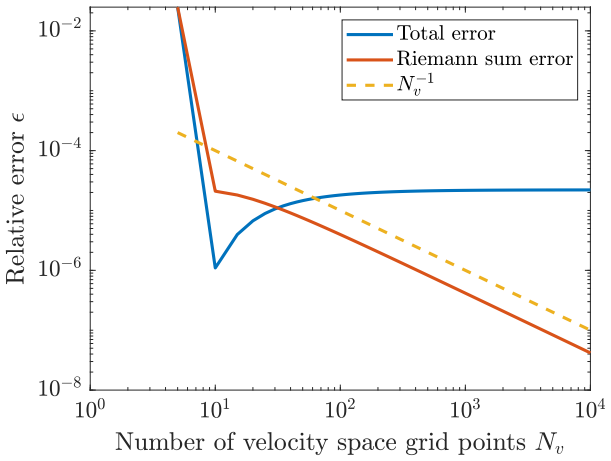

图 4. 对 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-v^2}\ dv$ 进行积分时的相对误差，随速度空间网格点数 N_v 变化，其中 $v_{max} = 3$。蓝色实线表示总误差，如式（44）所示；橙色线表示黎曼和误差，如式（44）右侧的第二项所示；黄色虚线表示 N_v^{-1}标度。

这是由于区域截断误差（蓝线与橙线之间的差异）造成的。

为简单起见，假设定义域截断误差与黎曼和误差同阶：

$$e^{-v_{max}^2} \sim \frac{2L_1 v_{max}^2}{N_v} \sim \epsilon. \quad (45)$$

那么，为达到精度 ϵ， N_v可表示为：

$$N_v = \mathcal{O}\left(\frac{\log(1/\epsilon)}{\epsilon}\right). \quad (46)$$

因此，ESP 系统规模 N_v 随 $1/\epsilon$ 呈多项式增长。

D. 比较

比较公式（42）和（46）可知，厄米系统能够达到相同的精度 ϵ，且系统规模呈指数级缩小 N，与 ESP 系统相比。这意味着，复杂度按 $\mathcal{O}(N)$ 缩放的经典常微分方程求解器，实现厄米系统时，其性能与 ESP 的量子算法相同。

虽然我们在误差分析中排除了系统规模对模拟时间的依赖 T，但需要注意的是，这种依赖对于厄米表示和 ESP 表示是不同的。考察式（ 39 ），我们发现结构由 $\exp(-ikTv)$ 项发展而来，这意味着 ESP表示需要 $N_v \sim kT$ 个网格点来解析这些结构。另一方面，

由式（40）可知，$|g_{M\text{的峰值}k}(T)|$ 在 $M = (kT)^2/2$时出现；这决定了捕捉相关物理现象所需的最低分辨率。因此，在模拟时间较长的极限下，ESP 系统规模对 T 的依赖性更优。然而，这并不影响本文的结果。这是因为，ESP 系统规模对 T 和 ϵ 的依赖为 $N_v \sim T\log(1/\epsilon)/\epsilon$，而对于厄米系统规模，这种依赖为$N \sim T^2\log(1/\epsilon)$。乍看之下，固定 T 后，厄米系统规模似乎会比 ESP 系统规模大一倍。然而，为了在模拟时间为 T 时达到相同的精度 ϵ，ESP 系统需要使系统规模呈指数增长。因此，总体而言，厄米系统规模仍然比 ESP 系统规模小一个指数数量级。需要注意的是，系统规模对 T 的依赖仅存在于无碰撞情形中。加入碰撞后，捕捉精细结构所需的厄米矩数量由 $M \gtrsim \omega/\nu$ 决定，而与 T 无关。

V. 讨论与结论

本文展示了两个主要结果。首先，采用速度空间的Hermite表示，我们可以得到一个规模比 ESP 的工作中提出的有限差分离散化方法得到的系统小得多的系统[34], , 且误差相同ϵ。这意味着，Hermite 方法的经典实现与 ESP 的量子算法性能相近。其次，针对 Hermite 形式的量子算法，相较于求解同一方程组的经典算法，可实现二次加速。然而，由于相关矩阵的范数较大，利用目前已知的方法似乎无法实现指数加速。表 I 总结了本文所讨论算法的复杂度。

表示 经典	门复杂度	《Quantum》
ESP [34]	$\mathcal{O}(N_v/\epsilon^\theta)$	$\mathcal{O}(\text{polylog}(N_v)/\epsilon)$
Hermite	$\mathcal{O}(N/\epsilon^\theta)$	$\mathcal{O}(\sqrt{N}\,\text{对数}(N)/\epsilon)$

表 I. 本文讨论的用于估计朗道阻尼的算法的门复杂度。这里，N 是 Hermite 系统规模，N_v 是 ESP 系统规模，ϵ 是振幅估计中的绝对误差，$\theta \leq 1$ 是经典常微分方程求解器的阶数，数值越小表示求解器阶数越高。模拟时间 T 为常数，在复杂度分析中予以省略。

本文分析的问题比较特殊，因为系统规模与计算误差混为一谈。这是因为，速度空间（或厄米空间）所需的分辨率完全取决于计算朗道阻尼率时所要求达到的误差（从物理角度看，延长计算时间以获得更长的衰减阶段，会导致更多的相位混合，进而使速度空间中的结构尺度更精细，或者相应地，在更高阶的厄米矩中出现结构）。在等离子体物理中更一般的问题里，速度空间和位置空间网格尺寸需要满足最低要求，以便解析特定的物理过程（例如，人们通常希望模拟一个给定系统规模的系统，L，但又必须解析发生在更小尺度上的动力学尺度物理，比如离子拉莫尔半径以下的尺度，ρ_i。通常，$L/\rho_i \gg 1$，因此在考虑系统规模相关的误差收敛性之前，位置空间中就需要非常多的网格点。速度空间中也有类似情况，例如除了麦克斯韦主体之外，还存在超热粒子群。因此，等离子体问题的量子算法随系统规模变化的标度关系本身就值得关注。

我们的结果还凸显了将现有量子算法应用于现实问题所面临的挑战。将用于哈密顿量模拟或微分方程求解器的量子算法应用于 Vlasov方程时，我们会遇到随系统规模平方根增长的矩阵范数。此外，提取朗道阻尼参数等经典信息会使复杂度从 $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$ 增加到$\mathcal{O}(1/\epsilon)$。

我们还指出，可以将线性Vlasov方程表述为一个本征值问题，并使用量子相位估计 [54, 55] 和量子本征值求解器 [56–60] 分别确定无碰撞系统和有碰撞系统的本征值谱。然而，在无碰撞情形下，求得本征值谱需要 $\mathcal{O}(N)$ 次重复；而在有碰撞情形下，此类算法的复杂度取决于系统对角化矩阵的条件数，在这种情况下，该条件数会随 N呈指数增长。此外，基于本征值的表述无法捕捉朗道阻尼，因为要描述朗道阻尼，本质上需要采用初值问题的方法。

这项工作的可能拓展包括将系统推广到更高维度，以及将量子算法拓展至完全非线性Vlasov方程。对于后者，在弱非线性范围内，Liu 等人提出的量子方法 [21] 或许能够实现加速。在强非线性范围内能否实现量子加速，仍是一个悬而未决且重要的问题。

致谢。AA感谢 Alexander Engel 和 Scott Parker 就其工作提供的深刻见解，以及对本文提出的宝贵反馈；同时感谢 Muni Zhou 和 Noah Mandell 就等离子体物理和量子算法进行的有益讨论。AA感谢 NSERC PGS-D 提供的支- 持。作者感谢美国能源部资助编号 DE- SC0020264 的支- 持。

[1] L. K. Grover，用于数据库搜索的快速量子力学算法，载于 *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*(1996)，第 212–219 页。[2] S. Lloyd，通用量子模拟器，《科学》273，1073 1996( )。[3] D. W. Berry、G. Ahokas、R. Cleve 和 B. C. Sanders，用于模拟稀疏哈密顿量的高- 效量子算法，《数学物理通讯》270，359 2007( )。[4] A. M. Childs 和 N. Wiebe，利用酉操作的线性组合进行哈密顿量模拟，arXiv 预印本 arXiv:1202.5822 (2012)。[5] D. W. Berry、A. M. Childs、R. Cleve、R. Kothari 和 R. D. Somma，模拟稀疏哈密顿量时精度的指数级改进，载于 *Proceedings of the forty-sixth annual ACM symposium on Theory of computing* 2014 283 292 ( )，第 – 页。[6] D. W. Berry、A. M. Childs、R. Cleve、R. Kothari 和 R. D. Somma，利用截断泰勒级数模拟哈密顿量动力学，《物理评论快报》114，090502 2015( )。[7] G. H. Low 和 I. L. Chuang，通过量子信号处理实现最优哈密顿量模-拟，《物理评论快报》 118，010501 (2017)。[8] G. H. Low 和 I. L. Chuang，通过量子比特化进行哈密顿量模拟，《 Quantum》3，163 (2019)。[9] P. W. Shor，在量子计算机上进行素数分解和离散对数的多项式时间算法，SIAM评论 41，303 (1999)。[10] S. P. Jordan、K. S. M. Lee 和 J. Preskill，量子场论的量子算法，《科学》336，1130 (2012)。[11] S. P. Jordan、K. S. Lee 和 J. Preskill，费米子量子场论的量子算-法，arXiv 预印本 arXiv:1404.7115 (2014)。[12] T. J. Osborne 和 A. Stottmeister，共形场论的量子模- 拟，arXiv 预印本 arXiv:2109.14214 (2021)。[13] A. W. Harrow、A. Hassidim 和 S. Lloyd，线性方程组的量子算- 法，《物理评论快报》103，150502 (2009)。[14] A. M. Childs、R. Kothari 和 R. D. Somma，对精度具有指数量级改进依赖性的线性方程组量子算法，《SIAM计算杂志》46，1920 (2017)。[15] D. W. Berry，求解线性微分方程的高阶量子算法，《物理学杂志 A：数- 学与理论》47，105301 (2014)。[16] D. W. Berry、A. M. Childs、A. Ostrander 和 G. Wang，对精度具有指数量级改进依赖性的线性微分方程量子算法，《数- 学物理通讯》356，1057 (2017)。[17] A. M. Childs 和 J.-P. Liu，微分方程的量子谱方法，《数学物理通讯》375，1427–1457 (2020)。[18] H. Krovi，改进的线性和非线性微分方程量子算法，《 Quantum》7，913 (2023)。[19] S. K. Leyton 和 T. J. Osborne，一种求解非线性微分方程的量子算法，arXiv 预印本 arXiv:0812.4423 (2008)。

[20] S. Lloyd、G. De Palma、C. Gokler、B. Kiani、Z.-W. Liu、M. Marvian、F. Tennie 和 T. Palmer，非线性微分方程的量子算法，arXiv预印本 arXiv:2011.06571（2020）。[21] J.-P. Liu、H. Ø. Kolden、H. K. Krovi、N. F. Loureiro、K. Trivisa 和 A. M. Childs，耗散性非线性微分方程的高效量子算法，《美国国家科学院院刊》118（2021）。[22] C. Xue、W. Yu-Chun 和 G. Guo，非线性耗散常微分方程的量子同伦摄动法，《新物理学杂志》（2021）。[23] O. Kyriienko、A. E. Paine 和 V. E. Elfving，利用可微量子电路求解非线性微分方程，《物理评论A》103，052416（2021）。[24] Y. Cao、A. Papageorgiou、I. Petras、J. Traub 和 S. Kais，求解泊松方程的量子算法与电路设计，《新物理学杂志》15，013021（2013）。[25] P. C. Costa、S. Jordan 和 A. Ostrander，模拟波动方程的量子算法，《物理评论A》99，012323（2019）。[26] I. Y. Dodin 和 E. A. Startsev，量子计算在等离子体模拟中的应用，《等离子体物理学》28，092101（2021）。[27] J. Zylberman、G. Di Molfetta、M. Brachet、N. F. Loureiro 和 F. Debbasch，流体力学的混合量子-经典算法，arXiv预印本 arXiv:2202.00918（2022）。[28] A. Engel、G. Smith 和 S. E. Parker，非线性动力系统的线性嵌入及高效量子算法的前景，《等离子体物理学》28，062305（2021）。[29] I. Joseph，非线性经典动力学量子模拟的Koopman–von Neumann方法，《物理评论研究》2，043102（2020）。[30] I. Joseph、Y. Shi、M. Porter、A. Castelli、V. Geyko、F. Graziani、S. Libby 和 J. DuBois，量子计算在聚变能源科学中的应用，《等离子体物理学》30，010501（2023）。[31] Y. Shi、A. R. Castelli、X. Wu、I. Joseph、V. Geyko、F. R. Graziani、S. B. Libby、J. B. Parker、Y. J. Rosen、L. A. Martinez、 *et al.*，含噪量子机器上的非原生三次相互作用模拟，《物理评论A》103，062608 2021（）。[32] I. Novikau、E. A. Startsev 和 I. Y. Dodin，利用量子信号处理模拟冷等离子体波，《物理评论A》105，062444（2022）。[33] G. Vahala、J. Hawthorne、L. Vahala、A. K. Ram 和 M. Soe，麦克斯韦方程旋度方程的量子晶格表示，《固体中的辐射效应与缺陷》，1（2022）。[34] A. Engel、G. Smith 和 S. E. Parker，Vlasov方程的量子算法，《物理评论A》100，062315 2019（）。[35] L. Landau，电子等离子体的振荡，《LD Landau论文集》，445（1965）。[36] R. L. Burden、J. D. Faires 和 A. M. Burden， *Numerical analysis* 2015 （圣智学习，）。[37] F. F. Chen， *Introduction to plasma physics*（Springer Science & Business Media，2012）。[38] A. Kanekar、A. Schekochihin、W. Dorland 和 N. Loureiro，等离子体动理学朗之万方程的涨落-耗散关系，

等离子体动理学朗之万方程，《等离子体物理学杂志》81（2015）。[39] T. Adkins 和 A. Schekochihin，傅里叶–厄米相空间中Vlasov动理学等离子体湍流的一个可解模型，《等离子体物理学杂志》84（2018）。[40] T. P. Armstrong，非线性Vlasov方程的数值研究，《流体物理学》10，1269（1967）。[41] F. C. Grant 和 M. R. Feix，线性化极限下Vlasov方程的傅里叶-厄米解，《流体物理学》10，696（1967）。[42] T. P. Armstrong、R. C. Harding、G. Knorr 和 D. Montgomery，利用变换方法求解Vlasov方程，《计算物理方法》9，29（1970）。[43] G. Hammett、M. Beer、W. Dorland、S. Cowley 和 S. Smith，陀螺流体方法在托卡马克湍流模拟中的发展，《等离子体物理与受控聚变》35，973（1993）。[44] S. E. Parker 和 D. Carati，有限碰撞性等离子体中的重整化耗散，《物理评论快报》75，441（1995）。[45] H. Sugama、T.-H. Watanabe 和 W. Horton，无碰撞动理学-流体闭合及其在三模离子温度梯度驱动系统中的应用，《等离子体物理学》8，2617（2001）。[46] A. Zocco 和 A. A. Schekochihin，低频动力学、磁重联以及低β等离子体中的电子加热的约化流体-动理学方程，《等离子体物理学》18，102309（2011）。[47] A. Lenard 和 I. B. Bernstein，速度空间中具有扩散的等离子体振荡，《物理评论》112，1456（1958）。[48]C. S¨ underhauf、E. Campbell 和 J. Camps，用于量子计算数据输入的结构化矩阵分块编码，arXiv预印本 arXiv:2302.10949（2023）。[49] G. Brassard、P. Hoyer、M. Mosca 和 A. Tapp，量子振幅放大与估计，《当代数学》305，53（2002）。[50]线性Vlasov方程表现出一种称为递归的现象，即在较长的模拟时间内，

朝向更精细结构的速度空间级联发生逆转。这一现象纯粹是数值性的，需要将速度空间分辨率设置得足够高（或将模拟时间设置得足够短）以防止其发生。在误差分析中，我们将假设情况确实如此，从而避免递归问题。[51] J. P. Boyd，《厄米函数级数的渐近系数》，计算物理学杂志 54，382（1984）。[52] J. P. Boyd，*Chebyshev and Fourier spectral methods*（Courier Corporation，2001）。[53] L. Rall，《利用黎曼和进行数值积分和积分方程求解》，SIAM评论 7，55（1965）。[54] A. Y. Kitaev，《量子测量与阿贝尔稳定子问题》，arXiv预印本 quant-ph/9511026（1995）。[55] M. Nielsen 和 I. Chuang，*Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*（剑桥大学出版社，2010）。[56] D. S. Abrams 和 S. Lloyd，《用于求解特征值与特征向量并提供指数级加速的量子算法》，《物理评论快报》83，5162（1999）。[57] P. Jaksch 和 A. Papageorgiou，《导致量子特征值计算指数级加速的特征向量近似》，《物理评论快报》91，257902（2003）。[58]H. Wang、L.-A. Wu、Y.-x. Liu 和 F. Nori，《用于求解非酉矩阵特征值的基于测量的量子相位估计算法》，《物理评论A》82，062303（2010）。[59] A. Daskin、A. Grama 和 S. Kais，《用于求解复特征值的通用量子电路方案》，量子信息处理 13，333（2014）。[60] C. Shao，《在量子计算机上计算可对角化矩阵的特征值》，ACM量子计算汇刊 3，1（2022）。