arXiv:2304.00667v1 [quant-ph] 3 Apr 2023

采用人工边界条件的量子动力学量子模拟

Shi Jin*[1,2]、Nana Liu†[1,2,3]、Xiantao Li‡[4]和 Yue Yu§[1]

[1]数学科学学院、自然科学研究院、教育部重点实验室（MOE-LSC）、上海交通大学，中华人民共和国上海市，200240。[2]上海人工智能实验室，中国上海。[3]密西根大学-上海交通大学联合学院，中国上海，200240。[4]数学系，宾夕法尼亚州立大学，美国宾夕法尼亚州大学公园，16802

2023年4月4日

摘要

量子动力学通常表示为含时薛定谔方程，其哈密顿量为厄米算符¨，是量子计算的一项自然应用。然而，在模拟涉及电子发射的量子动力学时，需要使用人工边界条件（人工边界条件）将计算限制在固定区域内。引入吸收边界条件会改变动力学的哈密顿量结构；由于演化不再是酉的，现有量子算法无法直接应用。本文将近期提出的薛定谔化方法¨[JLY22a、JLY22b] 应用于人工边界问题，该方法可将非厄米动力学转化为薛定谔形式¨。我们针对三类人工边界条件实现了该方法，包括复吸收势技术、完美匹配层方法和狄利克雷到诺伊曼方法。我们分析了这些算法的查询复杂度，并通过数值实验验证了该方法的有效性。这有助于弥合现有量子算法与无界区域量子动力学计算模型之间的差距。

1 引言

量子计算是一项新兴技术，它利用量子力学定律实现前所未有的计算能力 [Hid19，NC02，Pre18，RP11]。量子算法作用于一个 n量子比特希尔伯特空间，其维度为 2^n，为计算模型提供了广阔的多维空间。因此，它能够独特地处理大规模科学计算

*shijin-m@sjtu.edu.cn
†nana.liu@quantumlah.org
‡
x
x
l
1
2
@psu.edu§terenceyuyue
@sjtu.edu.cn

问题。一个自然的应用领域是时变薛定谔方程（含时薛定谔方程，TDSE）所涉及的偏微分方程，它们遵循幺正演化，因此波函数可以在量子计算机上进行相干表示。这类方法称为哈密顿量模拟，围绕这一目标已开发出多种高效算法 [BCC+15，BCK15，BCC+17，LC17，LC19，CGJ19，KSB19，AFL21，JLY22b，AFL22，FLT23]。

含时薛定谔方程是在整个物理空间中建立的，但在实际应用中，计算必须在有界区域内进行，通常选取电子密度集中的区域。对于电子被发射到计算域之外的情形（如光电离过程），或电子被带离计算域的情形（如电离过程），这种方法可能导致计算域异常庞大。为解决这类问题，人们常使用人工边界条件（人工边界条件），以吸收出射波包，更重要的是尽可能缩小计算域。设置正确的人工边界条件，所得结果将与在无限区域中进行计算相同，例如参见综述论文 [AAB+08]。

引入吸收边界条件后，计算机模拟所描述的动力学不再是酉的。因此，现有的哈密顿量模拟技术无法直接应用。本文旨在弥合这一新出现的差距：通过将非哈密顿动力学映射回薛¨定谔方程或哈密顿系统，从而立即具备哈密顿量模拟能力。这通过近期提出的薛¨定谔化技术实现 [JLY22a，JLY22b]。这是一种通用框架，可通过扭曲相位变换，将任意线性偏微分方程（以及常微分方程）或动力系统转化为高一维空间中的薛¨定谔方程组或哈密顿系统。薛¨定谔化方法的一个关键优势在于其简单性和通用性：系统演化所依据的一般哈密顿量具有简单形式。考虑边值问题时，得到的系统是非齐次的，因而不是哈密顿系统；此时只需引入一个辅助变量使系统齐次，之后仍可应用薛¨定谔化过程 [JLY22a，JLY22b]。

本文探讨了三种常见的吸收边界条件（ABCs），包括复吸收势方法、完美匹配层方法和狄利克雷到诺伊曼方法，以便通过 Schr¨odingerization 方法实现量子实现。

实现吸收边界条件（ABCs）的另一种可能方案是使用量子线性求解器（QLS） [HHL09，CKS17]。具体做法是先进行空间离散化，将模型化简为线性常微分方程组，再采用时间推进格式。龙格－库塔方法、谱（配置）方法 [CL19], 多步方法 [BCOW17], 以及戴森级数 [Kro22],是一些重要的现有方法。在一些早期研究中 [CL19], ，这类算法的分析假设线性常微分方程组中的矩阵 A 可对角化，最终复杂度包含特征向量矩阵的条件数。随后，Krovi [Kro22], 对其进行了改进，将条件数替换为以下界：

$$C(A) = \sup_{t\in[0,T]} \|\exp(At)\|.$$

在吸收边界条件的背景下，由于其耗散性，矩阵 A 通常是稳定的，即特征值的实部非正。事实上，这种稳定性是吸收边界条件 [EM79] 的开发与分析中的一个重点。稳定性意味着 $C(A) = 1$，因此完全消除了复杂度对条件数的依赖。

然而，基于量子线性系统的方法仍需执行更复杂的步骤，例如截断泰勒级数展开，或构造与矩阵逆相关的酉操作。后者通常通过块编码形式体系 [GSLW19] 实现。尽管这些结果可能在查询复杂度与门复杂度方面与薛定谔化方法相近，但在块编码形式体系中如何明确求得逆并不直观，因此实际应用较为困难。相比之下，薛定谔化方法的方案简单得多，待模拟的哈密顿量 是明确给出的，因此问题可直接归入哈密顿量模拟的范畴。薛定谔化方法的成本也 与条件数无关。

我们注意到，近期也出现了用于模拟微分方程振幅编码解的量子线性求解器（QLS）替代方案，例如基于分块编码的方案 [ALWZ22] 或酉算子的线性组合（LCU）[ALL23]。将这些方法应用于吸收边界条件（ABCs），可以为本文的方法提供互补的视角。

2 现有边界条件简述

我们首先回顾实践中常用的几种人工边界条件。这些数值技术旨在模拟整个空间中的动力学$\mathbb{R}^d$，即

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d, \tag{1}$$

ˆ其中 H 是以约化单位表示的哈密顿算子，

$$\hat{H}=-\frac{\nabla^2}{2}+V(\boldsymbol{x},t). \tag{2}$$

我们假设初始波函数 $\psi(\boldsymbol{x},0)$ 在一个紧支撑子域内，此处记作 $\Omega\subset\mathbb{R}^d$。另一方面，由于初始动量或外部势的影响，波函数可能扩散到 Ω 之外很远的区域，如图 1所示。为避免不断扩大计算域，需要制定适当的边界条件，使波包能够传播至计算域边界之外。这些条件称为人工边界条件（ABCs），旨在防止边界反射，从而避免其与域内动力学发生干涉。

2.1 复吸收势

复吸收势（CAP）的基本思想是在含时薛定谔方程中引入一个虚部为负的人工势。这会将含时薛定谔方程（1）修改为:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{x},t)+W(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t),\quad \boldsymbol{x}\in D. \tag{3}$$

这里 $D\supset\Omega$ 是一个更大的区域，提供了一个吸收层，$D\backslash\Omega$，它包围着计算域 Ω。复势 $W(\boldsymbol{x})$ 的选取使其在计算域 Ω 内为零，从而保持原有动力学不变；而在周围的吸收层中，其虚部为负，且其大小随着远离边界 $\partial\Omega$ 而缓慢增大（例如，见图2 ）。我们希望吸收层边界处的波函数能够得到

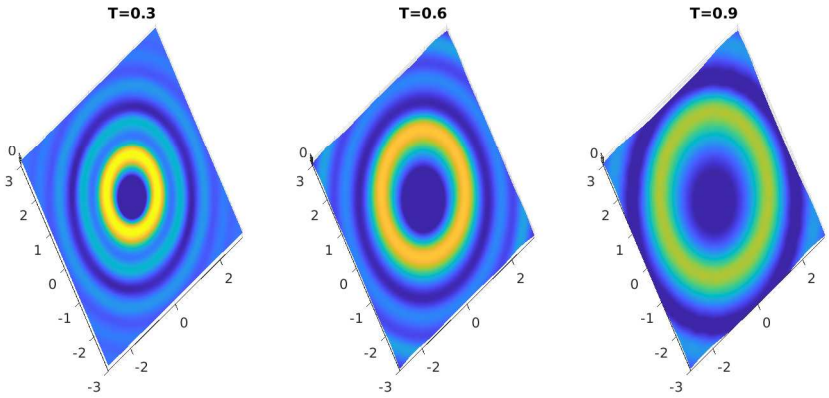


图 1：在计算域 $\Omega = [-3,3] \times [-3,3]$ 外传播的波。

足够强的阻尼，此时便可将其简单地设为零。作为计算化学中一种广泛采用的技术，虚势有多种参数形式，均已被提出并经过广泛测试 [MPNE04，YE18]。某些形式可能会在 $W(\boldsymbol{x})$ 中包含非零实部，以提供更大的灵活性。

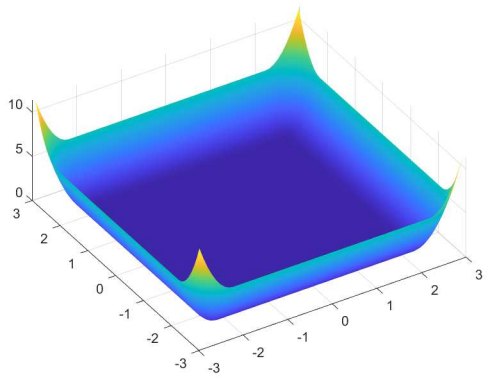


图2：二维区域复吸收势的示例 $W(x, y)$。振幅对应 $-\mathrm{Im}W$。$\Omega = [-2.2, 2.2] \times [-2.2, 2.2]$ 和 $D = [-3,3] \times [-3,3]$。受 [RM96], 研究的启发，我们选择多项式形式 $W(x, y) = -10i(|x| - 2.2)_+^2 - 10i(|y| - 2.2)_+^2$。

从计算角度来看，复吸收势方法仅修改 H 的ˆ对角元。其实现相当直接，吸收层外的边界条件可选为齐次狄利克雷边界条件。

2.2 完美匹配层方法

另一种经典策略是完美匹配层（PML） [Ber94], ，首先构造一个缓冲层，使计算域中的出射波得以精确保留（完美匹配）。尽管从概念上看与 CAP 类似，PML 至少在连续层面上可以

从理论上吸收出射波。确保完美匹配性质最常见的数学方法是对空间坐标进行复伸缩，以推导出缓冲层中的修正方程，然后在实现过程中同时对所得模型进行离散化。

完美匹配层在科学与工程的许多领域都有应用，例如电磁学、声学和流体动力学。在这些领域中，准确模拟波传播对于理解和预测物理现象至关重要。对于含时薛定谔方程（1），Zheng 已为其开发了完美匹配层[Zhe07] 以及 Nissen 和 Kreiss [NK11]。我们遵循 [NK11], 中的推导。为简要说明其构造，我们先考虑一维薛定谔方程，

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\psi + V(x). \tag{4}$$

推导完美匹配层时，首先将时间导数替换为乘以 $-i\omega$ 的形式，其中ω 为频率变量。这样，方程变为:

$$\omega\psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\psi + V(x). \tag{5}$$

第二步，进行坐标拉伸，

$$\partial_x \longrightarrow \frac{1}{1+i\sigma(x)/\omega}\partial_x,$$

从而将（5）化为

$$\begin{aligned}\omega\psi + i\sigma(x)\psi =& -\frac{1}{2}\partial_x\left(\frac{1}{1+i\sigma(x)/\omega}\partial_x\psi\right) + \big(1+i\sigma(x)/\omega\big)V(x),\\ =& -\frac{\partial_x^2}{2}\psi + V(x) + \frac{1}{2}\partial_x\left(\frac{i\sigma(x)/\omega}{1+i\sigma(x)/\omega}\partial_x\psi\right) + \frac{i\sigma(x)}{\omega}V(x).\end{aligned}$$

函数 σ 的选取可以遵循与复吸收势方法类似的方案。由于我们假设在区域 Ω 外 $V=0$，因此可以省略最后一项。接下来定义一个辅助函数，

$$\chi = \frac{\sigma(x)/\omega}{1+i\sigma(x)/\omega}\partial_x\psi.$$

最后，将 $-i\omega$ 转换回时间导数，得到方程组:

$$\begin{aligned}i\partial_t\psi =& \hat{H}\psi - i\sigma(x)\psi + \frac{i}{2}\partial_x\chi,\\ i\partial_t\chi =& \sigma(x)\partial_x\psi - i\sigma(x)\chi.\end{aligned} \tag{6}$$

需要指出的是，这种坐标伸缩的思路与外部坐标缩放方法 [SE00，HRB07]有着很大的相似性。不过，相应的修正方程与我们在此推导的方程截然不同。

对于二维问题，可以在第二个坐标方向重复相同的步骤，并将模型推广为，

$$\begin{cases} i\partial_t\psi =\hat{H}\psi - i\sigma(x)\psi - i\sigma(y)\psi + \dfrac{i}{2}\partial_x\chi + \dfrac{i}{2}\partial_y\phi,\\ i\partial_t\chi =\sigma(x)\partial_x\psi - i\sigma(x)\chi,\\ i\partial_t\phi =\sigma(y)\partial_y\psi - i\sigma(y)\phi, \end{cases} \qquad (x,y)\in D. \tag{7}$$

在 Ω 的内部，有 $\sigma \equiv 0$，因此新方程（7）将化简为含时薛定谔方程（1）。与此同时，在缓冲层之外，即在 ∂D，可以将波函数设为零。请注意，数值离散化后，完美匹配性质不再成立。因此，恰当选择 σ并配合足够大的缓冲层，对完美匹配层的性能至关重要。

2.3 狄利克雷到诺伊曼方法

第三类人工边界条件基于狄利克雷到诺伊曼（DtN）映射。首先，可以对含时薛定谔方程（1）应用半离散格式，例如采用标准有限差分格式离散动能项。这样仍会得到一个无穷维常微分方程组。下一步是进行区域分解。为此，我们将 Ω_{I} 定义为 Ω 中的网格点；类似地，将 Ω_{II} 定义为区域 Ω 外的网格点集合。

半离散模型可以写成以下紧凑形式:

$$\begin{cases} i\dot{\boldsymbol{\psi}}_{\mathrm{I}}(t) = H_{\mathrm{I,I}}(t)\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}}(t) + H_{\mathrm{I,II}}(t)\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{II}}(t), \\ i\dot{\boldsymbol{\psi}}_{\mathrm{II}}(t) = H_{\mathrm{II,I}}(t)\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}}(t) + H_{\mathrm{II,II}}(t)\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{II}}(t), \end{cases} \tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}} = [\psi(\boldsymbol{x}_k)]_{k\in\Omega_{\mathrm{I}}}$ 和 $\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{II}} = [\psi(\boldsymbol{x}_k)]_{k\in\Omega_{\mathrm{II}}}$。 $\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}} \in \mathbb{C}^{n_{\mathrm{I}}}$ 和 $\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{II}} \in \mathbb{C}^{n_{\mathrm{II}}}$。我们将哈密顿算子的离散形式表示为分块形式:

$$H = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{I,I}} & H_{\mathrm{I,II}} \\ H_{\mathrm{II,I}} & H_{\mathrm{II,II}} \end{bmatrix}. \tag{9}$$

由于薛定谔方程（1）已在空间上离散化，以下用 $\dot{}$ 表示时间导数。此外，由于我们假设 Ω_{II} 中有 $V = 0$，算子 $H_{\mathrm{II,\,II}}$ 仅包含动能（拉普拉斯算子）。

对于计算域 Ω_{I} 中的网格点，可以将边界附近的网格点单独分离出来。将这组网格点记为 Γ:

$$\Gamma = \{\boldsymbol{x}_j \in \Omega_{\mathrm{I}} : \text{if there exists } \boldsymbol{x}_k \in \Omega_{\mathrm{II}} \text{ such that } H_{jk} \neq 0\}.$$

通过重新排列网格点，可以将 $\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}}$ 排列如下

$$\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\psi}_{\Gamma} \\ \boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}\backslash\Gamma} \end{bmatrix}. \tag{10}$$

因此，哈密顿量的非对角块可写为

$$H_{\mathrm{II,I}} = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{II},\Gamma} & H_{\mathrm{II,I}\backslash\Gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{\mathrm{II},\Gamma} & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

通过使用拉普拉斯变换，Wu and Li（参见 [WL20]中的第二节）推导出了以下精确边界条件,

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\psi}}_{\mathrm{I}}(t) = -iH_{\mathrm{I,I}}\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}}(t) - iE^T\boldsymbol{\phi}_{\Gamma}(t), \\ \boldsymbol{\phi}_{\Gamma}(t) = \displaystyle\int_0^t \kappa(t-\tau)\boldsymbol{\psi}_{\Gamma}(\tau)d\tau, \end{cases} \tag{11}$$

这里， E 是一个限制算子，用于从定义在 Ω_{I} 中的函数中提取对应于边界 Γ 处网格点的波函数分量，即:

$$\boldsymbol{\psi}_{\Gamma} = E\boldsymbol{\psi}_{\mathrm{I}}.$$

此外， ϕ_Γ 表示 Ω_{II} 中的波函数对 Ω_{I} 中波函数的影响，

$$\phi_\Gamma = H_{\Gamma,\text{II}}\psi_{\text{II}}(t).$$

但在实现（11）时，并不需要这种联系。

（11）中的第二个方程被视为离散 DtN 映射，其中 $\kappa(t)$ 是与拉普拉斯域中的 $K(s)$ 相对应的实时间核函数，其中

$$K(s) = -H_{\Gamma,\text{II}}(H_{\text{II},\text{II}} - isI)^{-1}H_{\text{II},\Gamma}.$$

这种吸收边界条件也可以在不进行空间离散化的情况下推导出来 [HH04，AAB+08]。例如，对于一维问题，积分项可以表示为分数阶导数 [Arn98，AAB+08]。但之后仍需进行离散化。

到目前为止，该公式是精确的。在实际应用中， $K(s)$ 通常采用 Pad´e 近似处理。例如，零阶近似需要选取一个 s_0 作为插值点，并令

$$R = K(s_0) = -H_{\Gamma,\text{II}}\left(H_{\text{II},\text{II}} - is_0I\right)^{-1}H_{\text{II},\Gamma}. \tag{12}$$

结合（11），人工边界条件可写为:

$$\dot{\psi}_{\text{I}}(t) = -iH_{\text{I},\text{I}}\psi_{\text{I}}(t) - iE^TRE\psi_{\text{I}}(t). \tag{13}$$

这种近似还引入了一个反厄米部分负定的势[WL20]。因此，它可以视为一种复吸收势方法；但厄米部分不一定为零，而且反厄米部分通常不是对角矩阵。

根据一阶 Pad´e 近似，可得人工边界条件如下，

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\psi_{\text{I}}(t) = -iH_{\text{I},\text{I}}\psi_{\text{I}}(t) - iE^T\phi_\Gamma(t), \\ \dfrac{d}{dt}\phi_\Gamma(t) = B\phi_\Gamma(t) + AE\psi_{\text{I}}(t). \end{cases} \tag{14}$$

通过直接 插值 $s = s_0$，可得（参见 [WL20] 中定理 3.2 的证明） ，

$$A = -iH_{\Gamma,\text{II}}H_{\text{II},\Gamma}, \qquad B = s_0I - AR^{-1}. \tag{15}$$

我们介绍 DtN 方法时，假设 $H_{\text{II},\text{II}}$ 是一个有限矩阵。通过施加远场零条件，可以取无限体积极限。另一个重要观察是，式（ R 12）中的矩阵 $H_{\text{II},\text{II}}$ 在外部区域涉及算子，但 DtN 映射可通过离散边界元方程 [MR09、Li12]，计算；该方程只涉及边界上的波函数。还可以通过寻求 R 的最小二乘法稀疏近似 [Li09]，进一步简化这些方程。

3 通过 Schr¨odinger 化进行《Quantum》模拟

由前文可知，在三种人工边界条件下，含时薛定谔方程均可表示为以下一般形式，

$$\frac{d}{dt}\left|\phi(t)\right\rangle = -iH_0\left|\phi(t)\right\rangle - H_1\left|\phi(t)\right\rangle. \tag{16}$$

这里，$|\phi(t)\rangle$ 是一个量子态，用于编码子域中的波函数（也可能包括辅助函数）。 H_0 和 H_1 均为厄米算符，而 H_0 是对原哈密顿量的轻微修改。

薛定谔化¨方法最早由 [JLY22b]提出。关键步骤是扭曲相位变换 $\boldsymbol{v}(t,p) = e^{-p}\boldsymbol{\phi}(t)$，其定义适用于 $p > 0$ ，并将初始数据对称地延拓至 $p < 0$。该变换将 (16) 转化为线性对流方程组：

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\boldsymbol{v}(t,p) = -iH_0\boldsymbol{v} + H_1\partial_p\boldsymbol{v}, \\ \boldsymbol{v}(0,p) = e^{-|p|}\boldsymbol{\psi}_0. \end{cases} \tag{17}$$

另一方面，解 $\boldsymbol{\phi}(t)$ 可以通过简单积分恢复，

$$\boldsymbol{\psi}(t) = \int_0^\infty \boldsymbol{v}(t,p)dp. \tag{18}$$

一种更直观的理解方式是对 p 维进行离散化，并将每个 p 对应的函数串接起来。为此，我们注意到 $\boldsymbol{v}(t,p)$ 在 p 空间中呈指数衰减。因此，我们可以选取一个足够大的区间，使得，

$$\int_0^\infty \boldsymbol{v}(t,p)dp = \int_a^b \boldsymbol{v}(t,p)dp + \mathcal{O}(\epsilon).$$

接下来，我们选取大小为 $\Delta p = (b-a)/M$ 的子区间，其中 $M = 2N$ 为偶数，并将网格点记为 $a = p_0 < p_1 < \cdots < p_M = b$。然后，可以利用求积公式实现从 $\boldsymbol{v}$ 到 ψ 的映射，

$$\int_a^b \boldsymbol{v}(t,p)dp \approx \frac{\Delta p}{2}\left[\boldsymbol{v}(t,a) + \boldsymbol{v}(t,b)\right] + \Delta p \sum_{m=1}^{M-1} \boldsymbol{v}(t,p_m).$$

为计算 $\boldsymbol{v}(t,p)$，令向量 $\boldsymbol{w}$ 为函数 $\boldsymbol{v}$ 在这些网格点上的集合，具体定义如下：

$$\boldsymbol{w} = [\boldsymbol{w}_1; \boldsymbol{w}_2; \cdots; \boldsymbol{w}_n],$$

其中，“;”表示将 $\{\boldsymbol{w}_i\}_{i\geq 1}$ 展开为列向量。也可以用 $|k\rangle$ 作为新的基，将其表示为叠加态：

$$\boldsymbol{w}_i = \sum_k \boldsymbol{v}_i(t,p_k)\,|k\rangle\,,$$

By 沿 p 方向应用离散傅里叶变换后，可得 t,

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{w}(t) = -i(H_0 \otimes I)\boldsymbol{w} + i(H_1 \otimes P_\mu)\boldsymbol{w}. \tag{19}$$

这里，P_μ 是动量算符 $-i\partial_p$ 的矩阵表示，写作

$$P_\mu = \Phi D_\mu \Phi^{-1}, \qquad D_\mu = \mathrm{diag}(\mu_{-N}, \cdots, \mu_{N-1}),$$

其中 $\mu_l = 2\pi l/(b-a)$ 是傅里叶模态，且

$$\Phi = (\phi_{jl})_{M\times M} = (\phi_l(x_j))_{M\times M}, \qquad \phi_l(x) = e^{i\mu_l(x-a)}$$

是离散傅里叶变换的矩阵表示。

此时，我们已成功将动力学映射回一个哈密顿系统。通过变量替换 $\tilde{\boldsymbol{w}} = (I_u \otimes \Phi^{-1})\boldsymbol{w}$，可得

$$\frac{d}{dt}\tilde{\boldsymbol{w}}(t) = -i(H_0 \otimes I)\tilde{\boldsymbol{w}} + i(H_1 \otimes D_\mu)\tilde{\boldsymbol{w}}. \tag{20}$$

这更适合用量子算法进行近似。特别地，如果 H_0 和 H_1是稀疏的，那么（20）就是一个薛¨定方程，其哈密顿量 $H = H_0 \otimes I - H_1 \otimes D_\mu$ 继承了这种稀疏性。

3.1 复吸收势方法的薛¨定化

举例来说，我们考虑在二维情形（3）中将复吸收势方法应用于含时薛定谔方程（1）（$\boldsymbol{x} = (x, y)$），尽管推广到更高维度十分直接。作为示例，我们使用五点有限差分在网格点上离散化拉普拉斯算子：

$$x_0 < x_1 < \cdots < x_N < x_{N+1}, \qquad y_0 < y_1 < \cdots < y_N < y_{N+1}.$$

对（3）进行空间离散化后，未知量 $\psi(x_i, y_j, t)$ 关于$1 \le i, j \le N$ 的半离散系统形式如下：

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\boldsymbol{\psi}(t) = -iH_0\boldsymbol{\psi}(t) - H_1\boldsymbol{\psi}(t), \\ \boldsymbol{\psi}(0) = \boldsymbol{\psi}_0, \end{cases} \tag{21}$$

ˆ其中， H_0 是一个实对称矩阵，对应于 H的离散化，并包含吸收势 $W(x,y)$的实部； $H_1 = -\mathrm{diag}(\mathrm{Im}\boldsymbol{W})$是一个对角矩阵，由复势的虚部 W给出，其中 $\boldsymbol{W} = \sum_{ij} W(x_i, y_j)\ |i,j\rangle$。事实上，令 D_{xx} 为齐次边界条件下二阶导数（∂_{xx}）所对应的一维差分矩阵。于是

$$H_0 = -\frac{1}{2}(D_{xx} \otimes I + I \otimes D_{xx}) + \boldsymbol{V} + \mathrm{diag}(\mathrm{Re}\boldsymbol{W}), \qquad \boldsymbol{V} = \mathrm{diag}(V(x_i, y_j)), \tag{22}$$

这里我们假设沿 x 和 y 方向采用相同的分区。

3.2 完美匹配层方法的薛定谔化

式（7）中的完美匹配层包含一阶和二阶导数。对这些导数应用中心差分，可得到直接的离散化，

$$\begin{cases} \partial_t\boldsymbol{\psi} = -iH_V\boldsymbol{\psi} - (I \otimes \boldsymbol{\sigma}_x + \boldsymbol{\sigma}_y \otimes I)\boldsymbol{\psi} + \frac{1}{2}(I \otimes D_x)\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}(D_y \otimes I)\boldsymbol{\phi}, \\ \partial_t\boldsymbol{\chi} = -i(I \otimes (\boldsymbol{\sigma}_x D_x))\boldsymbol{\psi} - (I \otimes \boldsymbol{\sigma}_y)\boldsymbol{\chi}, \\ \partial_t\boldsymbol{\phi} = -i((\boldsymbol{\sigma}_y D_y) \otimes I)\boldsymbol{\psi} - (\boldsymbol{\sigma}_y \otimes I)\boldsymbol{\phi}, \end{cases}$$

其中， D_x 和 D_{xx} 是用于在齐次边界条件下近似一阶和二阶导数（∂_x 和 ∂_{xx}）的一维差分矩阵，$\boldsymbol{\sigma}_x = \mathrm{diag}(\sigma(x_1)\ \cdots, \sigma(x_N))$是一个对角矩阵，并且

$$H_V = -\frac{1}{2}(D_{xx} \otimes I + I \otimes D_{xx}) + \boldsymbol{V}, \qquad \boldsymbol{V} = \mathrm{diag}(V(x_i, y_j)). \tag{23}$$

令 $\boldsymbol{u}_h(t) = [\boldsymbol{\psi}; \boldsymbol{\chi}; \boldsymbol{\phi}]$。则上述系统可写成矩阵形式，

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{u}_h = L_h \boldsymbol{u}_h,$$

其中

$$L_h = \begin{bmatrix} -iH_V - (I \otimes \boldsymbol{\sigma}_x + \boldsymbol{\sigma}_y \otimes I) & \frac{1}{2}(I \otimes D_x) & \frac{1}{2}(D_y \otimes I) \\ -i(I \otimes (\boldsymbol{\sigma}_x D_x)) & -(I \otimes \boldsymbol{\sigma}_x) & O \\ -i((\boldsymbol{\sigma}_y D_y) \otimes I) & O & -(\boldsymbol{\sigma}_y \otimes I) \end{bmatrix}. \tag{24}$$

In 根据（21），可得 $H_0 = -\left(L_h - L_h^\dagger\right)/(2i)$ 以及 $H_1 = -\left(L_h + L_h^\dagger\right)/2$。

3.3 DtN 方法的薛定谔化

在应用 DtN 方法的薛定谔化过程（¨14）之前，我们先通过如下定义引入变量变换：

$$\boldsymbol{\psi}_\Gamma(t) = \left(H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} H_{\text{Ⅱ},\Gamma}\right)^{-1/2} \boldsymbol{\phi}_\Gamma(t). \tag{25}$$

矩阵的可逆性可由矩阵各行的线性无关性看出$H_{\Gamma,\ \text{Ⅱ}}$。

直接代入（14）可得：

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\boldsymbol{\psi}_\text{I}(t) = -iH_{\text{I},\text{I}}\boldsymbol{\psi}_\text{I}(t) - i\Sigma_{\text{I},\Gamma}\boldsymbol{\psi}_\Gamma(t), \\ \dfrac{d}{dt}\boldsymbol{\psi}_\Gamma(t) = -i\Sigma_{\text{I},\Gamma}^T\boldsymbol{\psi}_\text{I}(t) + \Sigma_{\Gamma,\Gamma}\boldsymbol{\psi}_\Gamma(t). \end{cases} \tag{26}$$

这里我们定义了矩阵，

$$\begin{aligned} S =& H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} H_{\text{Ⅱ},\Gamma}, \\ \Sigma_{\text{I},\Gamma} =& E^T S^{1/2}, \\ \Sigma_{\Gamma,\Gamma} =& s_0 I + iS^{1/2} R^{-1} S^{1/2}. \end{aligned} \tag{27}$$

这些记号的灵感来自电子输运中自能的概念[BMO+02]。利用公式（12），可以得到这些矩阵更明确的表达式：

$$\begin{aligned} R =& -H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} \left(H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}} - is_0 I\right)^{-1} H_{\text{Ⅱ},\Gamma}, \\ =& -H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} \left(H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}}^2 + s_0^2 I\right)^{-1} \left(H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}} + is_0 I\right) H_{\text{Ⅱ},\Gamma} \\ =& -G_0 - is_0 G_1, \end{aligned}$$

这里，为了得到第二行，我们利用了这一显然事实：$H_{\text{Ⅱ},\ \text{Ⅱ}}$ 与 I可交换。在第三行中，我们定义了这些矩阵

$$G_0 = H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} \left(H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}}^2 + s_0^2 I\right)^{-1} H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}} H_{\text{Ⅱ},\Gamma}, \quad G_1 = H_{\Gamma,\text{Ⅱ}} \left(H_{\text{Ⅱ},\text{Ⅱ}}^2 + s_0^2 I\right)^{-1} H_{\text{Ⅱ},\Gamma}. \tag{28}$$

为了分离出 $\Sigma_{\Gamma,\Gamma}$ 的厄米部分和反厄米部分，我们注意到，

$$\frac{1}{2}\left(R^{-1} + \left(R^{-1}\right)^\dagger\right) = \frac{1}{2}R^{-1}\left(R^\dagger + R\right)\left(R^{-1}\right)^\dagger = -R^{-1}G_0\left(R^{-1}\right)^\dagger.$$

类似地，我们有，

$$\frac{1}{2i}\left(R^{-1}-\left(R^{-1}\right)^{\dagger}\right)=\frac{1}{2i}R^{-1}\left(R^{\dagger}-R\right)\left(R^{-1}\right)^{\dagger}=-R^{-1}G_1\left(R^{-1}\right)^{\dagger}.$$

现在，我们可以应用薛定谔化过程，其中厄米部分和反厄米部分分别为，

$$H_0=\begin{bmatrix} H_{\mathrm{I,I}} & \Sigma_{\mathrm{I},\Gamma} \\ \Sigma_{\mathrm{I},\Gamma}^{T} & -S^{\frac{1}{2}}R^{-1}G_0\left(R^{-1}\right)^{\dagger}S^{\frac{1}{2}} \end{bmatrix},\quad H_1=\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -s_0 I+S^{\frac{1}{2}}R^{-1}G_1\left(R^{-1}\right)^{\dagger}S^{\frac{1}{2}} \end{bmatrix}. \tag{29}$$

4 数值结果

现在我们给出一些数值实验的结果。作为一个具体示例，我们考虑二维含时薛定谔方程，并选择一个正方形区域 $\Omega:=[-3,3]\times[-3,3]$. 按照 [Zhe07], 中的示例，我们选择如下初始条件，

$$\psi_0(x,y)=\begin{cases}1+\cos(\pi r)+i(\cos(2\pi r)-1), & r\le 1,\\ 0 & \text{otherwise.}\end{cases}$$

这里 $r=\sqrt{x^2+y^2}$. 对于势，我们选择 $V(x,y)=\sin(2\pi r)$，定义在单位圆盘内，并在圆盘外延拓为零。

在数值实验中，我们使用矩阵指数求解（20）：

$$\tilde{\boldsymbol{w}}(t)=e^{-iHt}\tilde{\boldsymbol{w}}(0).$$

我们使用 MATLAB 内置函数 *expm.m* 在经典计算机上实现这一方法。在实现中，我们还取 $N_x=N_p=64$ 和 $p\in[L,R]=[-5,5]$。然而，重要的是要注意，这些实验旨在证明薛定谔化中的方程（20）能够在人工边界条件下捕捉动力学。由于对维度的依赖较小，方程（20）的量子实现比在经典计算机上的实现可行得多。

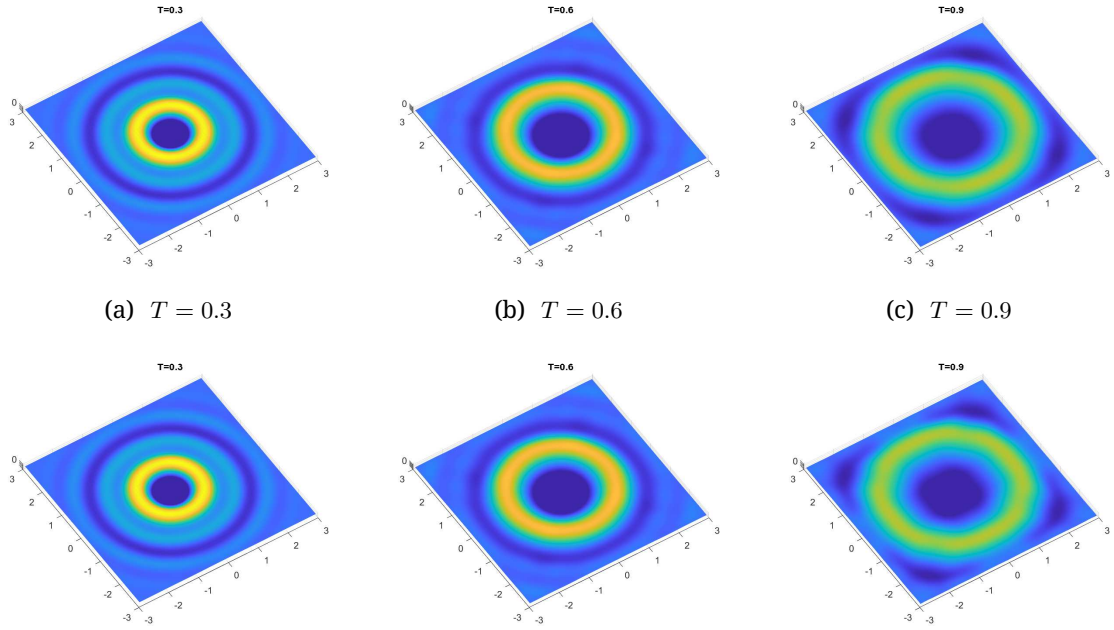
我们首先考察复吸收势方法。在这些实验中，虚势 $W(x,y)$ 选为 $w_1(x,y)$ 与 $w_2(x,y)$ 之和，其中

$$w_1(x,y)=\begin{cases}-10i(|x|-2.2)^2, & |x|>2.2\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases},\qquad w_2(x,y)=\begin{cases}-10i(|y|-2.2)^2, & |y|>2.2\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases},$$

如图 2 所示。量子模拟 (3) 和 (20) 在 $t=0.3$, 0.6 以及$t=0.9$ 下的结果如图 3(d-f) 所示。从中可以观察到，其结果与图 3(a-c) 中原始形式 (3) 所给出的结果非常相似。这验证了薛定谔化¨方法方案的正确性。

现在我们转向 PML 方法。我们在相同的测试问题上实现了（7），结果如图4所示。这里函数 σ 选为

$$\sigma(x)=\begin{cases}10(x-2.2)^2, & x>2.2,\\ 10(-2.2-x)^2, & x<-2.2.\end{cases}$$



(a) $T = 0.3$ (b) $T = 0.6$ (c) $T = 0.9$

(d) 薛定谔化： $T = 0.3$ (e) 薛定谔化： $T = 0.6$ (f) 薛定谔化： $T = 0.9$

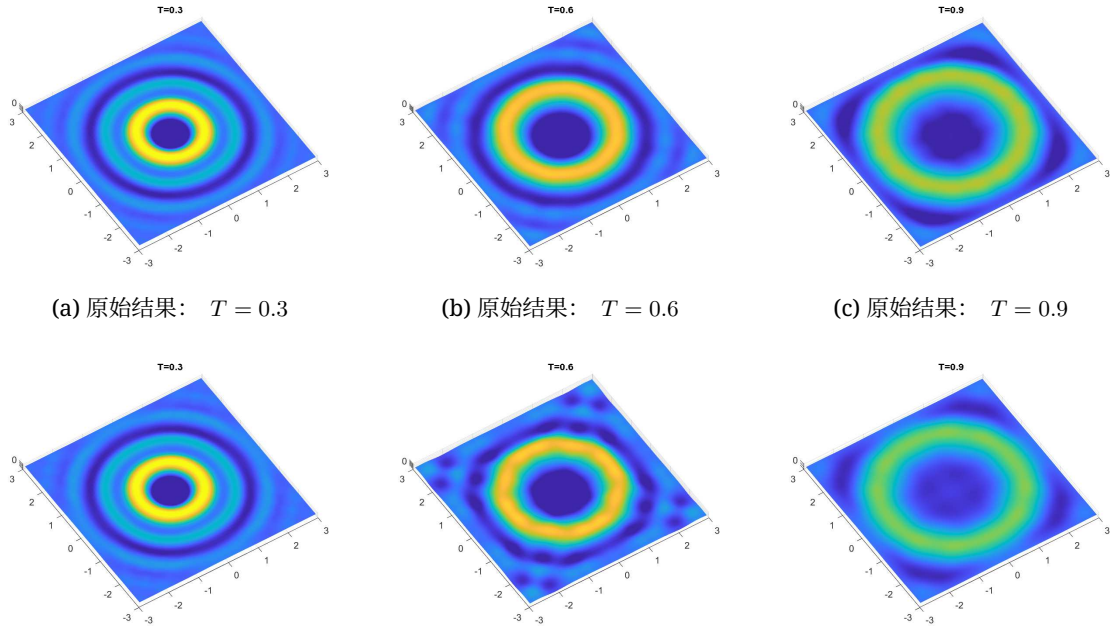
图 3：采用复吸收势方法计算的 ψ 实部快照。上图：对（3）的直接实现；薛定谔¨化形式（20）的实现。

为实现 DtN 方法，可以求解离散边界元方程 [WL20]以确定矩阵 R 在（12）中的值，进而确定（27）中的自能。由于我们的目的是测试薛定谔化方法，我们通过选择一个相对较大的区域 $D \supset \Omega$，并简单地令 $\Omega_{\text{II}} = D \backslash \Omega_{\text{I}}$。对于测试示例，只需选择 $D = [-6, 6]^2$。

由于所有矩阵（$H_{\text{I、I}}$、 $H_{\text{I、II}}$和 $H_{\text{II、II}}$）均可直接从 D上的哈密顿矩阵中提取，因此我们可以通过直接的矩阵求逆和乘法计算式（27）中的矩阵。在式（15）中，我们取 $s_0 = 1$。采用 DtN 人工边界条件的直接模拟可通过求解常微分方程（26）完成。结果显示在图 5 的顶行中。同时，量子算法将利用式（20）以及式（ H_0 和 H_1 ）中的两个矩阵 29 来求解。我们观察到，经典算法能够在不产生边界反射的情况下保持波前的传播形态。基于薛定谔¨化的解也具有类似的表现。细微差异可归因于 p 空间中的离散化。

5 实现　　复杂度的量子算法　　s

将带吸收边界条件的量子动力学转化为哈密顿系统后（20），便可应用哈密顿量模拟算法来生成波函数 $|\psi(T)\rangle$. 由于势可能随时间变化 $V(\boldsymbol{x}, t)$，因此应考虑用于含时哈密顿量$H(t$的哈密顿量模拟算法。为评估实现人工边界条件所涉及的算法复杂度，我们采用 Berry 等人最近的结果 [BCS+20，定理 10], 尽管其他



(a) 原始结果： $T = 0.3$　(b) 原始结果： $T = 0.6$　(c) 原始结果： $T = 0.9$

(d) 薛定谔化： $T = 0.3$　(e) 薛定谔化： $T = 0.6$　(f) 薛定谔化： $T = 0.9$

图4：使用 PML 方法计算得到的 ψ 实部快照。(a-c)：原始形式；(d-f)：薛定谔化形式。

算法可以　　也可用于评估。这里我们仅强调查询复杂度　　，

定理5.1。 含时薛定谔方程 (1) 具有一个 s-稀疏哈密顿量 $H(t)$ 可以从 $t = 0$ 到$t = T$ 进行模拟，误差为 ϵ，查询复杂度为：

$$\mathcal{O}\left(s\|H\|_{max,1}\frac{\log\left(s\|H\|_{max,1}/\epsilon\right)}{\log\log\left(\|H\|_{max,1}/\epsilon\right)}\right). \tag{30}$$

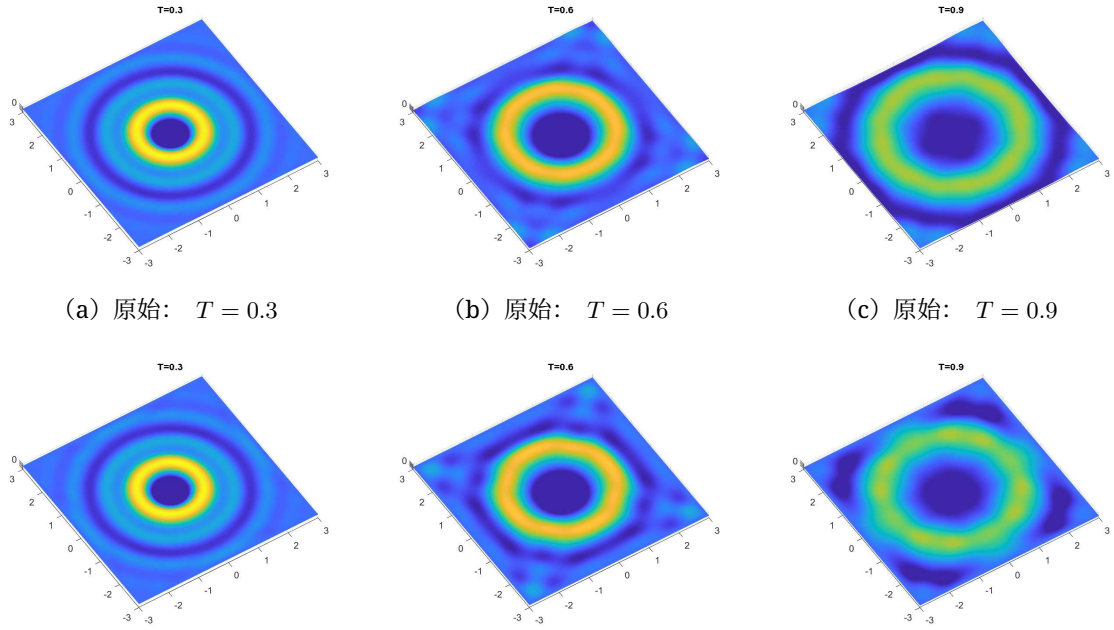
这里范数定义为：

$$\|H\|_{\max,1} = \int_0^T \|H\|_{\max}(t)dt, \quad \|H\|_{\max}(t) := \max_{i,j}|H_{i,j}(t)|. \tag{31}$$

现在我们讨论实现由三种类型的人工边界条件的薛定谔化得到的含时薛定谔方程（¨20）。由于方程（¨17）的离散化误差为 $\mathcal{O}(\Delta p)$（因为 $e^{-|p|}$ 在 p中仅连续但不连续可微），且实空间离散化的误差为 $\mathcal{O}(\Delta x^2)$，我们设定

$$\Delta p = \mathcal{O}\left(\Delta x^2\right) \tag{32}$$

以使离散化误差具有可比性。



（a）原始： $T = 0.3$　（b）原始： $T = 0.6$　（c）原始： $T = 0.9$

（d）薛定谔化： $T = 0.3$　（e）薛定谔化： $T = 0.6$　（f）薛定谔化： $T = 0.9$

图5：使用 DtN 方法计算得到的 ψ 实部快照。(a-c)：原始形式；(d-f)：薛定谔化形式。

表1：实现含时薛定谔方程时的复杂度汇总¨~(20) 由对三种人工边界条件进行薛定谔化得到。该 $\mathcal{O}$ 记号省略了对数因子。

人工边界条件	查询复杂度
复吸收势（CAP）	$\widetilde{\mathcal{O}}\left(\frac{T}{\Delta x^2}+\|V\|_{\max,1}+\frac{T\|W\|_{\max}}{\Delta x^2}\right)$
完美匹配层（PML）	$\widetilde{\mathcal{O}}\left(\frac{T}{\Delta x^2}+\|V\|_{\max,1}+\frac{T\|\sigma\|_{\max}}{\Delta x^3}\right)$
狄利克雷-诺伊曼映射（DtN）	$\widetilde{\mathcal{O}}\left(s_\Sigma\left(\frac{T}{\Delta x^2}+\|V\|_{\max,1}\right)\right)$

复吸收势方法。 对于复吸收势方法，根据（22），可直接得到

$$\|H_0(t)\|_{\max} \le \frac{2}{\Delta x^2}+\max_{i,j}|V(x_i,y_j,t)|+\max_{i,j}|\mathrm{Re}W(x_i,y_j)|,$$
$$\|H_1\|_{\max} \le \max_{i,j}|\mathrm{Im}W(x_i,y_j)|.$$

由此可得

$$\|H\|_{\max}=\|H_0\otimes I-H_1\otimes D_\mu\|_{\max}\le\frac{2}{\Delta x^2}+\|V\|_{\max,1}+\frac{\|W\|_{\max}}{\Delta x^2},$$

其中我们使用了 $\|D_\mu\|=\mathcal{O}(1/\Delta p)$，并结合了 (32)。与此同时， H 的稀疏度为 $s(H)=$

$\mathcal{O}(1)$（对于 d 维情形，其复杂度为 $\mathcal{O}(d)$ 。合并这些估计可得总复杂度，如表 1所示。

PML 方法。 我们考察由（20）和（24）以及（23）中的哈密顿量的大小，

$$\|H_0(t)\|_{\max} = \|\frac{1}{2}(L_h - L_h^\dagger)\|_{\max} \le \|H_V\|_{\max} + (\|\boldsymbol{\sigma}_x\|_{\max} + \|\boldsymbol{\sigma}_y\|_{\max})\,(\|D_x\|_{\max} + \|D_y\|_{\max})$$
$$\le \frac{1}{\Delta x^2} + \max_{i,j}|V(x_i, y_j, t)| + 4\max_i|\sigma(x_i)|\frac{1}{\Delta x}.$$

同样地，我们有，

$$\|H_1\|_{\max} = \|\frac{1}{2}(L_h + L_h^\dagger)\|_{\max} \le (\|\boldsymbol{\sigma}_x\| + \|\boldsymbol{\sigma}_y\|)(\|D_x\| + \|D_y\|) \le 4\max_i|\sigma(x_i)|\frac{1}{\Delta x}.$$

这两个估计给出

$$\|H\|_{\max} \lesssim \frac{1}{\Delta x^2} + \|V\|_{\max} + \|\sigma\|_{\max}\frac{1}{\Delta x \Delta p}.$$

最后，还可以由（24）和（23）推得，稀疏度 s（H） $=\mathcal{O}$为（1）。总复杂度如表 1 的第二行所示。

DtN 方法。 采用 DtN 方法时的查询复杂度列于表1的第三行。为证明这一估计，我们依据方程（27）和（29）。首先，我们注意到 $S = H_{\Gamma,\ \mathrm{II}}H_{\mathrm{II},\ \Gamma}$在（27）中是稀疏的，其元素的阶为 $\frac{1}{\Delta x^4}$. 因此，$\|\Sigma_{\mathrm{I},\ \Gamma}\|_{\max} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right)$. 根据同样的观察，我们推得 $\|R\|_{\max} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right)$. 利用上一节推导出的公式（28），我们得到，$\|G_0\|_{\max} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta x^2}\right)$，但 $\|G_0\|_{\max} = \mathcal{O}$（1）。

将这些估计代入（29），得到

$$\|H(t)\|_{\max} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \|V\|_{\max} + \frac{1}{\Delta p}\right).$$

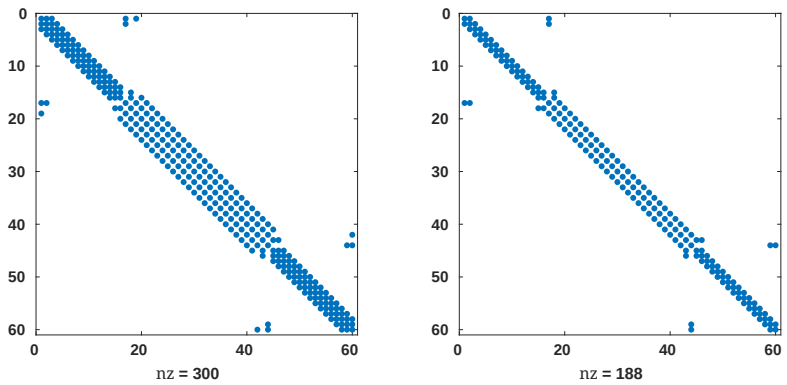


图 6：$\Sigma_{\Gamma,\ \Gamma}$ 的有效稀疏度。左：满足 $|\Sigma_{ij}| > 0.01\|\Sigma_{\Gamma,\ \Gamma}\|_{\max}$ 的条目（百分之一截断）；右：满足 $|b_{ij}| > 0.02\|\Sigma_{\Gamma,\ \Gamma}\|_{\max}$ 的条目（百分之二截断）。$\|\Sigma_{\Gamma,\ \Gamma}\|_{\max}$:= 最大值$_{i,\ j}|\Sigma_{ij}|$.

影响复杂度的另一个因素是（27）中矩阵的稀疏度。对这些矩阵的数值观察表明，它们接近单位矩阵。例如，对于（$\Sigma_{\Gamma,\ \Gamma}$ 在（27）中的矩阵，我们在图6 中绘出了去除远小于其最大范数的元素后的矩阵元素。我们将这种有效稀疏度记为 s_Σ，整体复杂度与 s_Σ呈线性关系。

6 结论

本文采用¨近期在 [JLY22a、JLY22b] 中提出的薛定谔化方法，用于具有人工边界条件（吸收边界条件）的量子动力学。尽管具有人工边界条件的量子动力学不再是最适合量子模拟的厄米哈密顿系统，但薛定谔化方法以简单的方式使其成为厄米哈密顿系统。我们给出三种具有代表性的人工边界条件的实现细节，并估算其计算复杂度，包括复吸收势方法、完美匹配层方法和狄利克雷到诺伊曼方法。数值实验验证了这一方法，表明薛定谔化后的系统与具有吸收边界条件的原始动力学得到相同结果。¨。

我们的方法为有界区域外的量子动力学提供了一种简单的量子模拟算法。正如 [JLY22a、JLY22b], 薛定谔化方法¨不仅适用于具有吸收边界条件的量子动力学，也适用于具有物理边界条件的一般线性偏微分方程，还可应用于具有界面条件的此类方程。这些将是我们未来研究的主题。

致谢

SJ 部分获得了国家自然科学基金项目（编号：12031013）、上海市科技重大项目（2021SHZDZX0102）以及上海市教育委员会创新计划（编号：2021-01-07-00-02-E00087）的资助。NL 感谢中国上海市科技计划（21JC1402900）提供的资助。YY 部分获得了中国博士后科学基金（编号：2022M712080）的资助。XL 获得了宾夕法尼亚州立大学（Penn State）计算与数据科学研究所（ICDS）的种子基金资助。

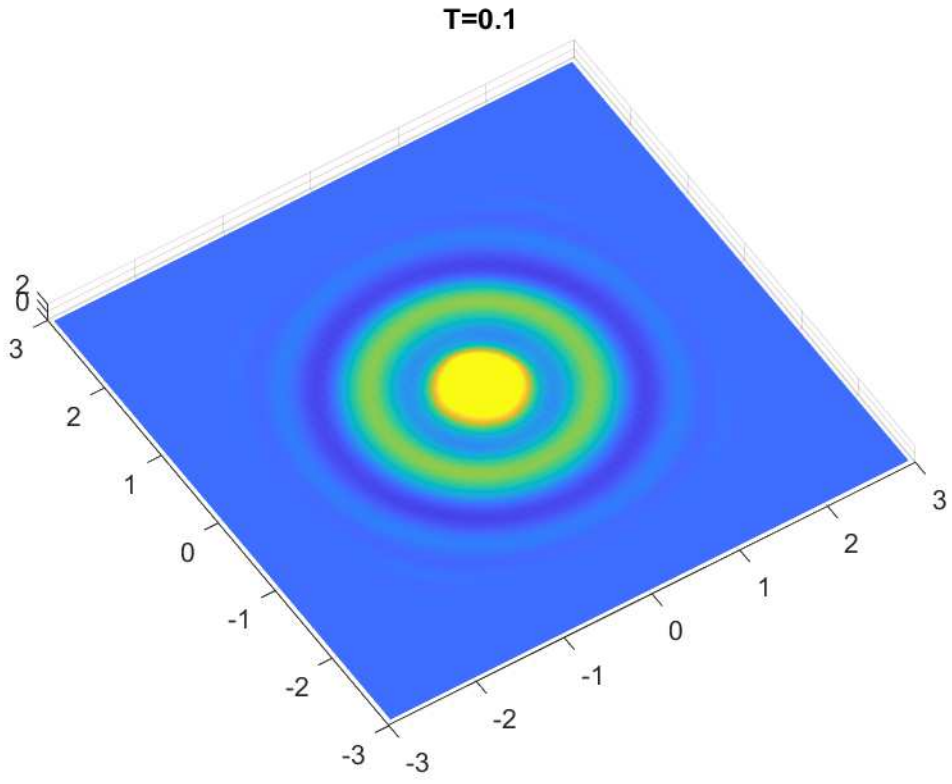
参考文献

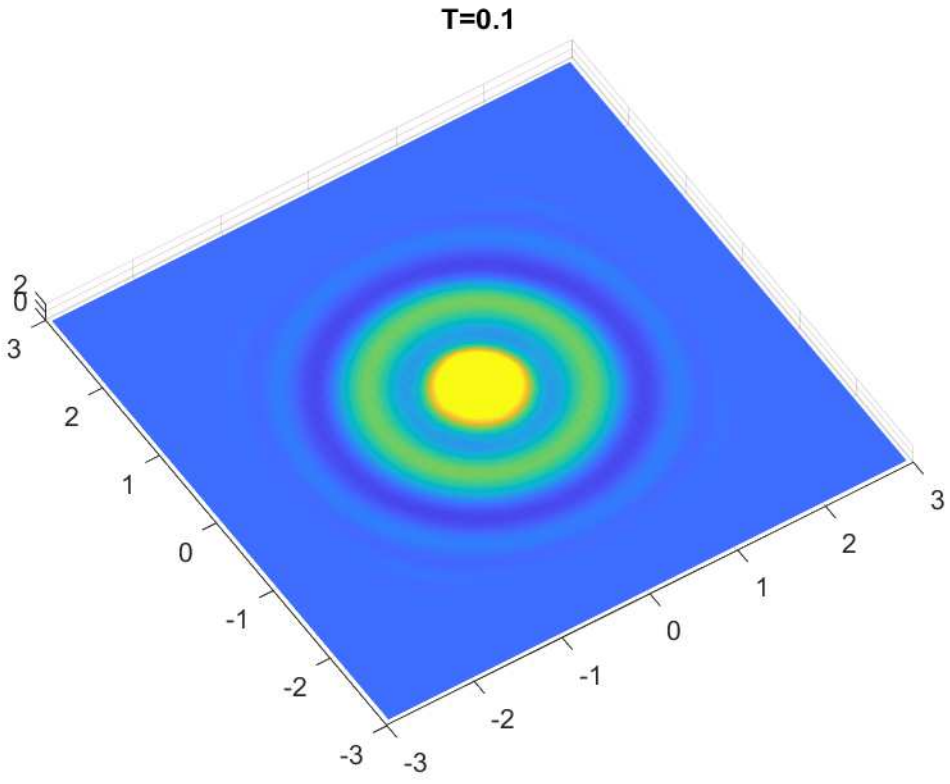
[AAB+08] Xavier Antoine、Anton Arnold、Chritophe Besse、Matthias Ehrhardt 和 Achim Sch¨adle。《线性与非线性薛定谔方程透明边界条件与人工边界条件技术综述》。《计算物理通讯》，4(4):729–796，2008年。[AFL21] Dong An、Di Fang 和 Lin Lin。《采用向量范数缩放的含时无界哈密顿量模拟》。《Quantum》，5:459，2021年。[AFL22] Dong An、Di Fang 和 Lin Lin。《高度振荡动力学的含时哈密顿量模拟及薛定谔方程的超收敛》。《Quantum》，6:690，2022年。[ALL23] Dong An、Jin-Peng Liu 和 Lin Lin。《用于非酉动力学的哈密顿量模拟线性组合及最优态制备成本》。《arXiv》预印本，arXiv:2303.01029，2023年。[ALWZ22] Dong An、Jin-Peng Liu、Daochen Wang 和 Qi Zhao。《量子微分方程求解器理论：局限性与快速前向演化》。《arXiv》预印本，arXiv:2211.05246，2022年。

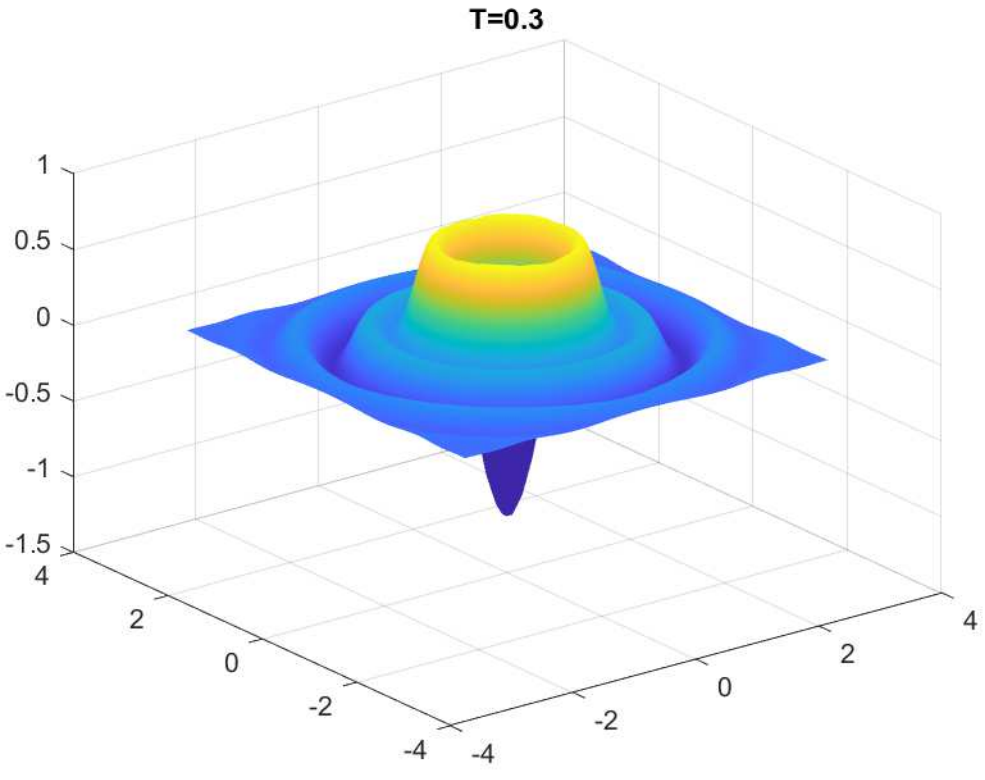
[Arn98] Anton Arnold。《量子演化方程的数值吸收边界条件》。《VLSI设计》，6(1-4):313–319，1998年。[BCC+15] Dominic W Berry、Andrew M Childs、Richard Cleve、Robin Kothari 和 Rolando D Somma。《利用截断泰勒级数模拟哈密顿动力学》。《物理评论快报》，114(9)，2015年。[BCC+17] Dominic W Berry、Andrew M Childs、Richard Cleve、Robin Kothari 和 Rolando D Somma。《模拟稀疏哈密顿量时精度的指数级提升》。《数学论坛：西格玛》，5，2017年。[BCK15] Dominic W Berry、Andrew M Childs 和 Robin Kothari。《对所有参数具有近乎最优依赖关系的哈密顿量模拟》。《第56届IEEE计算机科学基础研讨会论文集》（FOCS 2015），2015年。[BCOW17] Dominic W Berry、Andrew M Childs、Aaron Ostrander 和 Guoming Wang。《精度依赖关系得到指数级改善的线性微分方程量子算法》。《数学物理通讯》，356(3):1057–1081，2017年。[BCS+20] Dominic W Berry、Andrew M Childs、Yuan Su、Xin Wang 和 Nathan Wiebe。《采用 L^1-范数缩放的含时哈密顿量模拟》。《Quantum》，4:254，2020年。[Ber94] Jean-Pierre Berenger。《用于吸收电磁波的完美匹配层》。《计算物理学杂志》，114(2):185–200，1994年。[BMO+02] Mads Brandbyge、Jos´e-Luis Mozos、Pablo Ordej´on、Jeremy Taylor 和 Kurt Stokbro。《用于非平衡电子输运的密度泛函方法》。《物理评论B辑》，65(16):165401，2002年。[CGJ19] Shantanav Chakraborty、Andr´as Gily´en 和 Stacey Jeffery。《块编码矩阵幂的威力：通过更快的哈密顿量模拟改进回归技术》。《第46届国际自动机、语言与编程研讨会论文集》（ICALP 2019），2019年。[CKS17] Andrew M Childs、Robin Kothari 和 Rolando D Somma。《精度依赖关系得到指数级改善的线性方程组量子算法》。《SIAM计算杂志》，46(6):1920–1950，2017年。[CL19] Andrew M Childs 和 Jin-Peng Liu。《用于微分方程的量子谱方法》。《arXiv》预印本，arXiv:1901.00961，2019年。[EM79] Bjorn Engquist 和 Andrew Majda。《声波与弹性波计算的辐射边界条件》。《纯粹与应用数学通讯》，32:313–357，1979年。[FLT23] Di Fang、Lin Lin 和 Yu Tong。《用于含时线性微分方程的基于时间推进的量子求解器》。《Quantum》，7:955，2023年。

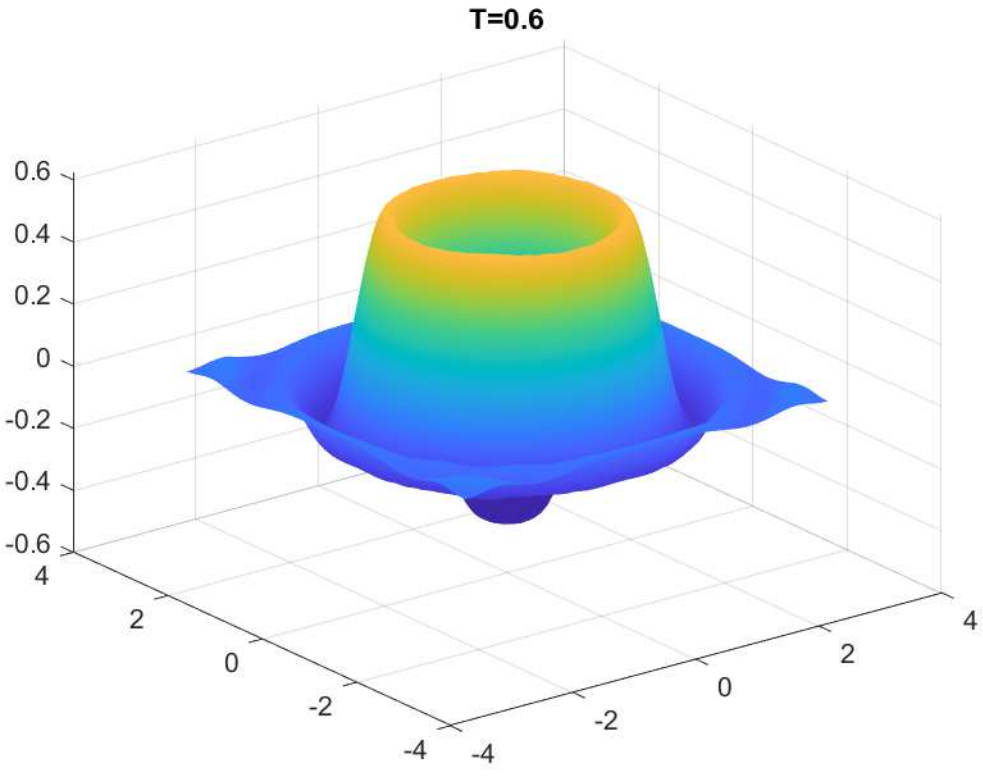
[GSLW19] Andr´as Gily´en、Yuan Su、Guang Hao Low 和 Nathan Wiebe。《量子奇异值变换及其拓展：量子矩阵算术的指数级改进》。载于第51届 ACM SIGACT 计算理论研讨会论文集，第193–204页，2019年。[HH04] Houde Han 和 Zhongyi Huang。《薛定谔方程的精确人工边界条件》，发表于《数学科学通讯》2(1):79–94，2004年。[HHL09] Aram W. Harrow、Avinatan Hassidim 和 Seth Lloyd。《用于求解线性方程组的量子算法》，发表于《物理评论快报》103(15):150502，2009年10月。arXiv: 0811.3171。[Hid19] J. D Hidary。《量子计算：一种应用方法》。施普林格，2019年。[HRB07] F He、C Ruiz 和 A Becker。《利用外部复缩放，在网格上对含时薛定谔方程进行数值求解时采用的吸收边界》，发表于《物理评论A辑》75(5):053407，2007年。[JLY22a] Shi Jin、Nana Liu 和 Yue Yu。《通过薛定谔化实现偏微分方程的量子模拟》。arXiv:2212.13969，2022年。[JLY22b] Shi Jin、Nana Liu 和 Yue Yu。《通过薛定谔化实现偏微分方程的量子模拟：技术细节》。arXiv:2212.14703，2022年。[Kro22] Hari Krovi。《用于线性和非线性微分方程的改进量子算法》。arXiv 预印本 arXiv:2202.01054，2022年。[KSB19] M´aria Kieferov´a、Artur Scherer 和 Dominic W Berry。《利用截断的戴森级数模拟含时哈密顿量的动力学》，发表于《物理评论A辑》99(4):042314，2019年。[LC17] Guang Hao Low 和 Isaac L Chuang。《通过量子信号处理实现最优哈密顿量模拟》，发表于《物理评论快报》118(1)，2017年。[LC19] Guang Hao Low 和 Isaac L Chuang。《通过量子比特化实现哈密顿量模拟》，发表于《Quantum》3:163，2019年。[Li09] Xiantao Li。《固体分子静力学模型的高效边界条件》，发表于《物理评论B辑》80(10):104112，2009年。[Li12] Xiantao Li。《用于约化分子静力学模型的基于原子模型的边界元法》，发表于《计算力学与工程方法》225:1–13，2012年。[MPNE04] JG Muga、JP Palao、B Navarro 和 IL Egusquiza。《复吸收势》，发表于《物理学报告》395(6):357–426，2004年。[MR09] Per-Gunnar Martinsson 和 Gregory J Rodin。《晶格问题的边界代数方程》，发表于《英国皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》465(2108):2489–2503，2009年。

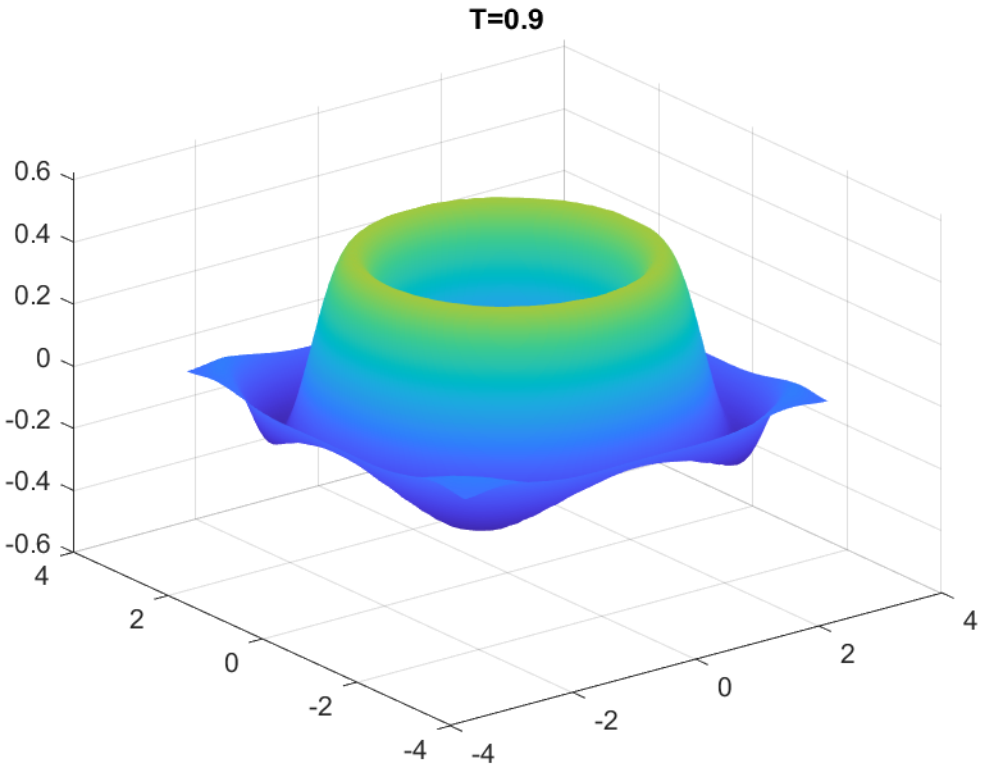
[NC02] Michael A Nielsen 和 Isaac Chuang。《量子计算与量子信息》。美国物理教师协会，2002年。[NK11] Anna Nissen 和 Gunilla Kreiss。《薛定谔方程的优化完美匹配层》，发表于《计算物理通讯》9(1):147–179，2011年。[Pre18] J. Preskill。《NISQ时代及其之后的量子计算》，发表于《Quantum》2:79，2018年。[RM96] UV Riss 和 H-D Meyer。《复吸收势的反射与透射特性研究》，发表于化学物理学杂志105(4):1409–1419，1996年。[RP11] E. G Rieffel 和 W. H Polak。《量子计算：简明入门》。麻省理工学院出版社，2011年。[SE00] EY Sidky 和 BD Esry。《利用含时薛定谔方程实现无边界传播》，发表于《物理评论快报》85(24):5086，2000年。[WL20] Xiaojie Wu 和 Xiantao Li。《含时薛定谔型方程的吸收边界条件》，发表于《物理评论E辑》101(1):013304，2020年。[YE18] Youliang Yu 和 BD Esry。《用于超快强场问题的优化吸收势》，发表于《物理学杂志B辑：原子、分子与光学物理》51(9):095601，2018年。[Zhe07] Chunxiong Zheng。《非线性薛定谔波动方程的完美匹配层方法》，发表于《计算物理学杂志》227(1):537–556，2007年。

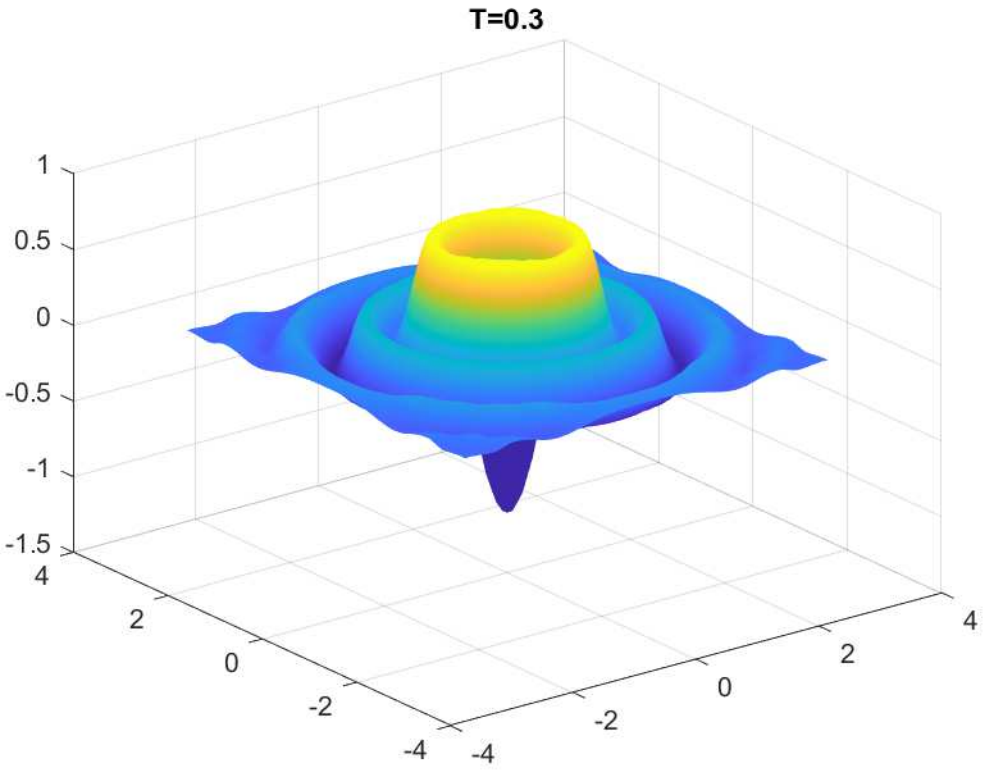

T=0.1
2
0
3
2
1
0
-1
-2
-3
-3
-2
-1
0
1
2
3

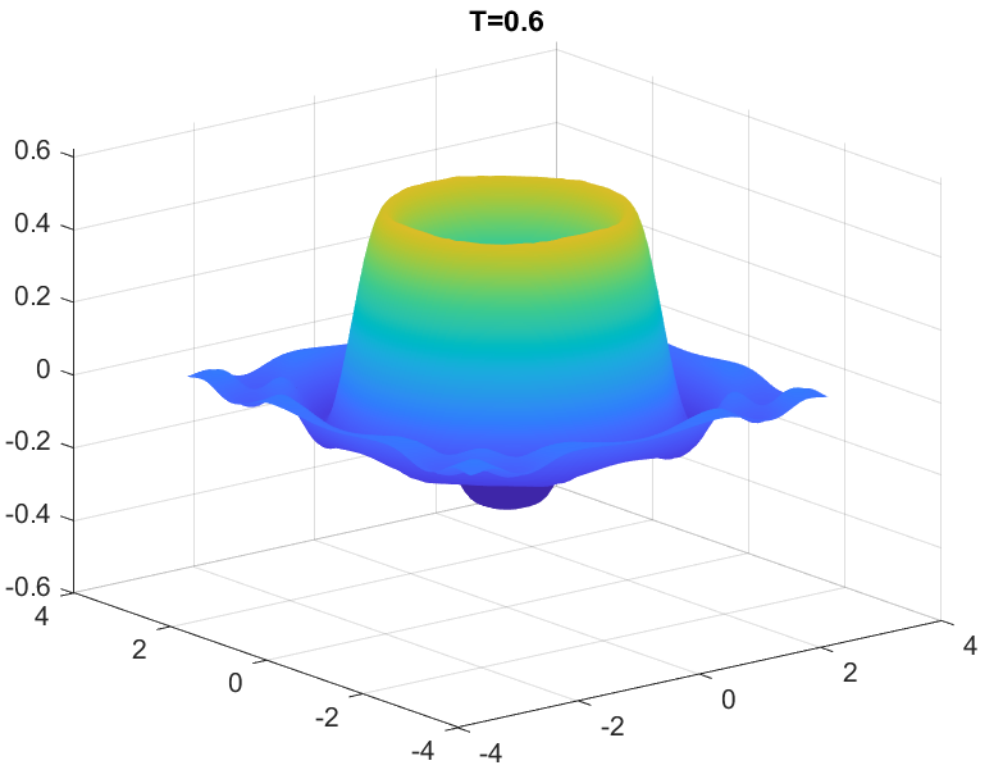

T=0.1
2
0
3
2
1
0
-1
-2
-3
-3
-2
-1
0
1
2
3

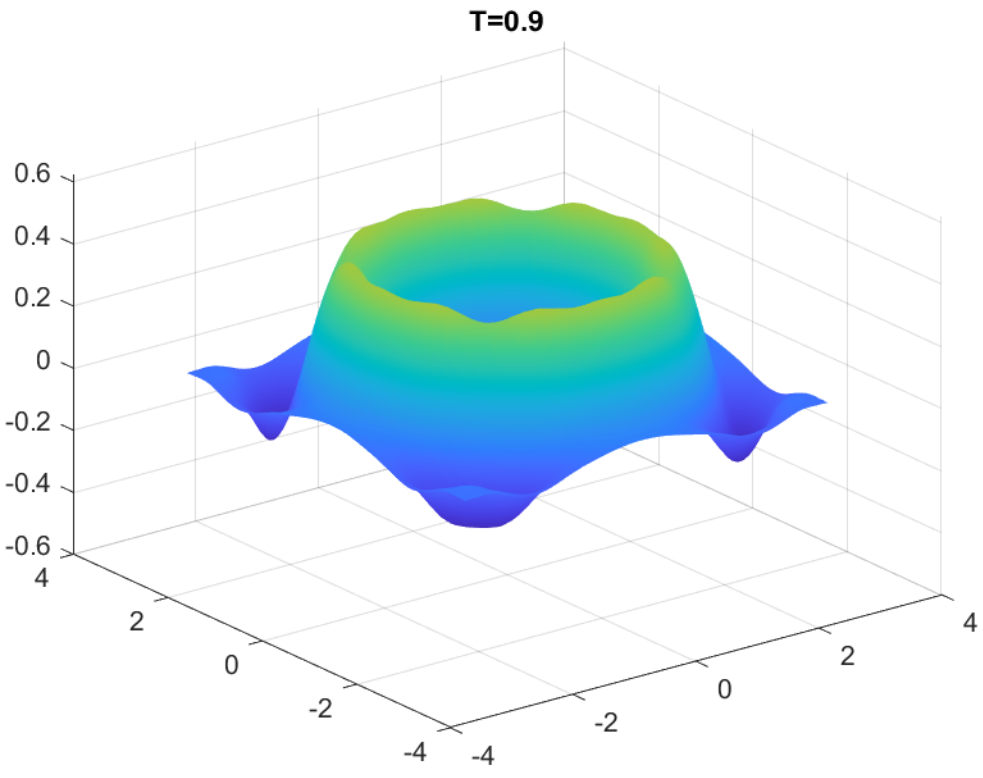

T=0.3
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4

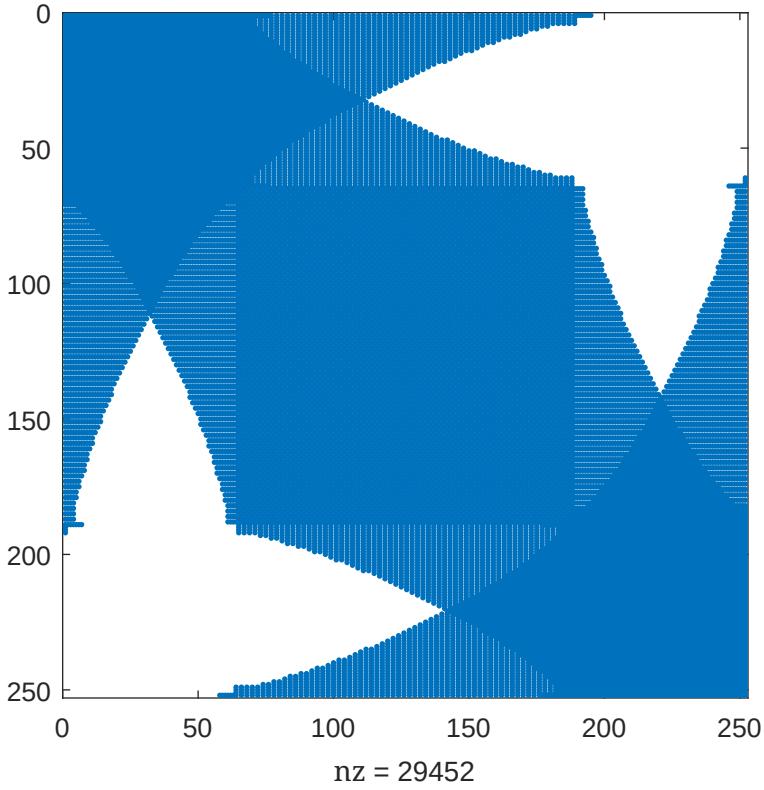

T=0.6
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4

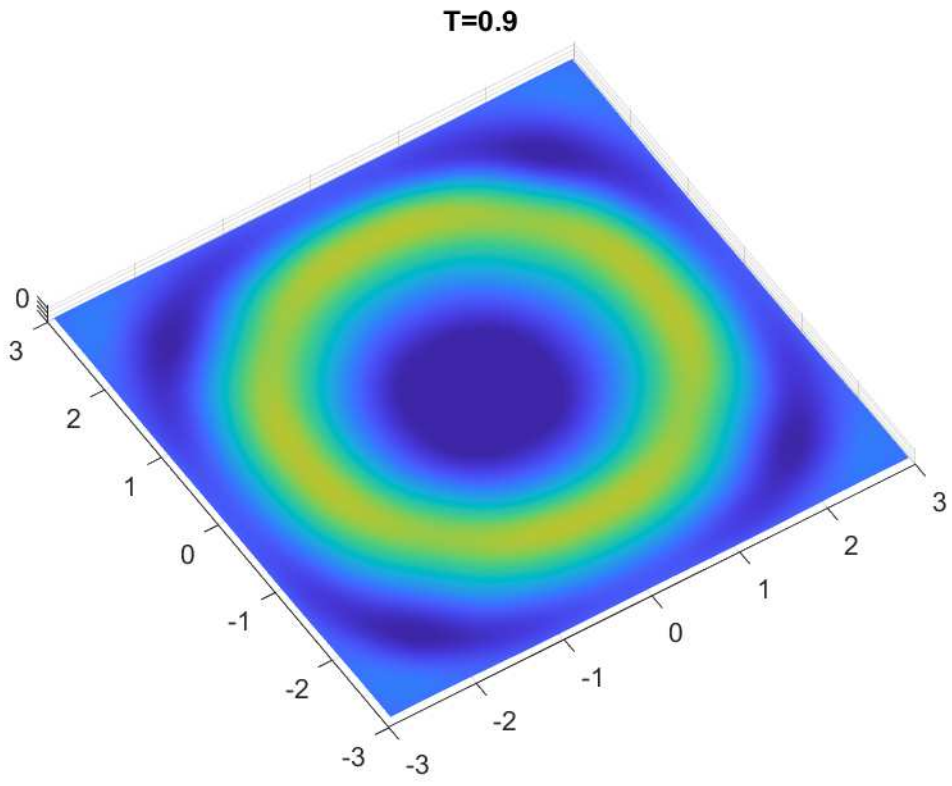

T=0.9
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4


T=0.3
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4


T=0.6
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4


T=0.9
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
4
2
0
-2
-4
-4
-2
0
2
4


0
50
100
150
200
250
0
50
100
150
200
250
nz = 29452


T=0.9
0
3
2
1
0
-1
-2
-3
-3
-2
-1
0
1
2
3