通过哈密顿量嵌入实现输运现象的资源高效量子模拟

Joseph Li,[1,2] Gengzhi Yang,[2,3] Jiaqi Leng,[4,5] 和 Xiaodi Wu[1, 2, *]

[1] *Department of Computer Science, University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA*

[2] *Joint Center for Quantum Information and Computer Science,University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA*[3] *Department of Mathematics, University of Maryland, College Park, Maryland 20742, USA*[4] *Simons Institute for the Theory of Computing, UC Berkeley, California 94709, USA*[5] *Department of Mathematics, UC Berkeley, Berkeley, California 94709, USA*

（日期：2026年2月4日）

输运现象在众多应用领域中发挥着关键作用，而对这类动力学进行高效模拟仍是一项重大挑战。尽管量子计算机有望带来显著加速，但现有算法要么缺乏严谨的理论保证，要么需要大量量子资源，因而无法在真实量子硬件上实现可扩展、高效的验证。为弥补这一不足，我们构建了一个用于模拟多类输运方程的综合框架，既提供严谨的理论保证（包括在特定情况下实现指数级加速），又支持系统化且硬件高效的实现。我们方法的核心是哈密顿量嵌入技术，这是一种用于端到端模拟稀疏哈密顿量的白盒方法，能够避免抽象的查询模型，同时保持近乎最优的渐近复杂度。资源估算的实证结果表明，在问题结构有利时，我们的方法可使电路深度降低一个数量级（例如， 42×）。随后，我们运用该框架求解线性和非线性输运偏微分方程，并首次在囚禁离子量子计算机上实验演示了二维平流方程。

arXiv:2602.03099v1 [quant-ph] 3 Feb 2026

I. 引言

输运现象是理解自然界各个尺度过程的基础，在流体动力学 [1, 2], 化学反应 [3, 4], 和热力学 [5]研究中发挥着基石作用。偏微分方程（PDE）是输运动力学建模的核心。尽管人们通常希望获得这些模型的数值解，以促进科学研究或工程设计，但它们大多局限于低维情形，因为计算成本通常随模型维度呈指数级增长。这使得传统方法难以承受对高维输运现象的精确建模，例如相空间 [6], 参数空间 [7], 或多组分化学扩散 [8], 中的现象。

量子计算为模拟大规模动力学提供了一种替代方案，也是一种颇具潜力的新范式，适用于模拟固有的量子现象 [9]以及复杂的经典过程 [10, 11]。鉴于输运动力学通常涉及大量自由度并呈现波状行为，对这类现象进行量子模拟已成为一个受到广泛关注的活跃研究领域 [12–16]。

现有用于模拟偏微分方程的量子算法主要分为两类。第一种方法采用变分量子算法（VQAs）制备表示微分方程解的量子态 [17–22]。尽管这些方法资源效率较高且已在真实量子硬件上得到演示，但它们往往无法提供理论保证，因此在实际问题中的可扩展性尚不明确。第二种方法基于在容错量子计算机上实现的量子子程序，例如量子线性系统求解器（QLSS） [11, 23–25] 和哈密顿量模拟 [12, 13, 26–30]。对于某些具有特定结构的动力学模拟，这些量子算法能够相较于经典算法实现可证明的（有时是指数级的）量子加速。然而，即使对于低维线性偏微分方程，要在近期和中期量子硬件上实现这些优势仍然充满挑战。一个核心瓶颈是量子输入模型：必须构造相干电路来编码问题数据（例如偏微分方程系数）。现有方法，例如稀疏输入预言机 [31], 、块编码 [32], 和量子随机存取存储器（QRAM） [33], ，通常代价高昂，远超当前量子器件的能力。

近期，有人提出了一种称为哈密顿量嵌入 [34] 的新技术，旨在减轻复杂量子输入模型带来的巨大开销，尤其是在稀疏哈密顿量模拟中。在这种情况下，目标是在演化时间 t内实现稀疏厄米矩阵 A 对应的酉算子 e^{-itA} 。现有算法在复杂性理论意义上 通常是高效的，即只需对矩阵元素进行多项式次黑箱（预言机）查询，就能实现高精度模拟。然而，实现这些预言机的成本往往未被明确说明，也缺乏审慎分析。哈密顿量嵌入则采用白盒 方法，将目标稀疏哈密顿量 A显式映射到一个更大的量子比特哈密顿量中（即嵌入

* xiaodiwu@umd.edu

哈密顿量），该哈密顿量仅由局域泡利算符组成。随后，可以在数字或模拟硬件上高效模拟这一哈密顿量。对于具有结构的稀疏哈密顿量族，嵌入哈密顿量可用 n个量子比特实现，且至多包含 n^2 2量子比特相互作用，其中 n 相对于 A的规模呈对数级增长，为实现指数级量子优势开辟了道路。

本文提出一种框架，将哈密顿量嵌入融入量子偏微分方程求解器，以实现输运动力学的资源高效量子模拟。该框架具有三大优势。（1）严格的性能保证：对于某些类别的输运方程，我们证明，在容错设备上实现时，我们的算法能够实现指数级量子加速。（2）面向硬件的编译：哈密顿量嵌入可根据目标平台支持的原生操作进行定制，从而能够直接编译至量子门级，甚至脉冲级。此外，我们针对不同类别的偏微分方程提供了以量子门数量和电路深度衡量的资源估算，并根据问题结构确定最高效的实现方案。（3）真实机器验证：我们在离子阱量子计算机（IonQ Aria-1）上实现了该方法，用于模拟二维平流方程。据我们所知，这是文献中首个此类真实硬件演示 [13, 19, 30, 35]。

我们的框架包含两个主要步骤，如图 1 所示。首先，由于大多数输运偏微分方程都是非酉过程，因此在通过量子模拟求解之前，需要将其映射为量子演化过程。在本工作中，我们采用 Schr¨odinger 化技术 [36]。请注意，对于由非线性偏微分方程支配的输运动力学，还需要额外的线性化步骤；参见第 V 节的讨论。其次，经过空间离散化后，Schr¨odinger 化的输运偏微分方程被化为稀疏哈密顿量模拟问题，并通过哈密顿量嵌入 [34]，使用量子电路实现。

从理论上讲，对于空间离散化后具有稀疏张量积结构的偏微分方程，我们证明了该框架可实现指数级量子加速。这类问题涵盖了经典计算难以处理的问题，例如空间变化的
平流方程和非线性标量双曲偏微分方程。我们的框架主要依赖算法 1，这是一种将哈密顿量嵌入与 Schr¨odinger 化和理查森外推相结合的量子常微分方程求解器。当应用于 d 空间维度中的输运偏微分方程时，我们的算法使用 $\mathcal{O}(d)$ 个量子比特，其门复杂度关于 d 呈多项式关系，这表明相较于基于经典网格的算法可实现指数级加速。有关该算法的更多细节，包括演化时间和模拟误差方面的近最优参数依赖关系，参见定理 1。

我们展示了该框架在两类基础

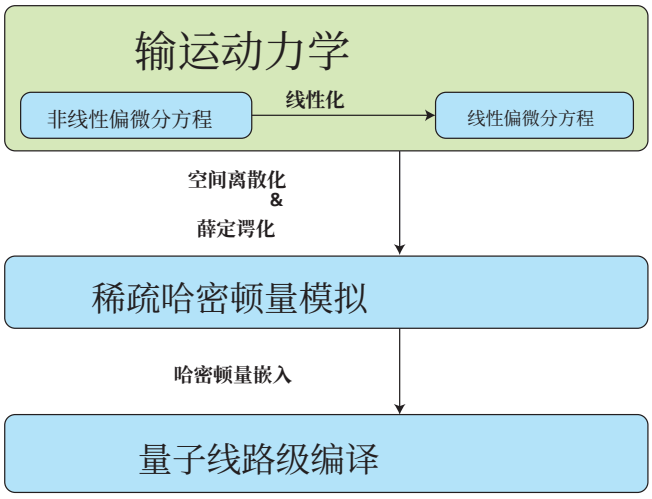

图 1. 通过哈密顿量嵌入实现量子偏微分方程求解器的示意图。

输运偏微分方程中的应用，包括线性平流方程（第 IV 节）和非线性标量双曲方程（第 V 节）。这些方程在大气科学和环境科学中无处不在 [3, 37]，，并构成流体动力学中更复杂模型的基础 [38]。对于这两类方程，我们讨论了其在量子计算机上的实现，并进行了广泛的资源分析。对于线性平流方程，采用门级并行化时，我们的哈密顿量嵌入方法（使用独热嵌入）可得到电路深度最浅的量子电路。对于非线性标量双曲偏微分方程，我们发现，一元编码和独热嵌入在电路深度和双量子比特门数量方面均优于标准二进制编码，优势约达一个数量级。

本文结构如下。在第二节中，我们介绍基于哈密顿量模拟的量子偏微分方程求解器所需的背景知识，并引入哈密顿量嵌入技术。我们还简要回顾偏微分方程数值模拟的真实量子设备演示现有成果及其局限性。在第三节中，我们建立通过哈密顿量嵌入模拟输运偏微分方程的一般框架，并对渐近门数进行复杂度分析。在第四节和第五节中，我们分别将量子算法应用于线性平流方程和非线性双曲型偏微分方程。对于每一种输运动力学模型，我们构造其相应的嵌入哈密顿量，执行数值模拟，并基于实际门数量进行资源分析。我们还展示了使用 IonQ Aria-1 处理器模拟二维平流方程。在第六节中，我们通过讨论作出总结。

II. 背景

A. 薛定谔化

薛定谔化是一种将线性、非幺正动力学转换为由薛定谔方程描述的幺正偏微分方程的技术。考虑一个在 d 个空间维度中随时间演化的线性偏微分方程。为了应用薛定谔化，需要在空间上进行离散化，以得到一个线性常微分方程:

$$\frac{\mathrm{d}u(t)}{\mathrm{d}t} = Au(t), \qquad u(0) = u_0, \tag{1}$$

其中，$A \in \mathbb{C}^{N^d \times N^d}$, $u(t) \in \mathbb{C}^{N^d}$，且 N 是每个维度上的网格点数。A 的结构取决于所关注的偏微分方程及空间离散化方案；采用有限差分时，A 通常是稀疏的。我们始终用其笛卡尔分解 $A = H_1 + iH_2$来表示 A，其中 $H_1 = \frac{A+A^\dagger}{2}$ 和 $H_2 = \frac{A-A^\dagger}{2i}$ 均为厄米矩阵。为保证稳定性，假设H_1为负半定。请注意，这一假设仅是技术性条件，并且始终可以通过引入全局衰减率来满足。

对于许多有趣的偏微分方程，实部 H_1非零，从而导致非幺正动力学。薛定谔化利用扭曲相位变换 [27]: $u(t) \mapsto v(t,\ p) = e^{-p}u(t)$（其中 $p > 0$ 是一个辅助变量），将非幺正动力学映射为薛定谔型方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}v(t,p) &= -H_1\frac{\partial}{\partial p}v(t,p) + iH_2 v(t,p) \\ v(0,p) &= e^{-|p|}u_0. \end{aligned} \tag{2}$$

通过使用诸如 [39], 的哈密顿量模拟算法，可以证明 Schr¨odingerization 的量子门复杂度为 $\widetilde{\mathcal{O}(T/\epsilon)}$，假设 p 的离散步长选为 $\Delta p \sim \epsilon$。

值得注意的是，另一种密切相关的框架，即哈密顿量模拟的线性组合（LCHS） [28], ，也可用于将非酉过程映射为哈密顿量演化。对于近期实现，LCHS 的混合实现需要通过重要性抽样程序执行许多随机选取的量子电路。我们发现，在电路执行总次数相同的情况下，两种方法的性能相近（见附录 G）。在本工作中，我们专注于 Schr¨odingerization，因为它只需一个量子电路。

B. 哈密顿量嵌入

哈密顿量嵌入将模拟稀疏哈密顿量 H 的问题，转化为模拟具有形式 $H = \sum_j c_j H_j$ 的局域哈密顿量的问题，其中H_j是局域算符 [34]。尽管这类映射已知存在，且构成哈密顿量复杂性理论的基石 [40], ，但很少用于算法目的。哈密顿量嵌入通过引入辅助量子比特，提供˜显式（即“白盒”）的嵌入哈密顿量 H 构造，从而解决这一问题。采用适当的（考虑硬件特性的）嵌入方案后，˜ H 的局域性可能远低于 H。从这个角度看，哈密顿量嵌入可视为一种时间-空间权衡：通过使用更大的希尔伯特空间来降低局域性。下文将介绍微扰哈密顿量嵌入，以及针对某些稀疏矩阵的显式构造。

令 H 为一个 n 维厄米算符，记作问题哈密顿量。假设存在一个 q 量子比特算符 Q和子空间 $\mathcal{S}$，使得 $Q|_{\mathcal{S}} = H$。考虑另一个 q 量子比特算符 H^{pen}，其基态能量子空间恰为 $\mathcal{S}$。H^{pen} 称为 惩罚哈密顿量，$\mathcal{S}$ 称为嵌入子空间。于是，可以构造一个嵌入哈密顿量

$$\widetilde{H} = gH^{\mathrm{pen}} + Q. \tag{3}$$

相对于 $\mathcal{S}$和 $\mathcal{S}^\perp$，非对角块记为˜ $R := P_{\mathcal{S}^\perp} H P_{\mathcal{S}}$（其中 $P_{\mathcal{S}}$ 和 $P_{\mathcal{S}^\perp}$ 为投影算符）。当 $\|R\|$相对于 g足够小时，H 的动力学˜可由 H在 $\mathcal{S}$上的受限动力学近似。具体而言，参考文献 [34, 定理 1 和 3] 表明，模拟误差有如下界:

$$\left\| \left(e^{-i\widetilde{H}t} \right) \Big|_{\mathcal{S}} - e^{-iHt} \right\| \le (2\eta\|\widetilde{H}\| + \epsilon)t, \tag{4}$$

其中，t 为演化时间，$\eta \sim \|R\|/g$ 和 $\epsilon \sim \|R\|/g$。

对于应用而言，我们不仅需要对 H进行嵌入，还需要使用同一个嵌入子空间$\mathcal{S}$对可观测量 O 和输入态 $|\psi\rangle$进行嵌入。因此，哈密顿量嵌入可视为将三元组（H，O，$|\psi\rangle$）映射为（$\widetilde{H}$，$\widetilde{O}$，$|\widetilde{\psi}\rangle$）。我们注意到，对于一个 n H $\mathcal{S}$ =量子比特哈密顿量，取对应于平凡嵌入（，，） $\mathbb{C}^{2^n}$ H O $|\psi\rangle$ $\mapsto$ （H，O，$|\psi\rangle$）。由于每个 n比特比特串都可以视为整数 $j \in \{0, \ldots, 2^{n-1}\}$的二进制表示，因此这种嵌入被称为标准二进制编码。

针对多种稀疏矩阵结构，研究者提出了微扰哈密顿量嵌入的显式构造方法。具体而言，这些嵌入特别适用于带状矩阵和带状循环矩阵，但也可用于一般的稀疏矩阵。这些嵌入方案与一元编码和独热编码等替代编码系统相关，与标准二进制编码形成对比。

将哈密顿量嵌入直接应用于一般的非结构化 $n \times n$ 矩阵，可能需要 $\mathcal{O}(n)$个量子比特和 $\mathcal{O}(n^2)$项，从而抵消潜在的指数级量子加速。不过，文献 [34]表明，哈密顿量嵌入技术保留了问题哈密顿量的张量积结构。换言之，当 H 具有适当的张量积结构时，可以利用规模仅为

polylog(n)的资源来构造。哈密顿量嵌入的这一特性带来了实现指数级量子加速的可能性，具体取决于底层应用。

C. 相关工作

早期的量子偏微分方程求解器依赖量子线性系统求解器 [11, 41], ，而变分量子算法因资源需求较低而日益受到关注。文献 [17]利用多个变分量子态副本求解非线性偏微分方程；类似方法也被用于求解 Burgers 方程 [42]。文献 [43] 提出了一种基于张量网络的方法，用于模拟一维线性欧拉方程。迄今为止，这些变分方法仅适用于低维问题，且缺乏可证明量子加速的证据。

近期具有理论保证的偏微分方程量子模拟算法，主要利用哈密顿量模拟算法。文献 [12] 提出了一种求解平流方程的算法：在每个时间步中，将非幺正时间演化算符嵌入哈密顿量模拟。Sato 等人 [13] 展示了通过贝尔基对有限差分算子进行高效分解的方法，并据此模拟具有幺正动力学的简单平流方程和波动方程。随后，这种方法与 Schr¨odingerization 相结合，用于模拟非幺正动力学 [44]。尽管这种策略仅适用于常系数偏微分方程，文献 [14]仍通过逻辑最小化开发了一种模拟空间变化系数偏微分方程的算法。尽管取得了这些进展，这些算法的执行仍需要大型容错量子计算机，实验演示也仍然有限（文献 [13]展示了在 3 个量子比特上模拟一维波动方程）。

III. 通过哈密顿量嵌入实现量子偏微分方程求解器

我们用于模拟输运动力学的通用框架基于以下问题:

问题 1（模拟 k阶线性偏微分方程）。 设$d \geq 1$、 $x \in \mathbb{R}^d$，并考虑线性偏微分方程

$$\begin{aligned} &\frac{\partial y}{\partial t} = F\left(x, y, D_x y, \ldots, D_x^k y\right), \\ &y(0,x) = y_0(x) \end{aligned} \tag{5}$$

其中 y: $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 且 F: $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \times \cdots \times \mathbb{R}^{d^k} \to \mathbb{R}$ 是线性的。给定可观测量 $f(x)$: $\mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$、演化时间 $T > 0$和精度 $\epsilon > 0$，我们考虑如下任务：计算与 $\int_{x\in\mathbb{R}^d} \mathrm{d}x\, y(T, x)^\dagger f(x) y(T, x)$相差不超过 ϵ 的近似值。

问题 1 描述了对一般 k 阶线性偏微分方程的模拟，其中包括平流扩散方程、Black-Scholes 方程或麦克斯韦方程等实例。通过对非线性偏微分方程进行线性表示，它还可扩展至某些非线性偏微分方程，例如标量双曲型偏微分方程或 Hamilton-Jacobi [45]。它不包括其他非线性偏微分方程，例如黏性伯格斯方程或非线性反应扩散方程（后者可通过卡尔曼线性化 [11, 46]求解）。

本文重点研究 d 个空间维度中的输运动力学，具体应用决定其为线性还是非线性。对于存在非线性的情况，我们首先应用线性化过程，将非线性偏微分方程映射为形式为（5）的线性偏微分方程；线性化过程是标准的 [11, 47–49], ，为简洁起见，此处不再赘述。

给定一个线性偏微分方程，我们对空间进行离散化，得到维数为 N^d 的线性常微分方程组，其中 N 是每个（空间）维度上的网格点数。随后，通过薛定谔化 [27], 将离散化后的偏微分方程映射为一个酉过程（由稀疏哈密顿量描述），再通过哈密顿量嵌入 [34] 实现其在近期和中期设备上的资源高效实现。整体算法见算法 1。

算法 1： 基于
哈密顿量嵌入

输入： 系数矩阵 $A = H_1 + iH_2$，可观测量 O，演化时间 T，精度 ϵ
输出： $u(t)^\dagger O u(t)$ 的估计值，其中 $u(t)$ 是 (7) 的解。

1 对于 $k = 1, \ldots, d$，为这些项选择一种嵌入 $h^{(1)}_{j\,k}$,以及 $h^{(2)}_{j\,k}$,由 H_1 和 H_2 组成，如式（10）所示。

2 使用哈密顿量嵌入将 $(H, O, u(0))$ 映射为 $\widetilde{(H,O,}\widetilde{u}(0))$。

3 应用薛定谔化来模拟嵌入后的 ODE:

$$\frac{\mathrm{d}\widetilde{u}(t)}{\mathrm{d}t} = \widetilde{H}\widetilde{u}(t), \qquad \widetilde{u}(0) = \widetilde{u}_0, \tag{6}$$

使用 q 阶分阶段乘积公式进行哈密顿量模拟和理查森外推，误差容限为 ϵ。

4 返回 ϵ 精度的 $\widetilde{u}(T)^\dagger \widetilde{O} \widetilde{u}(T)$ 估计值。

A. 空间离散化与薛定谔化

本文考虑采用有限差分格式或傅里叶谱方法进行的欧拉离散化。

当每个维度使用 N 个网格点时，沿每个维度的离散误差通常为

$\epsilon = \mathcal{O}(1/N)$，采用有限差分（例如迎风格式）时。对于具有 d 个空间变量的偏微分方程，要达到总体误差 ϵ，需要使用 $N = \mathcal{O}(d/\epsilon)$。当某个维度施加周期边界条件时，我们也可以改用傅里叶谱方法。谱方法相较于有限差分格式的优点在于能够实现谱收敛，即对于所有整数 k [50]，误差的下降速度都快于 $O(1/N^k)$。需要指出的是，最合适的离散化格式取决于问题的结构，并不存在一种普遍适用的最佳方法。

对 (5) 进行空间离散化，并在每个维度上使用 N 个网格点后，我们得到一个 N^d 维线性常微分方程：

$$\frac{\mathrm{d}u(t)}{\mathrm{d}t} = Au(t), \qquad u(0) = u_0, \tag{7}$$

其中 $A \in \mathbb{C}^{N^d \times N^d}$ 且 $u \in \mathbb{C}^{N^d}$。如果 O 是 $f(x)$ 的一种离散化格式，那么我们可以通过在量子计算机上模拟 (7)，并估计量 $u(T)^\dagger O u(T)$，来求解问题 1。

正如我们将在第 IIIB 节中看到的，在规则网格上采用欧拉离散化格式，可以让我们利用 A 的张量积结构，这是通过哈密顿量嵌入实现指数级量子加速的关键。尽管有限体积法或有限元法等其他离散化方法常用于经典数值模拟，[38, 51]，针对有限体积法提出的量子算法 [52] 或有限元法 [53–55]，由于缺乏规则网格或网格结构，需要依赖量子随机存取存储器（QRAM）或块编码等复杂的输入模型。

将偏微分方程映射为有限维线性常微分方程后，我们应用薛定谔化，将其动力学嵌入哈密顿量模拟问题中。薛定谔化的整体量子电路如图 2 所示。

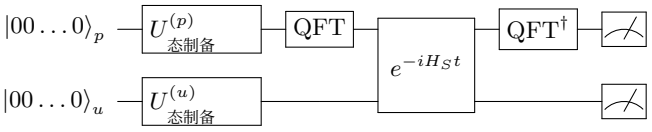

图 2. 薛定谔化的量子线路图。酉算符$U^{(p)}_{\text{态制备}}$和 $U^{(u)}_{\text{态制备}}$分别表示辅助变量 p 和解 u的态制备电路。

本质上，主要的计算成本在于模拟哈密顿量

$$H_S = H_1 \otimes H_{\mathcal{F}} - H_2 \otimes I, \tag{8}$$

其中，$H_1 + iH_2 = A$ 和 $H_{\mathcal{F}}$ 是对角矩阵。有关量子线路实现的更多细节请参见附录 D4。

B. 通过哈密顿量嵌入进行量子模拟

接下来，我们采用哈密顿量嵌入技术来模拟薛定谔化的线性常微分方程。

定义 1（哈密顿量嵌入）。设 $H \in \mathbb{C}^{N\times N}$ 是一个厄米算符，$O \in \mathbb{C}^{N\times N}$ 是一个厄米可观测量，$|\psi\rangle \in \mathbb{C}^N$ 是一个量子态。设 $\mathcal{S}$ 是 $\mathbb{C}^{2^q}$ 的一个子空间，其中 $q \geq 1$ 为某个整数，并设 $P_{\mathcal{S}} : \mathbb{C}^N \to \mathcal{S}$ 是一个等距映射。若 $P_{\mathcal{S}}\widetilde{H}P_{\mathcal{S}}^\dagger = H$、$P_{\mathcal{S}}\widetilde{O}P_{\mathcal{S}}^\dagger = O$、$P_{\mathcal{S}}|\widetilde{\psi}\rangle = |\psi\rangle$，且 $\mathcal{S}$ 是 H 的一个不变子空间 $\widetilde{}$，则称三元组 $(\widetilde{H},\ \widetilde{O},\ |\widetilde{\psi}\rangle)$ 是 $(H,\ O,\ |\psi\rangle)$ 的哈密顿量嵌入，其嵌入子空间为 $\mathcal{S}$。

备注 1。定义 1 是更一般定义的（即微扰）哈密顿量嵌入的一个特例，见 [34]。我们的定义使我们能够避免引入额外的模拟误差，从而使表述更加简洁。

哈密顿量嵌入技术提供了一种感知硬件的映射方式，将问题哈密顿量 H~映射为嵌入哈密顿量 H。当映射~的选择使得 H 与硬件原生~操作兼容时，H 便可进行分解，从而在硬件上实现资源高效的方案。这种分解对于在数字量子计算机上实现至关重要。另一种情况是，~H 可能可以由模拟量子模拟器的设备原生哈密顿量直接模拟；然而，模拟量子模拟器通常要求几何局域连接，这给高维偏微分方程的模拟带来了重大困难。我们将偏微分方程模拟的更深入研究留待未来工作（参见 [56]，其中研究了连续变量量子系统）。

更具体地说，我们采用并扩展了 [34]中提出的独热编码、一元编码和循环一元嵌入，用于嵌入微分方程模拟中常见的稀疏矩阵（详见附录 B）。另一方面，直接分解 H（可视为一种平凡嵌入）等价于使用标准二进制编码。附录 C 进一步讨论了如何使用标准二进制编码来表示某些对角矩阵和三对角矩阵。

通过有限差分对线性偏微分方程进行离散化时，微分算子会映射为仅沿单一维度产生非平凡作用的稀疏矩阵。例如，作用于变量 x_j 的一阶微分算子映射如下：

$$\frac{\partial y}{\partial x_j} \mapsto I \otimes \cdots \otimes \underbrace{A_j}_{j\text{-th term}} \otimes \cdots \otimes I, \tag{9}$$

其中，A_j 是作用于用于表示 x_j的寄存器上的空间离散微分算子。这种局部

性结构对于利用量子计算所提供的指数级加速至关重要。基于这一点，我们假设 A 具有厄米部分和反厄米部分 H_1 和 iH_2，并且它们可由以下张量积结构简洁地表示：

$$H_1 = \sum_{j=1}^{\Gamma} \gamma_j^{(1)} \bigotimes_{k=1}^{d} h_{j,k}^{(1)} \quad \text{and} \quad H_2 = \sum_{j=1}^{\Gamma} \gamma_j^{(2)} \bigotimes_{k=1}^{d} h_{j,k}^{(2)}, \tag{10}$$

其中 $\gamma_j^{(1)}$，$\gamma_j^{(2)} \in \mathbb{R}$ 和 $h_{j\,k}^{(1)}$，以及 $h_{j\,k}^{(2)}$，都是稀疏 $N \times N$矩阵（例如对角矩阵、带状矩阵等）。

鉴于 H_1 和 H_2的张量积结构，我们可以应用哈密顿量嵌入来模拟线性常微分方程。对于 $j = 1, 2, \ldots\ldots, d$，我们为第 j 维选择一种嵌入方案。这样便能将每个 $h_{j\,k}^{(1)}$，和 $h_{j\,k}^{(2)}$，嵌入为嵌入哈密顿量 $\widetilde{h}_{j\,k}^{(1)}$，和$\widetilde{h}_{j\,k}^{(2)}$，，其中 $\widetilde{h}_{j\,k}^{(1)}$，和 $\widetilde{h}_{j\,k}^{(2)}$，还可以进一步分解为多量子比特算符之和。因此，非~ ~ ~厄米矩阵 H 被映射为 $H = H_1 + iH_2$，其中~ ~H_1 和 H_2 分别是 H_1 和 H_2的哈密顿量嵌入。

为通过一个具体示例说明哈密顿量嵌入，考虑二维情形：对于$m \in \{1, 2\}$, $H_m = I \otimes h_1^{(m)}{}_{,\,2} + h_2^{(m)}{}_{,\,1} \otimes I$ 以及所有的 $h_{j\,k}^{(m)}$，和 $h_{j\,k}^{(m)}$，均为三对角矩阵。然后，将$h_{j\,k}^{(m)}$ 嵌入为 $\widetilde{h}_{j\,k}^{(m)}$，即可得到嵌入哈密顿量 $\widetilde{H}_m = I \otimes \widetilde{h}_1^{(m)}{}_{,\,2} + \widetilde{h}_2^{(m)}{}_{,\,1} \otimes I$。更一般地，嵌入哈密顿量可分解为

$$\widetilde{H}_1 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(1)} P_\ell \qquad \text{and} \qquad \widetilde{H}_2 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(2)} P_\ell, \tag{11}$$

其中 $\alpha_\ell^{(1)}$，$\alpha_\ell^{(2)} \in \mathbb{R}$ 以及 P_ℓ均为多量子比特算符，可在量子计算机上高效地进行指数运算 [57]。

给定分解式（11），我们构造嵌入哈密顿量

$$\widetilde{H}_S = \widetilde{H}_1 \otimes H_{\mathcal{F}} - \widetilde{H}_2 \otimes I \tag{12}$$

并通过乘积公式模拟其动力学。

C. 测量与后处理

除嵌入 H_1 与 H_2 外，我们将~可观测量 O 嵌入为 O，并假设可获得嵌入初始态 $\widetilde{u}(0)$；当该态被限制到嵌入子空间时，它与 $u(0)$ 成正比。在应用 Schr¨odingerization 之后，我们测量 p寄存器，并后选择 $p > 0$ 成立的结果。随后，在相差一个常数因子的范围内，$u(t)^\dagger O u(t)$ 可通过计算 O 关于系统寄存器的~期望来估计。

虽然使用 a p 阶乘积公式进行模拟，可使量子门复杂度随演化时间近乎线性增长，但其对精度的依赖仅为 $\mathcal{O}(\epsilon^{-1/p})$。为匹配量子信号处理所达到的最优 $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$ 依赖关系 [58]，，我们引入经典外推和后处理。

理查森外推已成为一种方法，可将 p阶乘积公式的门复杂度改进到优于 $\mathcal{O}(1/\epsilon^p)$，同时保留局域性以及对易子标度 [59]等理想性质。该方法并非使用固定的特罗特步长来估计可观测量期望，而是利用逐步减小的步长序列计算期望值，并外推到零步长极限。在此方法下，已证明就演化时间 T 与精度 ϵ而言，最大特罗特数的标度为 $\mathcal{O}(T^{(1+1/p)} \log(1/\epsilon))$。我们利用该方法以近最优的门复杂度模拟嵌入哈密顿量~H_S。关于哈密顿量模拟中乘积公式与理查森外推的更多细节见附录 E 1。

D. 复杂度分析

我们分析算法 1 的运行时间。主要计算成本来自将哈密顿量嵌入作为子程序使用。结合使用乘积公式和理查森外推，我们实现了门复杂度，其随 T 近似线性增长，并随 $1/\epsilon$ 呈多对数增长。

定理 1（使用哈密顿量嵌入的偏微分方程求解器，非正式表述）。设 H_1 和 H_2 为哈密顿量，其哈密顿量嵌入分别由 $\widetilde{H}_1 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(1)} P_\ell$ 和 $\widetilde{H}_2 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(2)} P_\ell$ 给出。假设 $\widetilde{H}_1$ 和 $\widetilde{H}_2$ 都是 k-局部的，即所有 P_ℓ 至多在 k 个量子比特上产生非平凡作用。那么，使用 p 阶 Υ 段乘积公式，以相对误差 ϵ 估计 $u(T)^\dagger O u(T)$ 时，每条量子线路所需的单量子比特门和双量子比特门总数为

$$\mathcal{O}\left(kL\Upsilon^{(2+1/p)} (\lambda T)^{(1+1/p)} \log(1/\epsilon)\right), \tag{13}$$

其中，λ 是一个嵌套对易子，其完整表达式见（*E12*）。

我们在附录 E 2中证明了定理 1的一个更为形式化的版本。我们的结果实现了关于T的准线性标度，这是高阶乘积公式的典型特征。虽然 p阶乘积公式通常会产生按 $\epsilon^{-1/p}$标度的门复杂度，但使用理查森外推可将对 ϵ的显式依赖改进为关于 $1/\epsilon$的多对数依赖。此外，我们在前置因子 λ 中保留了对易子标度，并在附录 E 2中进一步给出其上界。我们注意到，在定理 1中，$\log(1/\epsilon)$依赖仅考虑了量子模拟算法所引入的误差。在偏微分方程模拟的背景下，离散化误差可能~ ~要求 H_1 与 H_2 的范数随 $1/\epsilon$ 标度（即采用有限差分格式）。因此，总体

门复杂度可能多项式地依赖于 $1/\epsilon$。然而，任何用于估计可观测量的量子算法的端到端时间复杂度必然为$\Omega(1/\epsilon)$，这由海森堡极限 [60]所决定。

编码方案的选择决定了嵌入哈密顿量的结构（即局域性），进而影响其实现为量子电路时的实际成本（即量子门数量和电路深度）。具体而言，独热编码和一元编码允许使用含有最近邻相互作用项的 N 量子比特哈密顿量来嵌入 $N \times N$有限差分算子。相比之下，标准二进制编码（无论采用泡利基还是贝尔基）都使用作用于 $\log_2(N)$ 个量子比特的非局域算符来分解有限差分算子（更多详情请参见附录 C 2）。从这个意义上说，哈密顿量嵌入实现了时间-空间权衡：利用空间资源将问题哈密顿量映射为嵌入哈密顿量，使其动力学更易于在硬件上模拟。

哈密顿量嵌入的特定模式通常可实现门级并行化，通过使用额外的辅助量子比特来降低电路深度。请注意，薛定谔化涉及受控哈密顿量模拟，朴素实现需要依次施加每个受控门。通过使用长度等于系统（非辅助）量子比特数量的重复码对每个辅助量子比特进行编码，可以避免这一开销。这样，电路深度便可按与所用量子比特数量成比例的因子降低。具体而言，独热编码或一元编码等哈密顿量嵌入可将电路深度降低 $O(N)$ 倍，而标准二进制编码只能降低 $O(\log(N))$ 倍。

IV. 线性输运动力学

A. 问题表述

线性平流方程是双曲型偏微分方程的典型例子，可用于描述热量或流体的输运。这里，我们考虑一个定义在 d 个空间维度上的恒定速度平流方程：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \cdot \nabla u = 0, \tag{14}$$

$$u(0, x) = u_0(x), \tag{15}$$

其中 $c = (c_1, \ldots\ldots, c_d) \in \mathbb{R}^d$ 且 $x \in [0, 1]^d$，并满足周期边界条件。

B. 哈密顿量嵌入的构造

为了模拟平流动力学，我们使用中心差分在空间上进行离散化（见附录 A），并得到具有系数矩阵的线性常微分方程 (7)

$$A = -i \sum_{j=1}^{d} c_j (I \otimes \cdots \otimes \underbrace{A_j}_{j\text{th term}} \otimes \cdots \otimes I), \tag{16}$$

其中，A_j 是循环三对角矩阵，其超对角线上为 $-i$，次对角线上为 $+i$。我们使用独热嵌入对每个 A_j 进行嵌入，得到嵌入哈密顿量

$$H_{\text{adv}} = -\frac{1}{2h} \sum_{j=1}^{d} \sum_{k=1}^{N} c_j \left(\frac{X_{k+1}^{(j)} Y_k^{(j)} - Y_{k+1}^{(j)} X_k^{(j)}}{2} \right), \tag{17}$$

其中 $N = 10$、$h = 1/N$、$d = 2$ 和 $c_j = 1$ 对所有 $j = 1$、……、d均成立。由于采用中心差分会产生幺正动力学，薛定谔化可以直接归约为哈密顿量模拟，而无需额外的辅助量子比特。

C. 使用量子计算机进行演示

我们通过在 IonQ Aria-1 量子计算机 [61]上，对 $d = 2$ 空间维度中的平流方程进行真实机器演示，验证了我们的方法。我们选择两个高斯峰作为初始态，并将速度向量设为 $(c_1, c_2) = (1, 1)$。我们使用二阶 Trotter-Suzuki公式模拟 H_{adv}，时间最长达到 $T = 0.2$ 。受硬件噪声限制，我们不进行理查森外推；相反，我们应用二阶 Trotter-Suzuki公式，并将 Trotter 步数限制为最多两步，从而使量子门数量最多为 212 个单量子比特门和 115 个两量子比特门。真实机器的演示结果如图 3 所示。值得注意的是，尽管分辨率显著低于经典模拟，实验结果仍清晰地捕捉到了高斯波的传播方向和漂移速度。

D. 资源分析

我们对使用迎风格式模拟式（14）进行资源分析。这种设置代表了动力学非幺正、并通过 Schr¨odingerization 进行模拟的典型情形。

我们比较标准二进制编码（采用泡利基或贝尔基分解）、无惩罚独热嵌入和无惩罚循环一元嵌入。对于所有编码方案，我们都使用二阶特罗特-铃木公式模拟动力学。我们数值计算时间为 T/r 时单个特罗特步的Trotter误差，然后利用三角不等式估算 r 个特罗特步的误差。我们采用二分搜索估算将误差降至 $\epsilon = 5 \times 10^{-2}$ 以下所需的特罗特数。我们使用 Qiskit [62] 优化并编译量子电路，将其转换为单量子比特泡利

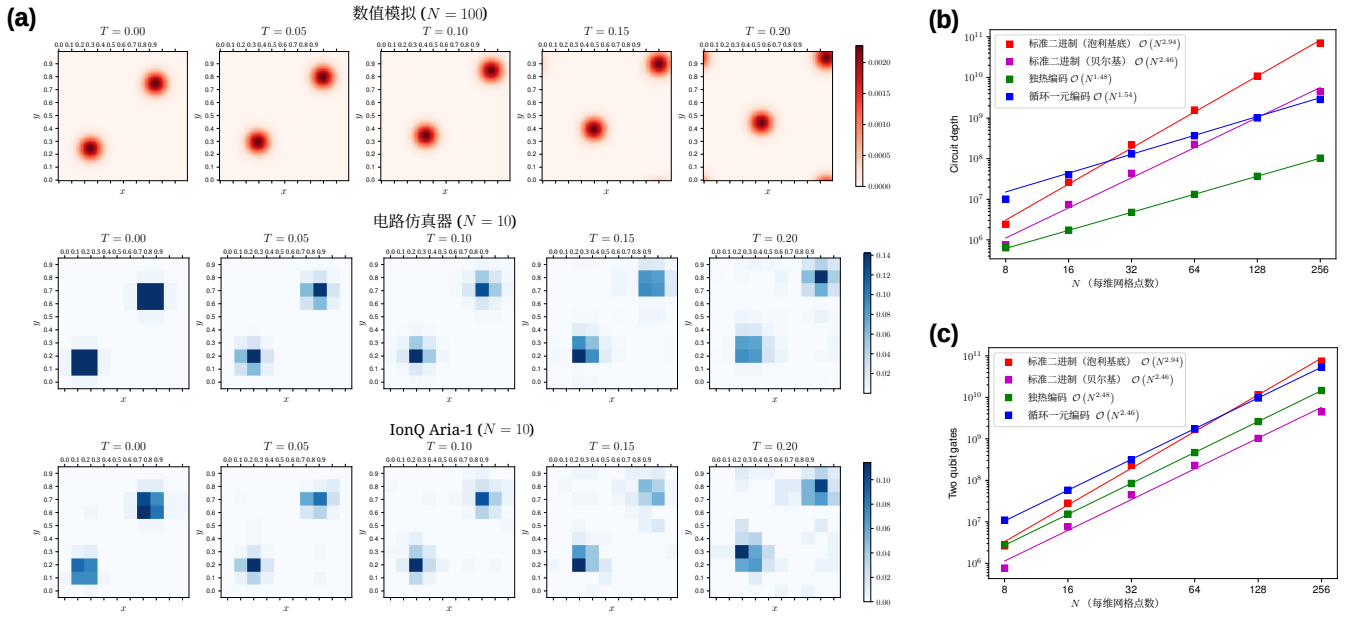

图 3. **二维线性平流方程的量子模拟。左：** (a) 每一行显示模拟时间为 $T \in \{0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20\}$（从左到右）时测得的概率分布。顶部一行为高分辨率经典模拟结果，以供参考。中间一行为无噪声电路模拟结果，底部一行为 Aria-1 量子计算机获得的结果。**右：** 采用迎风差分和 Schr¨odingerization 模拟平流方程所需双量子比特电路深度 (b) 和量子门数量 (c) 的经验估计。

旋转和 XX 旋转量子门，并采用全互连设备连接。此外，我们使用并行化技术优化标准二进制编码（泡利基）、独热编码和一元编码的电路深度。

我们对双量子比特电路深度和量子门数量的估算分别见图 3(b) 和 (c)（具体数量见附录 F）。就电路深度而言，稀疏编码（独热编码和循环一元编码）具有最优的渐近标度（采用二阶特罗特分解时约为 $O(N^{3/2})$）。总体而言，独热编码得到的量子电路最浅，其次是针对 $N \leq 64$ 的贝尔基。具体来说，对于 $N = 256$，独热编码可使电路深度降低 $42\times$。贝尔基通常所需的双量子比特门最少；不过，所有方法的门数量彼此相差大致不超过一个数量级。

V. 非线性输运动力学

A. 问题表述

由于量子力学具有线性，量子计算机最适合模拟线性动力学。然而，许多物理现象涉及非线性，这给经典模拟和量子模拟都带来了挑战。幸运的是，某些类别的非线性偏微分方程可以映射为线性动力学，并通过量子模拟高效求解。

在此，我们考虑一个 $(d+1)$ 维非线性标量双曲型偏微分方程，其形式如下：

$$\begin{aligned} &\partial_t u + G(u) \cdot \nabla u = 0, \\ &u(0, x) = u_0(x), \end{aligned} \tag{18}$$

其中 $x \in \mathbb{R}^d$ 和 $u : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$。该偏微分方程通过系数函数 $G(u)$体现非线性，是流体动力学中常见的无粘性伯格斯方程的推广。为处理非线性，可使用水平集方法 [45]将 (18) 表示为线性偏微分方程。引入辅助变量 q后，我们应用水平集方法，求解满足以下条件的 $\phi(t, x, q)$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \phi}{\partial t} + G(q) \cdot \nabla \phi = 0, \\ &\phi(0, x, q) = \delta(q - u_0(x)), \end{aligned} \tag{19}$$

已知其解满足 $\phi(t, x, q) = \delta(q - u(t, x))$ [49]。

具体而言，我们考虑在二维情形下对 (19) 进行数值模拟，其中 $x = (x_1, x_2) \in [0, 1]^2$, $q \in [-1, 1]$，且 $G(u) = u^3(1 - u^4)$。虽然可以用有限差分进行空间离散，但初始条件为狄拉克δ函数会导致数值精度较差。为避免这一问题，我们改用傅里叶谱方法，对 x进行傅里叶变换，并在频域基中模拟 (19)。

在量子计算机上，对式（19）的模拟涉及分别对应变量 x_1、x_2和 q的量子寄存器。我们首先对

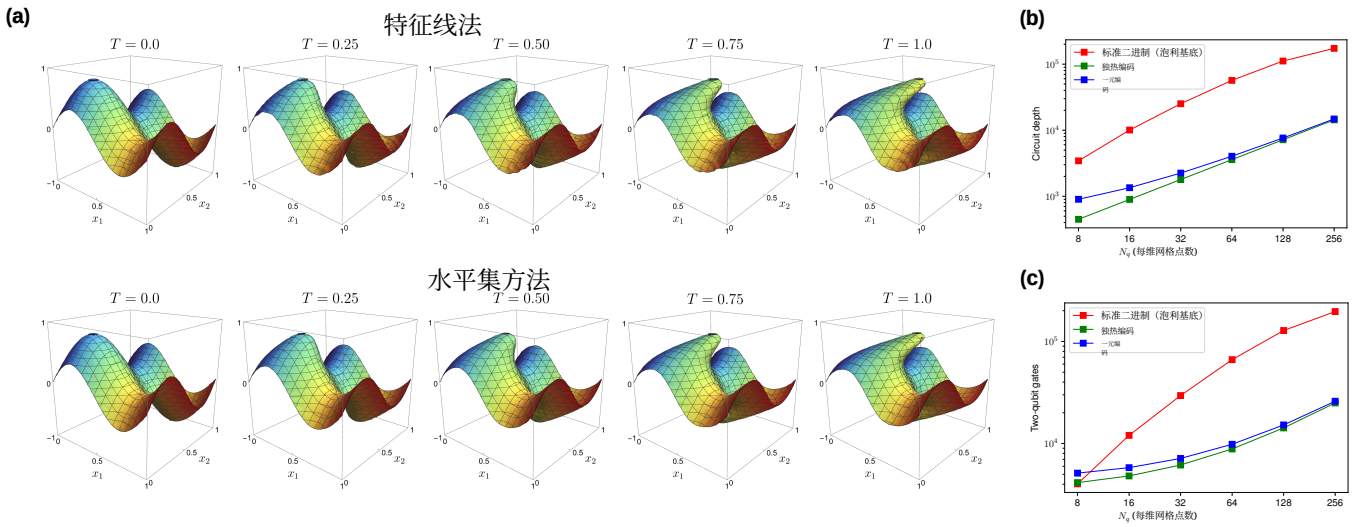

图4. **非线性输运动力学的量子模拟。左：**(a) 使用特征线法（上）和水平集方法（下）对（18）在时间 $T \in \{0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0\}$ 下的数值模拟。初始条件为 $u_0(x_1, x_2) = 0.4(\sin(2\pi x_1) + \sin(2\pi x_2))$。我们对每个维度使用 $N_x = N_q = 128$ 个网格点进行离散化。**右：**使用 N_q 个网格点对 q模拟（18）时双量子比特电路深度（b）和门数量（c）的经验估计，其中$N_q \in \{8, 16, 32, 64, 128\}$。

对应 x_1 和 x_2的寄存器应用量子傅里叶变换。在频域基中，我们模拟由下式给出的对角哈密顿量 H_d

$$H_d = D_{x_1} \otimes I \otimes D_q + I \otimes D_{x_2} \otimes D_q, \tag{20}$$

其中 $D_{x_1} = D_{x_2}$ 是傅里叶频率的对角矩阵， D_q 是编码$G(q)$取值的对角矩阵。最后，我们对 x_1 和 x_2分别施加逆量子傅里叶变换，从而恢复数值解。我们指出，量子傅里叶变换以及对 H_d 的模拟均在为变量 x_1、 x_2和 q 各自选定的适当嵌入中完成。

B. 哈密顿量嵌入的构造

为嵌入哈密顿量 H_d，我们对 x_1 和 x_2 使用标准二进制编码，同时允许自由选择 q 的嵌入。对 x_1 和 x_2 使用标准二进制编码的理由在于， $D_{x_1} = D_{x_2} = \mathrm{diag}(0, 1, \ldots, N/2-1, -N/2, -N/2+1, \ldots, -1)$ 是傅里叶频率的对角矩阵。如附录 C 所示，该矩阵具有如下给出的 1-局域泡利分解

$$D_{x_1} = D_{x_2} = -\frac{1}{2}\left(I - 2^n Z_n + \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1} Z_j\right). \tag{21}$$

与独热编码或一元嵌入等稀疏嵌入相比，标准二进制编码尤其适合表示 x_1 和 x_2 ，因为它仅需$O(\log\ N)$ 个量子比特，同时仍能保持较低局域性的泡利分解。

由于 $G(u)$ 是四次多项式，因此最佳嵌入选择 q 并不显而易见。因此，我们考察了 D_q 的各种嵌入方式，并分析由此得到的量子线路深度。例如，将独热编码嵌入应用于嵌入 D_q ，可得到嵌入哈密顿量

$$\widetilde{D}_q = \sum_{j=1}^{N} G(q_j)\hat{n}_j^{(1)}, \tag{22}$$

其中 $\hat{n}_j^{(1)} = \frac{1}{2}(I - Z_j)$ 和 q_j 是离散化区间 $[-1, 1]$ 上的第 j 个网格点。

由此得到的总体嵌入哈密顿量由下式给出

$$\widetilde{H}_d = \widetilde{D}_{x_1} \otimes I \otimes \widetilde{D}_q + I \otimes \widetilde{D}_{x_2} \otimes \widetilde{D}_q, \tag{23}$$

~其中 $D_{x_j} = D_{x_j}$ 源于对 x_1 和 x_2使用标准二进制编码。

C. 数值模拟

我们通过傅里叶谱方法对水平集方法进行数值模拟，结果如图4底排所示。我们将结果与特征线法进行比较，以验证其正确性；特征线法的结果如顶排所示。需要强调的是，尽管图4中的结果是通过经典计算机模拟得到的，但在数学上等价于在量子计算机上进行电路级模拟。

D. 资源分析

我们进行资源分析，比较采用不同嵌入方案模拟 (19) 所需的电路深度。对于 q，我们比较标准二进制、一热编码和一元嵌入，而 x_1 和 x_2 则使用标准二进制编码。此外，我们为每个用于表示 q 的量子比特引入一个辅助量子比特，从而实现量子门并行化。这是因为对 H_d 的模拟可以视为对 D_q 进行哈密顿量模拟，并由用于表示 x_1 和 x_2 的每个量子比特分别控制。

图4(b)和(c)分别展示了估算的电路深度和双量子比特门数量。总的来说，独热嵌入和一元嵌入优于标准二进制编码。我们强调，~这是由矩阵 D_q所采用的嵌入方式 D_q 直接导致的。对于一元嵌入和独热嵌入，$\sim D$ 由恒等算符和单点泡利算符Z 构成。另一方面， D_q的朴素泡利分解通常包含四局部项，因为 $G(u)$ 是一个四次~多项式。因此，无论从电路深度还是门数量来看，使用一元嵌入和独热嵌入模拟 D_q ，都比直接模拟 D_q成本低得多。这凸显了为每个问题选择合适嵌入方式的重要性，因为这会显著影响总体模拟成本。

VI. 讨论与结论

本文提出了一个用于高资源效率地模拟输运动力学的框架。借助哈密顿量嵌入，我们无需构造复杂的量子电路，即可端到端地实现微分方程求解器。通过广泛的资源分析，我们发现，某些嵌入方案更适合求解具有特定数学结构的偏微分方程。具体而言，独热编码或一元编码等稀疏编码最适合嵌入有限差分算子，并且能从受控哈密顿量模拟的并行化中获益最多。我们的方法全面解决了量子模拟输运动力学时出现的稀疏哈密顿量加载难题，并广泛适用于各种偏微分方程结构（例如，空间变化系数）。此外，采用乘积公式和理查森外推，使我们的算法适用于中期及早期容错设备，同时保持近乎最优的渐近门复杂度。

尽管线性动力学最适合通过量子模拟求解，我们的框架也能通过线性化过程涵盖更广泛的偏微分方程族。在本研究中，我们探讨了水平集方法的应用；该方法仅适用于非线性标量双曲偏微分方程和哈密顿-雅可比方程 [45]。其他非线性偏微分方程族能否提供可通过哈密顿量模拟求解的线性表示，仍是一个尚待解决的问题。

对于量子微分方程求解器的实际应用，仍有若干局限性尚未在我们的工作中解决。例如，实际应用通常需要制备非平凡的初始态。尽管已有多种用于制备特定量子态的算法 [63–65], ，但这些方法要么需要相干算术，要么基于复杂的输入模型，因此不适用于中期量子计算机。开发更高效且适用于近期量子硬件的初始态制备方案，仍是一个相对缺乏探索的方向。此外，由于含噪声中型量子设备会迅速退相干，我们的真实量子设备演示规模有限。随着量子硬件能力不断提升，我们预计量子微分方程求解器将能更广泛地应用于现实世界问题。

致谢

感谢 Dong An 提供的宝贵讨论。本研究部分由美国能源部科学办公室高级科学计算研究办公室量子计算加速研究项目资助，资助编号为 DESC0020273 和 DESC0025341；美国空军科学研究办公室资助，项目编号为 FA95502110051；美国国家科学基金会资助，项目编号为 CCF-1816695 和 CCF-1942837（CAREER）；以及斯隆研究奖学金资助。Jiaqi Leng 部分获得能源部量子系统加速器项目资助（编号 FP00010905）、西蒙斯量子博士后奖学金，以及通过资助编号 825053 获得的西蒙斯研究员奖资助。我们还感谢马里兰大学国家量子实验室（QLab）提供使用 IonQ 量子计算机的机会。

[1] J. D. Anderson 和 J. Wendt, *Computational fluid dynamics*，第 206 卷（施普林格，1995）。[2] D. J. Tritton, *Physical fluid dynamics*（施普林格科学与商业媒体，2012）。[3] R. B. Rood, 《数值平流算法及其在大气输运与化学模型中的作用》，地球物理学评论 25，71（1987）。[4] H. Fogler, *Elements of Chemical Reaction Engineering*，国际物理与化学工程科学丛书（培生教育，2020）。[5] O. G. Jepps 和 L. Rondoni, 《简单输运现象的热力学与复杂性》，物理学杂志A：数学与一般 39，1311（2006）。[6] E. P. Alves 和 F. Fiuza, 《从全动理学模拟中数据驱动地发现简化等离子体物理模型》，Phys. Rev. Res. 4，033192（2022）。[7] J. S. Hesthaven、G. Rozza、B. Stamm, *et al.*, *Certified reduced basis methods for parametrized partial differential equations*，第 590 卷（施普林格，2016）。[8] R. J. Kee、M. E. Coltrin、P. Glarborg 和 H. Zhu, *Chemically reacting flow: Theory, modeling, and simulation*（约翰威立，2017）。[9] R. P. Feynman, 《用计算机模拟物理》，国际理论物理杂志 21，467（1982）。[10] A. M. Childs、R. Kothari 和 R. D. Somma, 《精度依赖性呈指数级改善的线性方程组量子算法》，SIAM计算杂志 46，1920（2017）。[11] J.-P. Liu、H. Øie Kolden、H. K. Krovi、N. F. Loureiro、K. Trivisa 和 A. M. Childs, 《求解耗散非线性微分方程的高效量子算法》，《美国国家科学院院刊》118，e2026805118（2021），https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2026805118。[12] P. Brearley 和 S. Laizet, 《利用哈密顿量模拟求解平流方程的量子算法》，Phys. Rev. A 110，012430（2024）。[13] Y. Sato、R. Kondo、I. Hamamura、T. Onodera 和 N. Yamamoto, 《利用可扩展量子电路对双曲型偏微分方程进行哈密顿量模拟》，Physical Review Research 6，033246（2024）。[14] Y. Sato、H. Tezuka、R. Kondo 和 N. Yamamoto, 《空间变化参数下非守恒系统偏微分方程的量子算法》（2024），arXiv:2407.05019 [quant-ph]。[15] A. A. Zecchi、C. Sanavio、S. Perotto 和 S. Succi, 《用于经典输运问题量子模拟的改进振幅放大策略》，《量子科学与技术》10，035039（2025）。[16] X. Li、X. Yin、N. Wiebe、J. Chun、G. K. Schenter、M. S. Cheung 和 J. M¨ulmenst¨adt, 《流体动力学模拟的潜在量子优势》，Phys. Rev. Res. 7，013036（2025）。[17] M. Lubasch、J. Joo、P. Moinier、M. Kiffner 和 D. Jaksch, 《用于非线性问题的变分量子算法》，Phys. Rev. A 101，010301（2020）。[18] O. Kyriienko、A. E. Paine 和 V. E. Elfving, 《利用可微量子线路求解非线性微分方程》，Phys. Rev. A 103，052416（2021）。[19] R. Demirdjian、D. Gunlycke、C. A. Reynolds、J. D. Doyle 和 S. Tafur, 《用于流体动力学应用的平流—扩散方程变分量子解》，量子信息处理 21，322（2022）。[20] P. Over、S. Bengoechea、T. Rung、F. Clerici、L. Scandurra、E. de Villiers 和 D. Jaksch, 《量子计算机上偏微分方程变分量子模拟的边界处理》（2024），arXiv:2402.18619 [quant-ph]。[21] M. Umer、E. Mastorakis、S. Evangelou 和 D. G. Angelakis, 《超导 NISQ处理器中的非线性量子动力学》（2024），arXiv:2403.16426 [quant-ph]。[22] H. Jaffali、J. B. de Araujo、N. Milazzo、M. Reina、H. de Boutray、K. Baumann、F. Holweck、Y. Mohdeb 和 R. Katz, 《H-DES：一种量子—经典混合微分方程求解器》，arXiv 预印本 arXiv:2410.01130 10.48550/arXiv.2410.01130（2024）。[23] 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）。[24] H. Krovi, 《改进的线性与非线性微分方程量子算法》，Quantum 7，913（2023）。[25] D. W. Berry 和 P. C. Costa, 《利用戴森级数求解时变微分方程的量子算法》，Quantum 8，1369（2024）。[26] P. C. S. Costa、S. Jordan 和 A. Ostrander, 《模拟波动方程的量子算法》，Phys. Rev. A 99，012323 2019( )。[27] S. Jin、N. Liu 和 Y. Yu, 《偏微分方程的量子模拟：应用与详细分析》，Phys. Rev. A 108，032603（2023）。[28] D. An、J.-P. Liu 和 L. Lin, 《用于非幺正动力学且具有最优态制备成本的哈密顿量模拟线性组合》，《物理评论快报》131，150603（2023）。[29] R. Babbush、D. W. Berry、R. Kothari、R. D. Somma 和 N. Wiebe, 《模拟耦合经典振子的指数级量子加速》，Phys. Rev. X 13，041041（2023）。[30] L. Wright、C. M. Keever、J. T. First、R. Johnston、J. Tillay、S. Chaney、M. Rosenkranz 和 M. Lubasch, 《一维波动方程的含噪中等规模量子模拟》（2024），arXiv:2402.19247 [quant-ph]。[31] D. Aharonov 和 A. Ta-Shma, 《绝热量子态生成与统计零知识》，载于 *Proceedings of the Thirty-Fifth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*，STOC '03（美国计算机协会，纽约，纽约州，美国，2003），第 20–29 页。

[32] A. Gily´en、Y. Su、G. H. Low 和 N. Wiebe，《量子奇异值变换及其拓展：量子矩阵运算的指数级改进》，载于 *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*，STOC 2019（美国计算机协会，纽约，NY，美国，2019），第 193–204 页。[33] V. Giovannetti、S. Lloyd 和 L. Maccone，量子随机存取存储器，《物理评论快报》100，160501（2008）。[34] J. Leng、J. Li、Y. Peng 和 X. Wu，通过哈密顿量嵌入扩展可由硬件高效操控的希尔伯特空间（2024），arXiv:2401.08550 [quant-ph]。[35] T. Xin、S. Wei、J. Cui、J. Xiao、I. n. Arrazola、L. Lamata、X. Kong、D. Lu、E. Solano 和 G. Long，求解线性微分方程的量子算法：理论与实验，Phys. Rev. A 101，032307（2020）。[36] S. Jin 和 N. Liu，通过薛定谔化模拟离散线性动力系统和线性代数中的简单迭代方法（2023），arXiv:2304.02865 [quant-ph]。[37] D. P. Chock 和 A. M. Dunker，求解平流方程的数值方法比较，《大气环境》（1967）17，11（1983）。[38] R. J. LeVeque，*Finite volume methods for hyperbolic problems*，第 31 卷（剑桥大学出版社，2002）。[39] D. W. Berry、A. M. Childs 和 R. Kothari，具有近乎最优参数依赖性的哈密顿量模拟，载于 *2015 IEEE 56th annual symposium on foundations of computer science*（IEEE，2015），第 792–809 页。[40] T. S. Cubitt、A. Montanaro 和 S. Piddock，通用量子哈密顿量，《美国国家科学院院刊》115，9497（2018）。[41] 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（2020）。[42] D. Jaksch、P. Givi、A. J. Daley 和 T. Rung，计算流体力学的变分量子算法，《美国航空航天学会杂志》61，1885（2023）。[43] P. Siegl、G. S. Reese、T. Hashizume、N.-L. van H¨ulst 和 D. Jaksch，用于求解微分方程的张量可编程量子电路，Phys. Rev. Res. 8，013052（2026）。[44] J. Hu、S. Jin、N. Liu 和 L. Zhang，通过薛定谔化求解偏微分方程的量子电路（2024），arXiv:2403.10032 [quant-ph]。[45] S. Jin 和 S. Osher，一种用于计算拟线性双曲型偏微分方程和哈密顿-雅可比方程多值解的水平集方法，《数学科学通讯》1，575（2003）。[46] J.-P. Liu、D. An、D. Fang、J. Wang、G. H. Low 和 S. Jordan，求解非线性反应扩散方程和进行能量估计的高效量子算法，《数学物理通讯》404，963（2023）。[47] S. K. Leyton 和 T. J. Osborne，一种求解非线性微分方程的量子算法（2008 0812 4423），[ ] arXiv: . quant-ph .[48] I. Joseph，Koopman–von Neumann 方法在非线性经典动力学量子模拟中的应用，Phys. Rev. Res. 2，043102 2020( )。[49] S. Jin 和 N. Liu，计算非线性偏微分方程可观测量的量子算法（2022），arXiv:2202.07834 [quant-ph]。[50] J. Boyd，*Chebyshev and Fourier Spectral Methods: Second Revised Edition*，多佛数学丛书（多佛出版社，2001）。[51] S. C. Brenner 和 L. R. Scott，*The mathematical theory of finite element methods*（施普林格，2008）。[52] Z.-Y. Chen、C. Xue、S.-M. Chen、B.-H. Lu、Y.-C. Wu、J.-C. Ding、S.-H. Huang 和 G.-P. Guo，具有经典输入输出的计算流体力学量子有限体积法，arXiv预印本 arXiv:2102 03557 10 48550 2102 03557 2021 . . /arXiv. . ( )。[53] B. D. Clader、B. C. Jacobs 和 C. R. Sprouse，预条件量子线性系统算法，《物理评论快报》110，250504 2013( )。[54] A. Montanaro 和 S. Pallister，量子算法与有限元法，Phys. Rev. A 93，032324（2016）。[55] M. Deiml 和 D. Peterseim，有限元法的量子实现，《计算数学》10.1090/mcom/4137（2025）。[56] S. Jin 和 N. Liu，偏微分方程的模拟量子模拟，《量子科学与技术》9，035047（2024）。[57] 虽然 [34] 中提出的哈密顿量嵌入可将 $P_\ell^{(1)}$ 和 P(2) 表示为多量子比特泡利算子，但我们注意到还存在其他分解方式。例如，有限差分算子的贝尔基底分解 [13] 可视为哈密顿量嵌入的一个特例。我们假设，若 P_ℓ 是一个 k 量子比特算子，则可用 $\mathcal{O}(k)$ 个单量子比特门和双量子比特门将其指数化；多量子比特泡利算子和贝尔基底算子均符合这一情况。[58] 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）。[59] J. D. Watson 和 J. Watkins，利用 Trotter 误差缓解大幅降低电路深度，《PRX量子》6，030325（2025）。[60] M. Zwierz、C. A. P´erez-Delgado 和 P. Kok，量子计量学海森堡极限的一般最优性，《物理评论快报》105，180402（2010）。[61] Aria-1 量子计算机是一台具有全连接能力的囚禁离子设备。执行这些量子电路时，据 IonQ 的设备表征数据，制备与测量误差为 0.62%，单量子比特门保真度为 0.9998，双量子比特门保真度为 0.9871。[62] Qiskit贡献者，Qiskit：量子计算开源框架（2023）。

[63] L. Grover 和 T. Rudolph，创建与可高效积分概率分布相对应的叠加态（2002），arXiv:quant-ph/0208112 [quant-ph]。[64] A. G. Rattew 和 B. Koczor，以对数复杂度在量子寄存器中制备任意连续函数（2022），arXiv:2205.00519 [quant-ph]。[65] S. McArdle、A. Gily

2022 2210 14892 en

[ ]

和 M. Berta，无需相于算术的量子态制备（），arXiv:quant-ph，[66] R. J. LeVeque，*Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems* 2007

（SIAM，）。[67] E. B¨aumer 和 S. Woerner，基于测量的恒定深度长程纠缠门，Phys. Rev. Res. **7**，023120（2025）。[68] B. Arseniev、D. Guskov、R. Sengupta、J. Biamonte 和 I. Zacharov，用于量子计算机上哈密顿量模拟的三对角矩阵分解，Phys. Rev. A **109**，052629（2024）。[69] B. L. Douglas 和 J. B. Wang，量子游走的高效量子电路实现，Phys. Rev. A **79**，052335（2009）。[70] D. An、A. M. Childs 和 L. Lin，具有近乎最优参数依赖性的线性非幺正动力学量子算法（2023），arXiv:2312.03916 [quant-ph]。[71] Y. Tong、D. An、N. Wiebe 和 L. Lin，快速求逆、预条件量子线性系统求解器、快速格林函数计算及矩阵函数快速求值，Phys. Rev. A **104**，032422（2021）。[72] A. M. Childs、Y. Su、M. C. Tran、N. Wiebe 和 S. Zhu，具有对易子标度的 Trotter 误差理论，Phys. Rev. X **11**，011020（2021）。[73] S. Chakraborty、S. Hazra、T. Li、C. Shao、X. Wang 和 Y. Zhang，无需块编码的量子奇异值变换：辅助比特最少且复杂度近乎最优，arXiv预印本 arXiv:2504.02385 10.48550/arXiv.2504.02385（2025）。[74] S. Jin、N. Liu 和 C. Ma，关于基于薛定谔化的非齐次线性动力系统量子算法（2025）。

附录

致谢 10

A. 双曲型偏微分方程的有限差分格式 1. 中心差分 14
2. 迎风格式 14
15

B. 稀疏矩阵的哈密顿量嵌入 15
1. 无惩罚嵌入方案 独热嵌入 一元 16
嵌入 循环一元嵌入 16
16
17

C. 稀疏矩阵的标准二进制编码 17
1. 多项式函数 2. 有限差分算 17
子 19

D. 非幺正动力学的量子模拟 19
1. 哈密顿量模拟的线性组合 2. Schr¨odinger 化 19
3. Schr¨odinger 化的证明 4. Schr¨odinger 化的 20
实现 21
22

E. 使用哈密顿量嵌入的量子常微分方程求解器 23
1. 通过乘积公式和理查森外推进行哈密顿量模拟 2. 算法 1 的复杂度分析 23
25

F。平流方程和非线性标量双曲型偏微分方程的资源估算。 26

G. Schr¨odingerization 与 LCHS 的比较 27

附录 A：双曲型偏微分方程的有限差分格式

本节回顾双曲型偏微分方程的空间离散化格式。为便于说明，我们考虑一维变系数情形的离散化，其中

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -f(x)\frac{\partial u}{\partial x}. \tag{A1}$$

此处尚未指定边界条件。离散化格式的稳定性取决于边界条件，而所选格式最终决定了要模拟的哈密顿量。对于所有离散化格式，线法都会得到一个常微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}(t)}{\mathrm{d}t} = A\mathbf{u}(t), \tag{A2}$$

并且$\mathbf{u}(t) = [u_1(t)\ u_2(t)\ldots, u_N(t)]^\top$ 表示向量化网格函数， A 是一个取决于所选格式的系数矩阵。

1. 中心差分

中心差分格式仅在周期边界条件下稳定。我们使用 N 个网格点对 (A1) 进行离散化，并令 $h = 1/N$ 为网格点之间的距离。应用离散化后，令 $u_j(t)$ 表示 $u(t,\ x)$ 在第 j 个网格点处的值。令 q_1，.....， q_N 为等距网格点，使得 $q_1 < \cdots < q_N$，并将 q_{N+1}

与 q_1 对应。出于对称性，令 $q_{j+1/2} = (q_j + q_{j+1})/2$ 为第 j 个子区间的中点。通过中心差分，我们得到离散化格式

$$\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} = -\left(\frac{f(q_{j+1/2})u_{j+1} - f(q_{j-1/2})u_{j-1}}{2h}\right) + \frac{f'(q_j)}{2}u_j + \mathcal{O}(h), \tag{A3}$$

对所有 j 均成立。如果 $f(x)$ 与 $u(x)$ 具有相同的周期边界条件，则 (A3) 可以写成具有如下系数矩阵的常微分方程组 (A2)

$$A_c = \begin{pmatrix} \frac{f'(q_1)}{2} & -\frac{f(q_{1+1/2})}{2h} & & & \frac{f(q_{N+1/2})}{2h} \\ \frac{f(q_{1+1/2})}{2h} & \frac{f'(q_2)}{2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -\frac{f(q_{N-1/2})}{2h} \\ -\frac{f(q_{N+1/2})}{2h} & & & \frac{f(q_{N-1/2})}{2h} & \frac{f'(q_N)}{2} \end{pmatrix}. \tag{A4}$$

为保证稳定性，$f'(x)$ 应为负值。如果 $f'(x)$ 有界且 N 很大，则对角项可以忽略。在这种情况下，可以仅模拟反厄米部分 $\frac{A-A^\dagger}{2}$，并通过酉演化近似动力学。

2. 迎风格式

对于双曲型偏微分方程，动力学通常具有非对称性，使用中心差分往往会导致不稳定。一种稳定性更好的替代方法是迎风格式，即采用单侧近似来计算导数。这也使得可以使用非周期边界条件，即设置一个入流边界。请注意，出流边界已由条件确定，因此无法再施加额外约束 [66]。这里，我们假设入流边界条件为 $u_1 = 0$，系数函数为 $f(x) > 0$。在这种情况下，迎风格式对应于对 (A1) 进行如下离散化

$$\frac{\mathrm{d}u_j}{\mathrm{d}t} = -f(q_j)\left(\frac{u_j - u_{j-1}}{h}\right). \tag{A5}$$

这对应于系数矩阵为

$$A_u = \begin{pmatrix} -\frac{f(q_1)}{h} & & & \\ \frac{f(q_2)}{h} & -\frac{f(q_2)}{h} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \frac{f(q_N)}{h} & -\frac{f(q_N)}{h} \end{pmatrix}. \tag{A6}$$

由于 $f(x) > 0$，$\frac{A_u + A_u^\dagger}{2}$ 的特征值非正，因此系统稳定。当 $f(x) < 0$ 时，则应改为近似 $\frac{\partial u}{\partial x}(t,\ x_j)$，采用 $\frac{u_{j+1} - u_j}{h}$。

附录 B：稀疏矩阵的哈密顿量嵌入

本节回顾一种近期提出的框架——哈密顿量嵌入，该框架可用于模拟稀疏哈密顿量 [34]。对于偏微分方程的模拟，我们重点关注能够高效嵌入带状矩阵和循环带状矩阵的编码方案；这些矩阵源自微分算子的有限差分离散。

为了模拟稀疏矩阵 A，哈密顿量嵌入技术利用嵌入哈密顿量 H_A，其在子空间 $\mathcal{S}$ 上的投影与 A完全一致。也就是说，相对于子空间 $\mathcal{S}$ 和 $\mathcal{S}^\perp$，H_A 可写成一个分块矩阵

$$H_A = \begin{pmatrix} A & R^\dagger \\ R & G \end{pmatrix}, \tag{B1}$$

其中 $A = P_{\mathcal{S}} H_A P_{\mathcal{S}}$、 $G = P_{\mathcal{S}^\perp} H_A P_{\mathcal{S}^\perp}$、 $R = P_{\mathcal{S}^\perp} H_A P_{\mathcal{S}}$和 $P_{\mathcal{S}}$以及 $P_{\mathcal{S}^\perp}$分别是投影到 $\mathcal{S}$和 $\mathcal{S}^\perp$上的投影算符。当 $\|R\| > 0$时，文献 [34] 表明，可以使用足够大的惩罚哈密顿量来控制模拟误差。然而，当惩罚系数较大时，使用常见乘积公式模拟 H_A 会导致较大的模拟误差。为克服这一局限，本文考虑无惩罚版本的独热编码、一元编码和循环一元编码嵌入；采用标准乘积公式时，这些方法可降低渐近复杂度。

在本节中，我们从 1 开始为位串编索引，并从右向左表示位串，例如，001 的第一位是 1。我们用 X_j、 Y_j 和 Z_j 表示泡利矩阵

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

分别作用于第 j 个量子比特。此外，我们广泛使用作用于第 j 个量子比特的数算符 $\hat{n}_j^{(1)} = \frac{I - Z_j}{2}$ 及其正交补 $\hat{n}_j^{(0)} = \frac{I + Z_j}{2}$。对于矩阵 A，如果 $j \neq k$，我们将其 $(j,\ k)$ 项记为 $A_{j,\ k}$；如果 $j = k$，则记为 A_j。

1. 无惩罚嵌入方案

独热嵌入

对于在数字量子计算机上模拟偏微分方程，采用独热嵌入且不使用惩罚项，因仅使用二局部算符而兼具简洁性和灵活性。

定义 2（独热码）。独热码由满足以下条件的位串 $\{h_1, \ldots, h_n\}$ 组成：对于 $j = 1, \ldots, N$， h_j 是长度为 N 的位串，其中第 j 位为 1，其余各位均为 0。

命题 1 (无惩罚的一元编码嵌入**).** 设 $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ 为厄米矩阵。设 $\mathcal{S}$ 为由一组独热态 $\{|h_j\rangle \mid j = 1, \ldots, N\}$张成的子空间。则哈密顿量

$$H_A = \frac{1}{2} \left(\sum_{j<k} \mathrm{Re}(A_{j,k})(X_k \otimes X_j + Y_k \otimes Y_j) + \mathrm{Im}(A_{j,k})(X_k \otimes Y_j - Y_k \otimes X_j) \right) + \left(\sum_{j=1}^{N} A_j \hat{n}_j^{(1)} \right) \tag{B2}$$

满足 $H_A\big|_{\mathcal{S}} = A$，且 $\mathcal{S}$ 是 H_A的不变子空间。

一元嵌入

在非周期边界条件下，有限差分算子是带状矩阵，其中只有当 $|j - k| \leq b$ 时，$(j,\ k)$ 个元素才非零；这里 $b \geq 0$ 为整数带宽。在这种情况下，一元嵌入提供了独热码的一种替代方案。

定义 3 (一元码**).** 一元嵌入由长度为 $(N - 1)$ 的位串 $\{u_1, \ldots, u_N\}$ 构成，其中对于$j = 1$、.....、 N， u_j的前 $(j - 1)$ 个比特为 1，其余 $(N - j)$ 个比特为 0。

可以使用一元码构造任意带宽带状矩阵的无惩罚嵌入。不过，无惩罚版本需要更高的局域性，而且通常包含数量随带宽呈指数增长的泡利项。因此，为了简化起见，我们考虑三对角矩阵的无惩罚一元嵌入，如下所示。

命题 2 (无惩罚的一元嵌入**)。** 设 $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ 为厄米三对角矩阵。设 $\mathcal{S}$ 为由一元态集合 $\{|u_j\rangle \mid j = 1, \ldots, N\}$张成的子空间。那么，哈密顿量

$$\begin{aligned} H_A = {} & \hat{n}_2^{(0)} \left(\mathrm{Re}(A_{1,2}) X_1 - \mathrm{Im}(A_{1,2}) Y_1 \right) + \left(\sum_{j=2}^{N-1} \hat{n}_{j+1}^{(0)} \left(\mathrm{Re}(A_{j,j+1}) X_j - \mathrm{Im}(A_{j,j+1}) Y_j \right) \hat{n}_{j-1}^{(1)} \right) \\ & + \left(\mathrm{Re}(A_{N-1,N}) X_N - \mathrm{Im}(A_{N-1,N}) Y_n \right) \hat{n}_{N-1}^{(1)} + \left(A_{1,1} I + \sum_{j=2}^{N} (A_j - A_{j-1}) \hat{n}_{j-1}^{(1)} \right) \end{aligned} \tag{B3}$$

满足 $H_A\big|_{\mathcal{S}} = A$ 且 $\mathcal{S}$ 是 H_A的不变子空间。

注2. 一元嵌入在以下意义上等价于独热嵌入。对于任意一元态$|u_j\rangle$，我们可以引入一个初始化为 $|1\rangle$ 的额外辅助量子比特，并执行一串CNOT门阶梯：

$$\left(\prod_{j=2}^{N} CX_{j,j-1}\right)|u_j\rangle\,|1\rangle = |h_j\rangle\,. \tag{B4}$$

因此，一元嵌入子空间中的任意 $(N-1)$ 量子比特态 $\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\,|u_j\rangle$，都可以在深度 $\mathcal{O}(N)$ 内映射为 N 量子比特的独热嵌入态 $\sum_{j=1}^{N}\alpha_j\,|h_j\rangle$，反之亦然。借助电路中途测量和前馈，CNOT 阶梯可在 $\mathcal{O}(1)$ 深度内实现 [67]。

循环一元嵌入

对于具有循环结构（由采用周期性边界条件而产生）的矩阵，可以使用循环一元嵌入。

定义 4（循环一元编码）。设 N 为偶整数。循环一元编码由长度为 $N/2$ 的位串 $\{c_1,\ldots,c_N\}$ 组成，满足

- 若 $j=1,\ldots,N/2$，则 c_j 的前 $(j-1)$ 个比特为 1，其余 $(N+1-j)$ 个比特为 0；
- 如果 $j=N/2+1,\ldots,N$，c_j 是 $c_{j-N/2}$的逐位取反。

与一元嵌入类似，我们考虑如下对三对角矩阵进行的无惩罚循环一元嵌入。

命题 3 (无惩罚循环一元嵌入**)**。设 $A\in\mathbb{C}^{N\times N}$ 是厄米三对角矩阵。设 $\mathcal{S}$是由循环一元态集合 $\{|c_j\rangle \mid j=1,\ldots,N\}$ 张成的子空间。对于 $j=1,\ldots,N$，定义 a_j、b_j和 c_j 如下：

$$a_j=\begin{cases}1 & \textit{if } N/2-1\le j<N,\\ 0 & \textit{otherwise,}\end{cases}\quad b_j=\begin{cases}1 & \textit{if } 1<j\le N/2,\\ 0 & \textit{otherwise,}\end{cases}\quad c_j=\begin{cases}1 & \textit{if } j\ge N/2,\\ 0 & \textit{otherwise.}\end{cases}$$

那么哈密顿量

$$H_A=\sum_{j=1}^{N}\hat{n}_{j+1}^{(a_j)}\left(\mathrm{Re}(A_{j,j+1})\right)X_j+(-1)^{c_j}\,\mathrm{Im}(A_{j,j+1})Y_j)\,\hat{n}_{j-1}^{(b_j)}+A_j\hat{n}_j^{(c_j)}\hat{n}_{j-1}^{(b_j)} \tag{B5}$$

（其中指标按模 $N/2$计算）满足 $H_A\big|_{\mathcal{S}}=A$，且 $\mathcal{S}$ 是 H_A的不变子空间。

命题 2 和命题 3 均可通过直接计算证明，因为涉及 $A_{j,j+1}$的算符仅在第 j 个和第 $(j+1)$ 个码字上产生非平凡作用。

附录 C：稀疏矩阵的标准二进制编码

1. 多项式函数

标准二进制编码能够紧凑地表示与实变量的多项式函数相对应的对角算子。这里，我们使用 n 个量子比特来表示实变量 $x\in[0,1]$，并通过$N=2^n$ 个网格点对区间进行离散化。对于定义在更一般区间 $[L,R]$上的变量 y，可以通过$y=(R-L)x-L$对 x 进行缩放和平移。

命题4. 设 $N=2^n$ 对于 $n\ge 1$。令 $P=\mathrm{diag}(0,1,\ldots,N-1)/N$。那么，$P$ 的泡利分解 is

$$P=\frac{1}{2N}\left((N-1)I-\sum_{j=1}^{n}2^{j-1}Z_j\right) \tag{C1}$$

证明。 对于任意计算基态 $|k\rangle$，令 $q_i \in \{0,1\}$ 为第 i 个比特的值。那么 $k = \sum_{i=1}^{n} 2^{i-1} q_i$。于是，

$$\langle k| \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1} Z_j |k\rangle = \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1}(1-2q_j) = 2^n - 1 - 2k. \tag{C2}$$

因此，

$$\frac{k}{N} = \frac{1}{2N} \langle k| \left(2^n - 1 - \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1} Z_j\right) |k\rangle = \langle k| P |k\rangle . \tag{C3}$$

□

注3. 由此可立即得出，一般多项式 $\sum_{k=0}^{K} a_k x^k$ 可以通过算符 $\sum_{k=0}^{K} a_k P^k$进行编码。因此，该算符的局域性对应于多项式次数，而对于标准二进制编码，泡利项的数量可能多达 N 。相比之下，无论次数 K如何，独热码都只需要 N 个单量子比特算符。图5展示了标准二进制编码和独热码在模拟对角算子方面的实证比较。

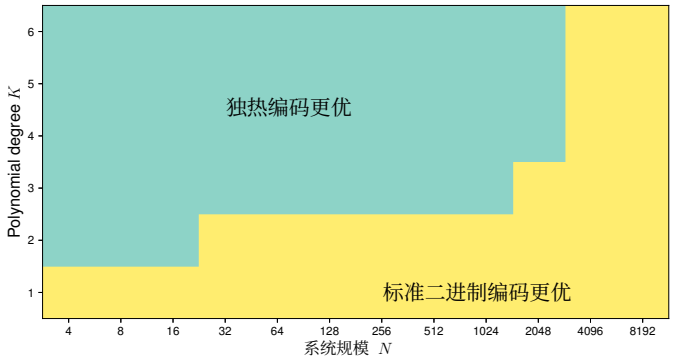

图5. 针对不同系统规模 N和多项式次数 K，由1量子比特门和2量子比特门的总数确定的用于模拟对角算符 P^K 的最佳编码方案分布图。黄色区域表示标准二进制编码使用较少量子门的范围，而青绿色区域表示独热码使用较少量子门的范围。对于线性多项式，当系统规模不超过 $N = 256$时，标准二进制编码优于独热码。对于次数更高的多项式，独热码通常使用更少的量子门，除非系统规模非常大。

特别地，标准二进制编码能够对包含傅里叶频率的对角矩阵进行高效分解。为与量子傅里叶变换保持一致，我们将第一项设为零频分量，这与命题4不同。

命题5. 对 $n \geq 1$，设 $N = 2^n$。设 $H_d = \mathrm{diag}(0,1,\ldots,N/2-1,-N/2,-N/2+1,\ldots,-1)$。则 H_d 的泡利分解为

$$H_d = -\frac{1}{2}\left(I - 2^n Z_n + \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1} Z_j\right). \tag{C4}$$

证明. 与命题4的证明类似，我们有

$$\langle k| \sum_{j=1}^{n} 2^{j-1} Z_j |k\rangle = 2^n - 1 - 2k, \tag{C5}$$

其中 $|k\rangle$ 表示 k的标准二进制编码。通过直接计算可得，

$$\langle k| H_d |k\rangle = \begin{cases} k & \text{if } k \leq N/2-1, \\ k-N & \text{if } k \geq N/2. \end{cases} \tag{C6}$$

□

2. 有限差分算子

这里，我们讨论有限差分算子的标准二进制编码，以及这种方法与独热编码或一元编码等稀疏编码的比较。我们考虑如下形式的三对角矩阵

$$A = \sum_{j=0}^{N-1} a_j \left|j+1\right\rangle \left\langle j\right| + a_j^* \left|j\right\rangle \left\langle j+1\right|, \tag{C7}$$

其中包括一阶和二阶微分算子的离散化，且可采用或不采用周期边界条件。

在齐次元素的特殊情形下（即对所有 j 均为 $a_j = a$ ），文献 [13] 提出了用于模拟 (C7) 的量子线路实现。随后，文献 [44] 将这些量子线路构造用于通过 Schr¨odinger 化模拟非幺正动力学。严格来说，这种方法使用标准二进制编码来表示有限差分算子。一般而言，对一个 N 点有限差分算子，标准二进制编码需要 $\mathcal{O}(N)$ 个泡利项，尽管只使用 $\mathcal{O}(\log\ N)$ 个量子比特（一般三对角矩阵的泡利分解见 [68]）。不过， [13] 通过使用所谓的贝尔基而非泡利基，对算符中的每一项分别进行分解和模拟，从而避免了朴素实现。这种方法实现高效，只需 $\mathcal{O}(\log\ N)$ 的空间，并且每个特罗特步需要 $\mathcal{O}(\text{poly log}\ N)$ 个量子门，但存在两个主要缺点。

- 首先，所构造的量子电路仅适用于元素均匀的三对角矩阵。对于变系数微分方程，矩阵元素通常并不均匀，必须用 $\mathcal{O}(N)$ 个参数来表示。在这些情况下，稠密编码（如标准二进制编码）或许可以节省空间，但若不进一步利用问题结构，就无法在每个特罗特步中实现 $\mathcal{O}(\text{poly log}\ N)$ 个量子门。

  对于元素不均匀的情况，可以通过应用递增和递减算子（例如参见 [69]），并利用 [13] 中的量子电路模拟 $(|0\rangle\langle 1|)^{\otimes n} + (|1\rangle\langle 0|)^{\otimes n}$，从而针对每个 j 模拟 $a_j \left|j\right\rangle \left\langle j+1\right| + a_j^* \left|j\right\rangle \left\langle j\right|$。这种方法的 Trotter 误差与独热编码或一元编码相同。不过，由于必须对所有 $j = 1$、.....、N 执行此~，总门复杂度为 $\mathcal{O}(N \cdot \text{poly log}\ N) = \mathcal{O}(N)$。这仅比独热编码或一元编码等稀疏编码多出对数因子。

- 其次，标准二进制编码需要高度非局域算子。因此，这些有限差分算子的量子线路实现需要分解多重受控旋转算子，在实践中可能导致较高的开销。此类分解的实际成本在很大程度上取决于设备架构。

还值得注意的是，即使在条目齐次的情况下，使用标准二进制编码来模拟偏微分方程，其效率也并非比独热编码或一元编码等稀疏编码呈指数级更高。使用有限差分会在哈密顿量中引入因子 $1/h = \mathcal{O}(N)$，因此特罗特数至少随 N 线性增长。在最好的情况下，模拟有限差分算子时，标准二进制编码所达到的门复杂度仅比独热编码或一元编码好一个 N 的线性因子。

附录 D：非幺正动力学的量子模拟

我们回顾了在 $A(t)$ 不一定为反厄米的一般情形下求解 (1) 的两种互补方法。这包括哈密顿量模拟的线性组合（LCHS） [28, 70]以及 Schr¨odingerization [27]，它们是将非幺正动力学映射到幺正动力学的两种不同但密切相关的方法。我们将这些方法分别与哈密顿量嵌入结合使用，以获得用于模拟非幺正动力学的资源高效算法。

1. 哈密顿量模拟的线性组合

关于 LCHS 的原始研究 [28] 确立了以下恒等式：

$$\mathcal{T} e^{\int_0^t A(s)\,\mathrm{d}s} = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\pi(1+k^2)} \mathcal{T} e^{i\int_0^t kH_1(s)+H_2(s)\,\mathrm{d}s}\mathrm{d}k. \tag{D1}$$

其中 $H_1(t) = \frac{A(t)+A(t)^\dagger}{2}$ 且 $H_2(t) = \frac{A(t)-A(t)^\dagger}{2i}$，假设 $H_1(t) \preccurlyeq 0$ 以确保稳定性。

在 [70], 中，通过将被积函数 $\pi^{-1}(1+k^2)$ 替换为一大类函数，对该公式进行了推广，从而得到一种量子算法，其求解 (1) 时对所有参数的依赖均接近最优。一般公式为

$$\mathcal{T}e^{\int_0^t A(s)\,\mathrm{d}s} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik}\mathcal{T}e^{i\int_0^t kH_1(s)+H_2(s)\,\mathrm{d}s}\mathrm{d}k, \tag{D2}$$

其中，核函数 $f(k)$ 满足温和的解析性、衰减和归一化条件 [70, 定理 5]。(D2) 中的积分被截断到有限区间 $[-R,R]$，并用有限和近似:

$$\begin{aligned}\mathcal{T}e^{\int_0^t A(s)\,\mathrm{d}s} &\approx \int_{-R}^{R} \frac{f(k)}{1-ik}\mathcal{T}e^{i\int_0^t kH_1(s)+H_2(s)\,\mathrm{d}s}\mathrm{d}k \\ &\approx \sum_{j=0}^{M-1} c_j U_j(t),\end{aligned} \tag{D3}$$

其中 $U_j(t) = \mathcal{T}e^{i\int_0^t k_j H_1(s)+H_2(s)\mathrm{d}s}$。权重 c_j 和求积点 k_j 取决于所选的数值积分方案。

可观测量 $u(t)^\dagger Ou(t)$ 可近似为

$$u(t)^\dagger Ou(t) \approx \sum_{j_1,j_2} c_{j_1}^* c_{j_2} u(t)^\dagger U_{j_1}^\dagger(t) O U_{j_2}(t) u(t). \tag{D4}$$

可以通过蒙特卡洛抽样选取数对 (j_1,j_2) 来计算该可观测量，其概率与 $c_{j_1}^* c_{j_2}$ 成正比；并在量子计算机上通过哈达玛测试 [71] 计算每个关联函数 $u(0)^\dagger U_{j_1}^\dagger(t) O U_{j_2}(t) u(0)$。

要以精度 ϵ 近似计算 (D2) 中的积分，所需的截断参数 R 取决于 $f(k)$ 的选择。原始 LCHS 公式 (D1) 是令 $f(k) = \pi^{-1}(1+ik)$ 得到的，它要求$K = \mathcal{O}(\frac{1}{\epsilon})$。使用改进的核函数 $f(z) = \frac{1}{2\pi e^{-2^\beta}e^{(1+iz)^\beta}}$（适用于 $\beta \in (0,1)$）时，截断值可选为$K = \mathcal{O}((\log(1/\epsilon))^{1/\beta}$。

我们在算法 2 中总结了实现混合 LCHS 算法的步骤 .

算法 2: 混合 LCHS 输入: 哈密顿量嵌入 $\tilde{H}_1, \tilde{H}_2, \tilde{O}$、编码初态 $\tilde{u}_0$、演化时间 t、样本数 N_{samples}。输出: 可观测量 $u(T)^\dagger Ou(T)$ 的估计值。1 对于 $i = 1,\ldots,N_{samples}$，执行 2 按照与 $c_{j_1}^* c_{j_2}$ 成正比的概率随机采样数对 (j_1,j_2)，其中 c_j 是式 (D3) 中的权重。3 应用哈达玛测试，估计关联函数 $\tilde{u}(0)^\dagger U_{j_1}^\dagger(T)\,\tilde{O}U_{j_2}(T)\tilde{u}(0)$，其中$U_{j_1}(T) = e^{it(k_{j_1}\tilde{H}_1+\tilde{H}_2)}$ 和 $U_{j_2}(T) = e^{it(k_{j_2}\tilde{H}_1+\tilde{H}_2)}$。4 根据式 (D4)，通过对各值取平均，估计 $u(T)^\dagger Ou(T) = \tilde{u}(T)^\dagger\tilde{O}\tilde{u}(T)$。

---

2. 薛定谔化

最近提出的薛定谔化方法 [27] 将式 (1) 中的线性常微分方程映射为薛定谔方程，其动力学具有幺正性。该过程采用扭曲相位变换，其中定义一个辅助变量 p 以及映射 $v(t,\ p) = e^{-p}u(t)$，适用于 $p > 0$。我们不直接求解式 (1)，而是转而求解线性对流方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}v(t,p) &= -H_1(t)\frac{\partial}{\partial p}v(t,p) + iH_2(t)v(t,p) \\ v(0,p) &= e^{-|p|}u_0,\end{aligned} \tag{D5}$$

其中, $H_1(t)$ 和 $H_2(t)$ 分别是 $A(t)$ 的实部和虚部，由笛卡尔分解 $A(t) = H_1(t) + iH_2(t)$ 给出。

(D5) 中的线性算子是反自伴的。因此，(D5) 是薛定谔方程的一个特例，可以使用标准的哈密顿量模拟技术求解。然后，通过对辅助变量积分，可以恢复 (1) 的解：

$$u(T) = \int_0^\infty v(T,p)\,\mathrm{d}p. \tag{D6}$$

实际上，形式为 $u(T)^\dagger O u(T)$ 的可观测量是通过后选择满足 $p>0$ 的测量结果来计算的，而 O 在系统寄存器上的期望值则按通常方式计算。

我们在算法 3 中总结了实现薛定谔化的步骤。

算法 3： 薛定谔化

输入： 哈密顿量嵌入 $\widetilde{H}_1, \widetilde{H}_2, \widetilde{O}$、编码初态 $\widetilde{u}_0$、演化时间 T、辅助量子比特数量 n_p。

输出： 可观测量 $u(T)^\dagger O u(T)$ 的估计值。

1 使用一个由 n_p 个量子比特组成的寄存器表示 p，制备初始态 $|\Psi_{\mathrm{Laplace}}\rangle$，其振幅与以下内容成正比拉普拉斯分布。

2 对 p寄存器应用量子傅里叶变换。

3 模拟 $\widetilde{H}_1 \otimes H_{\mathcal{F}} - \widetilde{H}_2 \otimes I$ 的演化，时间为 T，其中 $H_{\mathcal{F}}$ 是傅里叶频率的对角矩阵。

4 对 p寄存器应用逆量子傅里叶变换。

5 通过可观测量测量和后选择估计 $u(T)^\dagger O u(T)$。

3. 薛定谔化的证明

LCHS 与薛定谔化完成的任务完全相同，都是求解 (1)。事实上，我们指出，LCHS 与薛定谔化在数学上等价，因为两者都基于 LCHS 公式 (D1)。

定理 2. 设 $u(t)$ 为 *(1)* 中线性常微分方程的解，设 $v(t,p)$ 为偏微分方程 *(D5)* 的解。则 $u(t) = \int_0^\infty v(t,p)\mathrm{d}p$。

证明. 对 $v(t,p)$ 关于 p 进行傅里叶变换，得到

$$\hat{v}(t,k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{ipk} v(t,p)\,\mathrm{d}p. \tag{D7}$$

于是 (D5) 变为

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{v}(t,k) = i\left(kH_1(t) + H_2(t)\right)\hat{v}(t,k), \tag{D8}$$

初始条件为 $\hat{v}(0,k) = \sqrt{2/\pi}/(k^2+1)\,u_0$。薛定谔方程 (D8) 的解为

$$\hat{v}(x,k) = \mathcal{T} e^{i\int_0^t (kH_1(s)+H_2(s))\,\mathrm{d}s} \frac{\sqrt{2/\pi}}{k^2+1} u_0. \tag{D9}$$

原偏微分方程 $v(t,p)$ 的解可通过取逆傅里叶变换恢复：

$$v(t,p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ipk} \hat{v}(t,k)\,\mathrm{d}k\, u_0 \tag{D10}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ipk} \mathcal{T} e^{i\int_0^t (kH_1(s)+H_2(s))\,\mathrm{d}s} \frac{\sqrt{2/\pi}}{k^2+1}\,\mathrm{d}k\, u_0 \tag{D11}$$

$$= \int_{\mathbb{R}} \mathcal{T} e^{i\int_0^t (k(H_1(s)-p/t)+H_2(s))\,\mathrm{d}s} \frac{1}{\pi(k^2+1)}\,\mathrm{d}k\, u_0. \tag{D12}$$

由于 $H_1 \preccurlyeq 0$，当 $p \geq 0$ 时，$H_1 - p/t$ 为负。由 [28, 定理 1], 可得

$$v(t,p) = e^{-p} \mathcal{T} e^{\int_0^t A(s)\,\mathrm{d}s} u_0 = e^{-p} u(t), \qquad p \geq 0. \tag{D13}$$

因此，我们有 $u(t) = \int_0^\infty v(t,p)\mathrm{d}p$，因为 $\int_0^\infty e^{-p}\mathrm{d}p = 1$。

□

备注 4. 通过选择初始态为 [70] 中任意有效核函数的傅里叶变换，可以推广 Schr¨odinger 化方法。正确性的证明几乎完全相同，唯一的区别在于初始函数。与原始被积函数 $\pi^{-1}(1+\eta^2)$相比，这些核函数具有更好的衰减性质，因此在渐近区间内能够采用更小的截断区间。在附录 D 4 中，我们展示了一种直接制备拉普拉斯分布的方案。然而，我们对定理 3 的证明依赖于改进核函数的使用，并假设存在一种高效方案，能够将它们制备为量子态。

4. Schr¨odinger 化的实现

本节将详细介绍 Schr¨odinger 化的端到端实现。整体实现由三个部分组成：(1) 初态制备；(2) 对 (D5) 中线性对流方程进行量子模拟；以及 (3) 可观测量测量。

整体量子电路如图 2 所示。我们使用两个量子寄存器：一个用于 p，另一个用于 u。对于 p，我们采用含有 n_p 个量子比特的标准二进制编码，而 u 的编码则在很大程度上取决于目标应用。与 (D5) 的离散化解成比例的量子态记为 $|v(t,\ p)\rangle$。

为了在量子寄存器中表示 p 变量，我们首先将实空间截断到区间 $[-R, R]$。注意，端点 R 的选取应使其按 $\mathcal{O}(\|H_1\|t)$ 的尺度变化，因为波函数以与 $\|H_1\|t$ 成正比的速率沿负 p 方向传播。接下来，我们用 $N_p = 2^{n_p}$ 个网格点 p_0，.....，p_{N_p-1} 进行离散化，使得 $p_k = -R + k\Delta p$，其中 $\Delta p = \frac{2R}{N_p-1}$。对于 $j = 0$，.....，$N_p - 1$，我们用 $|j\rangle$ 表示点 p_j，其中 $|j\rangle$ 表示 j 的标准二进制表示。

a. 初态制备。Schr¨odingerization 的第一步是制备拉普拉斯分布的初态。由于 (D5) 的初始条件为 $v(0, p) = e^{-|p|}u_0$，我们必须制备一个 n_p 量子比特的量子态，其振幅与拉普拉斯分布 $f(p) = e^{-|p|}, p \in \mathbb{R}$ 成正比。这里，我们解决了这一初始化问题；据我们所知，此问题在以往文献中尚未得到充分讨论。

为简洁起见，以下省略隐含的归一化因子。计算可观测量时不会出现该归一化因子。形式上，我们的目标是近似量子态 $|\psi_{\text{Laplace}}\rangle = \sum_{j=0}^{N_p-1} e^{-|p_j|}\,|j\rangle$。

为了构造拉普拉斯分布的量子线路，我们首先考虑实数轴的右半部分，即指数分布 e^{-p} for $p \geq 0$。我们先说明如何制备一个 n 量子比特的量子态 $|\psi_{\text{Exp},\ n}\rangle = \sum_{j=0}^{2^n-1} e^{-|q_j|}\,|j\rangle$，其中 $q_j = jh$ and $h = \frac{R}{2^n}$。

一个关键观察是，$|\psi_{\text{Exp},\ n}\rangle$是一个乘积态：

$$|\psi_{\text{Exp},n}\rangle = \bigotimes_{i=0}^{n-1} \left(|0\rangle + e^{-2^{n-1-i}h}\,|1\rangle\right). \tag{D14}$$

对于每个 $i = 0$，.....，$n - 1$，单量子比特态 $\left(|0\rangle + e^{-2^{n-1-i}h}\,|1\rangle\right)$ 可利用角度为 $\theta_i = 2\arccos\left(\frac{1}{\sqrt{1+e^{-2(2^{n-1-i})h)}}}\right)$的一次泡利-$y$旋转方便地制备。因此，$|\psi_{\text{Exp},\ n}\rangle$ 可通过单层泡利-y旋转制备。

为了在 n_p 个量子比特上制备拉普拉斯分布，我们从指数分布的一个（n_p-1）量子比特态 $|\psi_{\text{Exp},\ n_p-1}\rangle$ 开始。我们引入一个额外的量子比特作为最高有效位。令 q_0，.....，q_{n_p-1} 表示这些量子比特，其中q_{n_p-1} 是新引入的最高有效位。我们在 q_{n_p-1}上施加 Hadamard门，使分布对称；随后依次施加 $n_p - 1$ 个 CNOT门，每个门均以q_{n_p-1} 为控制位、以 q_i 为目标位，适用于 $i = 0$，.....，$n_p - 2$；最后在 q_{n_p-1}上施加一个 X 门。完整的态制备量子线路如图6所示。

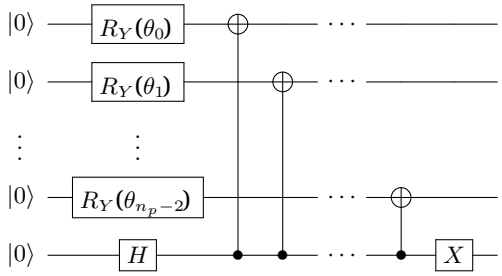

图6. 用于制备拉普拉斯分布的量子电路。

b. 哈密顿量模拟。接下来，我们讨论式（D5）所给出的线性对流方程的模拟。将其映射到薛定谔方程后，需要模拟的哈密顿量为 $-iH_1(t)\,\partial_p - H_2(t)$（在对 p离散化之前）。为实现 $-i\partial_p$，我们施加周期边界条件，并对辅助变量 p应用傅里叶谱方法。根据命题5，傅里叶频率矩阵可表示为一系列 1-局部 Pauli-z 算符之和：

$$H_{\mathcal{F}} = -\frac{\pi}{2R}\left(I - 2^{n_p}Z_{n_p} + \sum_{j=1}^{n_p} 2^{j-1}Z_j\right). \tag{D15}$$

$\widetilde{\ }$ $\widetilde{\ }$应用哈密顿量嵌入后，H_1 和 H_2 分别映射为 H_1 和 H_2。于是，要模拟的整体嵌入哈密顿量为

$$\widetilde{H}_S = \widetilde{H}_1 \otimes H_{\mathcal{F}} - \widetilde{H}_2 \otimes I, \tag{D16}$$

可以使用稀疏哈密顿量模拟的标准方法（例如乘积公式）进行模拟。最后，对 p寄存器应用逆量子傅里叶变换，得到

$$|\psi(t)\rangle = (I \otimes \mathcal{F}^{-1})e^{-itH_S}(I \otimes \mathcal{F})(|u_0\rangle \otimes |\psi_{\text{Laplace}}\rangle), \tag{D17}$$

其中 $\mathcal{F}$ 表示量子傅里叶变换。

c. 可观测量测量。Schr¨odinger 化的最后一步是根据 (D6) 对辅助变量积分，以恢复解 $u(t)$。由于对于 $p > 0$，有 $v(t,\ p) = e^{-p}u(t)$，因此

$$u(t)^\dagger O u(t) = 2\int_0^\infty v(t,p)^\dagger O v(t,p)\,\mathrm{d}p. \tag{D18}$$

因此，可以通过测量 p寄存器并对 $p > 0$的取值进行后选择，得到未归一化态，从而计算形如 $u(t)^\dagger O u(t)$的可观测量

$$\rho_u = \sum_{k=N_p/2}^{N_p-1} (I \otimes \langle k|)\,|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\,(I \otimes |k\rangle). \tag{D19}$$

请注意，这不是偏迹操作，并且 ρ_u 不是密度算符，因为 $\mathrm{Tr}\,\rho_u < 1$。最后，可观测量的估计值为

$$u(t)^\dagger O u(t) \approx 2\,\mathrm{Tr}(O\rho_u). \tag{D20}$$

附录 E：使用哈密顿量嵌入的量子常微分方程求解器

1. 通过乘积公式和理查森外推进行哈密顿量模拟

迄今为止，我们对 LCHS 和 Schr¨odingerization 的描述尚未指定执行哈密顿量模拟的方法。在这项工作中，我们考虑将乘积公式与理查森外推结合使用，从而能够以近乎最优的复杂度模拟常微分方程。

给定一个哈密顿量 $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_\gamma$，一个 Υ 阶段的乘积公式 $\mathcal{P}$ 定义为 [72]

$$\mathcal{P}(t) \coloneqq \prod_{\upsilon=1}^{\Upsilon}\prod_{\gamma=1}^{\Gamma} e^{-ita_{(\upsilon,\gamma)}H_{\pi_\upsilon(\gamma)}}, \tag{E1}$$

其中 Υ 是阶段数。对于 $2k$ 阶 Trotter-Suzuki公式，阶段数为 $\Upsilon = 2\cdot 5^{k-1}$。给定一个乘积公式 $\mathcal{P}$，若 $\mathcal{P}$ 是对称的（即 $\mathcal{P}(-t) = \mathcal{P}^{-1}(t)$），则其对称类 σ 为 2；否则为 1。在本节中，我们还令 $a_{\max} = \max_{\upsilon,\ \gamma}|a_{(\upsilon,\gamma)}|$。

我们使用记号 $[X_1X_2\ldots X_n]$ 表示右嵌套对易子：

$$[X_1X_2\ldots X_n] \coloneqq [X_1,[X_2,[\ldots,[X_{n-1},X_n]]]], \tag{E2}$$

并定义

$$\alpha_{\mathrm{comm}}^{(j)} \coloneqq \sum_{\gamma_1,\ldots,\gamma_j=1}^{\Gamma} \|[H_{\gamma_1} H_{\gamma_2} \ldots H_{\gamma_j}]\|. \tag{E3}$$

已证明， p阶分阶段乘积公式的误差具有对易子标度 [72]:

$$\|e^{-tiH} - \mathcal{P}(t)\| = \mathcal{O}(\alpha_{\mathrm{comm}}^{(p+1)} t^{p+1}) \tag{E4}$$

当 t 较小时。

直接应用乘积公式，以精度 ϵ模拟长时间演化时，运行时间会随 $1/\epsilon$ 呈多项式增长。在 [59], 中，研究表明，采用理查森外推形式的经典后处理，可将对 ϵ 的依赖改进为 $\log(1/\epsilon)$。

命题 6（理查森外推， [59]）。设 f： $[-1,1] \to \mathbb{R}$ 具有级数展开 n

$$f(s) = f(0) + \sum_{j=1}^{\infty} c_j s^j. \tag{E5}$$

设 $s_0 > 0$，并为整数 $r_1, \ldots, r_m$ 选取外推节点 $s_i = s_0/r_i$。然后，通过适当选择系数 b_k，理查森外推

$$F^{(m)}(s_0) = \sum_{k=1}^{m} b_k f(s_0/r_k) \tag{E6}$$

满足

$$|F^{(m)}(s_0) - f(0)| = \mathcal{O}(s_0^{m+1}). \tag{E7}$$

备注 5。外推的条件数取决于外推节点的选择，而外推节点会影响系数 b_j 的 1-范数。特别地，可以选择

$$r_k = r_{\mathrm{scale}} \left\lceil \frac{\sqrt{8}m}{\pi \sin(\pi(2k-1)/8m)} \right\rceil, \tag{E8}$$

从而得到 $\|b\|_1 = \mathcal{O}(\log m)$ [59]。

在哈密顿量模拟的语境下，我们定义

$$f(s) = \langle O_s \rangle \coloneqq \mathrm{Tr}\left(O \mathcal{P}(sT)^{1/s} \rho_0 (\mathcal{P}(sT)^{1/s})^\dagger \right), \tag{E9}$$

其中 $s > 0$ 表示特罗特数的倒数。我们关注零步长极限，对于该极限，$\lim_{s\to 0} \langle O_s \rangle = \mathrm{Tr}\left(O e^{-iTH} \rho_0 e^{iTH} \right) =: \langle O_0 \rangle$。对于 m 项理查森外推，我们计算估计值序列 $f(s_1), \ldots, f(s_m)$，并利用这些值估计时间演化可观测量 $\langle O_0 \rangle$ 的期望值。

引理 1（用于理查森外推的 Trotter 步数， [59, 推论 4]）。设 $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_\gamma$ 为一个哈密顿量， O 为一个可观测量， $T > 0$ 为演化时间， ρ_0 为一个初始态。设 $\mathcal{P}$ 为具有对称类 σ 的对称 p 阶 Υ 阶段乘积公式。考虑使用 m 项理查森外推（*E6*）估计 $\langle O_0 \rangle$: $=\mathrm{Tr}\left(O e^{-iTH} \rho_0 e^{iTH} \right)$，其估计值为 $\left\langle O_{s_j} \right\rangle$，其中 $j = 1, \ldots\ldots, m$。假设选择 s_1 使得 $a_{\max} \Upsilon s_1 \lambda T < 1/2$，并且选择足够大的 r_{scale} 使得

$$r_1 \geq (a_{\max} \Upsilon \lambda T)^{1 + \frac{1}{\sigma m} \lceil \frac{\sigma m}{p} \rceil} \left(\frac{4\|b\|_1}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{\sigma m}}. \tag{E10}$$

然后，若要以误差 ϵ估计 $\langle O_0 \rangle$， 单个量子线路中的 *Trotter* 步数上限 *is*

$$\mathcal{O}\left((a_{\max} \Upsilon \lambda T)^{(1+1/p)} \log(1/\epsilon) \right), \tag{E11}$$

其中 $a_{\max} =$ 最大值$_{v,\ \gamma}\, a_{(v,\gamma)}$, 以及

$$\lambda \coloneqq \sup_{\substack{j \in \sigma\mathbb{Z}_+ \geq \sigma m \\ 1 \leq l \leq K}} \left(\sum_{\substack{j_1,\ldots,j_l \in \sigma\mathbb{Z}_+ \geq p \\ j_1 + \cdots + j_l = j}} \prod_{\kappa=1}^{l} 2 \frac{\alpha_{\mathrm{comm}}^{(j_\kappa+1)}}{(j_\kappa+1)^2} \right)^{1/(j+l)}. \tag{E12}$$

引理 2（关于 λ 对于 k-局域哈密顿量 [73, 注3。2]）。 设 $H=\sum_{j_1,\ldots,j_k} H_{j_1,\ldots,j_k}$ 是一个 k-局域哈密顿量。设

$$|||H|||_1 = \max_{\ell}\left\{\max_{j_\ell}\sum_{j_1,\ldots,j_{\ell-1},j_{\ell+1},j_k}\|H_{j_1,\ldots,j_k}\|\right\} \tag{E13}$$

表示诱导 *1*-范数。然后，*(E12)* 的上界为

$$\lambda = \mathcal{O}\left(\left(\frac{\|H\|_1}{|||H|||_1}\right)^{1/p}|||H|||_1\right). \tag{E14}$$

2. 算法 1 的复杂度分析

我们严格分析使用 LCHS 或薛定谔化将问题约化为哈密顿量模拟时，算法 1 的计算复杂度。对于混合 LCHS 算法，哈达玛测试的每次执行都可以视为在模拟哈密顿量

$$H_{\mathrm{LCHS}} = -\left(k_{j_1}\widetilde{H}_1\otimes|0\rangle\langle 0| + k_{j_2}\widetilde{H}_1\otimes|1\rangle\langle 1| + \widetilde{H}_2\otimes I\right), \tag{E15}$$

其中 k_{j_1} 和 k_{j_2} 在 $-R$ 与 R 之间随机选取。类似地，薛定谔化需要模拟哈密顿量

$$H_S = \widetilde{H}_1\otimes H_{\mathcal{F}} - \widetilde{H}_2\otimes I \tag{E16}$$

其中 $H_{\mathcal{F}}$ 是 一个由傅里叶频率构成的对角矩阵。注意，对于步长 Δ， $\|H_{\mathcal{F}}\|_1=\mathcal{O}(1/\Delta p)$ p.

引理 3（ λ在 LCHS 和薛定谔化中的上界）。 设 H_1 和 H_2 为哈密顿量，其哈密顿量嵌入分别为 $\widetilde{H}_1=\sum_{\ell=1}^{L}\alpha_\ell^{(1)}P_\ell$ 和 $\widetilde{H}_2=\sum_{\ell=1}^{L}\alpha_\ell^{(2)}P_\ell$。假设 $\widetilde{H}_1$ 和 $\widetilde{H}_2$ 是 k-局部的，即所有 P_ℓ 至多对 k 个量子比特产生非平凡作用。设 H_{LCHS} 和 H_S 分别如 *(E15)* 和 *(E16)* 中所定义。那么，使用分阶段乘积公式 $\mathcal{P}$ 模拟 H_{LCHS} 或 H_S 时，对易子缩放前因子 λ （定义见 *(E12)* ）为

$$\lambda_{\mathrm{LCHS}} = \mathcal{O}\left((R\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1)^{1/p}(R|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1)^{1-1/p}\right) \tag{E17}$$

对于 *LCHS*,

$$\lambda_S = \mathcal{O}\left((\Delta p^{-1}\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1)^{1/p}(\Delta p^{-1}|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1)^{1-1/p}\right) \tag{E18}$$

对于薛定谔化。

证明。 对于 LCHS,

$$\|H_{\mathrm{LCHS}}\|_1 = \left\|-\left(\left(\frac{k_{j_1}+k_{j_2}}{2}\right)(\widetilde{H}_1\otimes Z)+\left(\frac{k_{j_1}-k_{j_2}}{2}\right)(\widetilde{H}_1\otimes Z)+\widetilde{H}_2\otimes I\right)\right\|_1 \tag{E19}$$

$$\le (R+1)\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\| \tag{E20}$$

$$= \mathcal{O}\left(R\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1\right). \tag{E21}$$

对于薛定谔化,

$$\|H_S\|_1 = \left\|\widetilde{H}_1\otimes H_{\mathcal{F}}-\widetilde{H}_2\otimes I\right\|_1 \tag{E22}$$

$$\le \|\widetilde{H}_1\otimes H_F\|_1+\|\widetilde{H}_2\otimes I\|_1 \tag{E23}$$

$$= \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Delta p}\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1\right). \tag{E24}$$

类似地，对于诱导 1-范数，我们有 $|||H_{\mathrm{LCHS}}|||_1=\mathcal{O}\left(R|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1\right)$ 和 $|||H_S|||_1=\mathcal{O}\left(\Delta p^{-1}|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1\right)$。

□

最后，我们通过定理 3 给出了正式的复杂度分析。

定理 3. 设 H_1 和 H_2 为哈密顿量，其哈密顿量嵌入分别由 $\widetilde{H}_1 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(1)} P_\ell$ 和 $\widetilde{H}_2 = \sum_{\ell=1}^{L} \alpha_\ell^{(2)} P_\ell$ 给出。假设 $\widetilde{H}_1$ 和 $\widetilde{H}_2$ 均为 k-局域。假设我们使用 ***LCHS*** 或薛定谔化，并结合 q 阶分阶段乘积公式和 ***Richard***外推，以相对误差 ϵ 估计 $u(T)^\dagger O u(T)$。则在引理 *1* 的条件下，每个量子线路中单量子比特门和双量子比特门的总数为

$$\mathcal{O}\left(kL\Upsilon^{2+o(1)}(a_{\max}T)^{1+o(1)}\log(1/\epsilon)^{3+o(1)}\left(\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1\right)^{o(1)}\left(|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1\right)^{1-o(1)}\right). \tag{E25}$$

使用 ***LCHS*** 时，以至少 $1-\delta$ 的概率、以相对误差 ϵ 估计 $u(T)^\dagger O u(T)$ 所需的样本复杂度（即不同量子电路的数量）为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\epsilon^2}\log\left(\frac{1}{\delta}\right)\right)$。

证明。根据引理 1，所需的最大特罗特数为 $\mathcal{O}\left((a_{\max}\Upsilon\lambda T)^{(1+1/p)}\log(1/\epsilon)\right)$，其中 λ 是 H_{LCHS} 或 H_S的对易子缩放前因子。随后，我们分别利用 LCHS 和薛定谔化的引理 3 对 λ 进行界定。

对于 LCHS，通过选择核函数 $f(k) = \frac{1}{2\pi e^{-2^\beta} e^{(1+ik)^\beta}}$，我们有 $\mathcal{O}(R) = \mathcal{O}((\log(1/\epsilon)^{1/\beta})$，其中 $\beta \in (0, 1)$ [70]。对于薛定谔化，我们有 $\|H_S\| = \mathcal{O}(\Delta p^{-1})$。谱方法的离散化误差取决于初始函数 $v(0, p) = \psi(p)u_0$的光滑性，其中我们选择 $\psi(p)$作为 $f(k) = \frac{1}{2\pi e^{-2^\beta} e^{(1+ik)^\beta}}$的傅里叶变换。由于 $f(k)$呈指数快速衰减，$\Delta p^{-1} = \mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$ 已足够。有关薛定谔化的详细分析，请参阅 [74, 第 4 节1]。为保持一般性，我们将 H_{LCHS} 和 H_S 的范数界定为$\mathcal{O}((\log(1/\epsilon))^2)$。因此，

$$\lambda = \mathcal{O}\left(\log(1/\epsilon)^2\left(\|\widetilde{H}_1\|_1+\|\widetilde{H}_2\|_1\right)^{1/p}\left(|||\widetilde{H}_1|||_1+|||\widetilde{H}_2|||_1\right)^{1-1/p}\right) \tag{E26}$$

对于门复杂度，对每一项进行指数化和分解会额外产生 $\mathcal{O}(kL\Upsilon)$ 的因子，从而得到所声称的门复杂度。

要以绝对误差 ϵ 估计 $u(T)^\dagger O u(T)$，使用重要性抽样时的样本复杂度为 $\mathcal{O}\left(\frac{\|O\|^2}{\epsilon^2}\log\left(\frac{1}{\delta}\right)\right)$，这是由使用 Hoeffding不等式 [28, 70] 得出的。对于相对误差 ϵ（即绝对误差 $\|O\|\epsilon$），样本复杂度简单地为 $\mathcal{O}\left(\frac{1}{\epsilon^2}\log\left(\frac{1}{\delta}\right)\right)$。 □

附录 F：资　　源估算：平流方程和非线性标量双曲型偏微分方程。

这里，我们明确给出正文中用于模拟偏微分方程的资源的经验估算。对于第 IV 节中的平流方程，资源估算如下所示。

编码/嵌入 \ N	8	16	32	64	128	256
标准二进制（泡利基）	2436552	26297612	218866288	1578432842	10836348028	70499518052
标准二进制（贝尔基）	763908	7458924	43759424	225588544	1012550952	4414678912
独热编码	639484	1744244	4769716	13250180	36951880	103520984
一元编码	10125952	40444376	130567302	366006134	1022829818	2857164016

表 I. 用于模拟线性平流方程 (14) 的电路深度，每维网格点数为 N。

编码/嵌入 \ N	8	16	32	64	128	256
标准二进制（泡利基）	2629832	28275344	234049044	1687121012	11502332116	74721198352
标准二进制（贝尔基）	767438	7605024	44760384	229395044	1027650880	4466948512
独热编码	2825728	15414848	84305536	468399872	2612538112	14638120448
一元编码	11014808	57868288	312940628	1736912548	9658783388	53824469152

表 II. 使用每维 N 个网格点模拟线性平流方程 (14) 所需的两量子比特门。

对于无　　第 V 节中的非线性标量双曲型偏微分方程，资源估算如下　　.

编码/嵌入 \ N_q	8	16	32	64	128	256
标准二进制（Pauli）	3438	10058	25149	56791	111434	173254
独热编码	448	896	1792	3584	7168	14336
一元编码	900	1348	2244	4036	7620	14788

表 III. 电路　　深度，用于模拟具有 N_q 个网格点的非线性标量双曲型偏微分方程 (18)　　q.

编码/嵌入 \ N_q	8	16	32	64	128	256
标准二进制（Pauli）	4030	12023	29496	66265	127828	196039
独热编码	4144	4816	6160	8848	14224	24976
一元编码	5132	5804	7148	9836	15212	25964

表 IV. {v1}的两量子比特门　　用于模拟非线性标量双曲型偏微分方程　　(18)，使用 N_q 个网格点， q。

附录 G：Schr¨odingerization 与 LCHS 的比较

我们比较了 Schr¨odingerization 与 LCHS 在模拟非厄米动力学时的表现。作为一个简单示例，我们考虑带虚纵向场的横场伊辛模型（TFIM）的模拟：

$$A = -iH = -\gamma_z \sum_{j=1}^{n} (I - Z_j) - i \left(J \sum_{j=1}^{n-1} Z_j Z_{j+1} + h \sum_{j=1}^{n} X_j \right). \tag{G1}$$

对于 Schr¨odingerization，我们考虑 $N_{\text{S,shots}}$ 每条电路的测量次数，其中 $N_{\text{S,shots}} \in \{10^2, 10^3, 10^4, 10^5\}$。混合 LCHS 算法 [28] 涉及蒙特卡洛抽样，除了散粒噪声外，还会引入抽样误差。这里，我们考虑由这两种随机性来源导致的综合标准误差。在模拟中，我们考虑 $N_{\text{LCHS,samples}}$个随机抽样的量子电路，以及 $N_{\text{LCHS,shots}}$ 每条电路的测量次数，总计 $N_{\text{LCHS,samples}} \cdot N_{\text{LCHS,shots}}$ 次电路执行。我们设定 $N_{\text{LCHS,samples}} = 100$ ，并选择 $N_{\text{LCHS,shots}}$ ，使 Schr¨odingerization 与 LCHS 的电路执行总次数相同。对于这两种方法，我们均采用二阶Trotter公式，使用 20 个 Trotter 步数。在图7中，我们绘制了通过这两种方法得到的 $\langle O \rangle = \sum_{j=1}^{n} \frac{I - Z_j}{2}$ 估计值。我们发现，当电路执行总次数相同时，两种方法得到的标准误差相近。

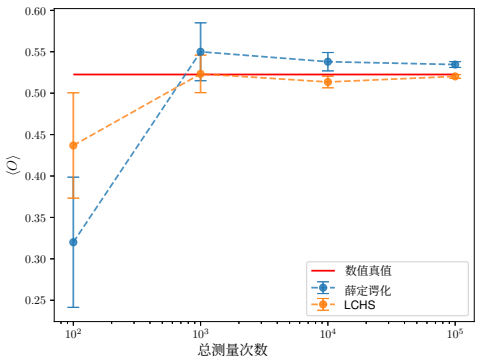

图7. 使用参数 $J = h = 1$、 $\gamma_z = 0.1$时， $\langle O \rangle$ 在 $t = 0.5$ 处的估计值。误差棒表示标准误差。薛定谔化的实现使用 $n_p = 7$ 个辅助量子比特来表示 $p \in [-R, R]$，其中我们设定 $R = 25$。LCHS 的实现使用相同的 R 进行蒙特卡洛抽样，其中 $[-R, R]$ 被离散为 128 个网格点。