通过对角块编码实现偏微分方程参数化的量子框架

Hiroshi Yano[1,*] 和 Yuki Sato[1†] *Toyota Central R&D Labs., Inc., 1-4-14 Koraku, Bunkyo-ku, Tokyo 112-0004, Japan*

我们研究一种用于偏微分方程（PDE）参数化的量子算法框架。对于一大类问题，如果离散参数场可以表示为对角形式，则可利用对角矩阵的块编码，或对角块编码，来表示具有结构化且可能相当复杂分布的空间变化系数。这种编码能够高效地对正向偏微分方程进行量子模拟，并自然地扩展到参数依赖设置。此类模拟是偏微分方程约束优化量子算法的关键基础操作，其目标是确定最优设计参数。我们通过对具有高斯参数分布的二维波动方程进行正向模拟和参数设计，在数值上展示了该框架。

arXiv:2603.01358v1 [quant-ph] 2 Mar 2026

I. 引言

用于模拟微分方程的量子算法，仍是在科学计算中实现算法加速的主要候选方案 [1–3]。偏微分方程也可通过离散化在量子计算机上处理 [4–7]。在这些方法中，对于结构适当的问题及访问模型，哈密顿量模拟和量子线性方程组求解器等关键子程序，其规模可仅随离散化系统的维度呈多对数增长 [8]。这促使人们在现实约束下仔细研究端到端实现。

偏微分方程约束优化的量子模拟[9–12] 可能更具实用性，旨在确保量子计算的输出有意义且易于获取。偏微分方程约束优化 [13, 14] 旨在在偏微分方程约束下，针对控制参数或设计参数最小化目标泛函。该优化任务计算量很大，因为每个优化步骤都可能需要正向计算和伴随计算。在最近的研究 [12], 中，我们提出了一种用于偏微分方程约束优化的量子算法，它整合了用于偏微分方程模拟与优化的量子算法。实现二者整合的关键，是将常规偏微分方程模拟转换为依赖于设计参数的偏微分方程模拟，具体做法是引入设计参数寄存器，并执行以该寄存器为条件的受控操作。然而，对设计参数的处理尚未得到深入探讨。例如，空间变化系数平移的高效实现仍然并非易事。

要实现端到端方案，就需要明确构造用于设计参数依赖偏微分方程模拟的量子线路。这一构造面临的核心挑战之一，是如何高效地编码以经典方式描述的偏微分方程数据，使其能够输入量子计算机。数据加载的成本往往决定了在实际资源估算下，所声称的算法加速能否实现。尤其是，与空间变化系数相关的数据量会随空间网格点的数量增长，而这正是量子优势的基础，因此必须高效实现。人们已提出多种量子数据加载方法 [15–23], , 也已出现用于从中进行选择的通用框架 [24]。因此，偏微分方程信息的编码方法仍有多种选择。

本文提出了一种用于执行参数依赖偏微分方程模拟的量子算法框架。我们的方法首先对所关注的一般线性偏微分方程进行离散化，由此可知，空间变化系数的数据加载可归结为对角矩阵的块编码，即对角块编码。已知在某些情况下，例如允许采用结构假设或近似编码时，对角块编码无需依赖振幅预言机即可高效构造，因此这一视角表明，量子偏微分方程模拟中的数据加载可以高效实现。借助这种对角块编码，我们提出了一种系统化方法来编码偏微分方程信息，并证明，只要对角块编码能够忠实地捕捉系数的结构性质，所得实现的门复杂度就是高效的。值得注意的是，这一观点可直接推广到设计参数依赖算子的实现。随后，我们讨论将设计参数表示为量子预言机的方式如何影响可用的参数化。通过适当选择谕示，可以实现广泛的参数化，包括平移。

本文其余部分安排如下：第II节介绍本研究的背景，包括偏微分方程量子算法、偏微分方程约束优化以及量子数据加载方法。第III 节介绍所提出的框架，给出用于正向模拟的块编码的一般构造方法

* hyano@mosk.tytlabs.co.jp

二阶与一阶线性偏微分方程的时间演化，并介绍如何利用设计参数对其进行参数化。第IV节通过数值示例说明该框架：针对二维波动方程，显式构造用于正向模拟和偏微分方程约束优化中目标函数的块编码，其中高斯参数分布编码在一个对角算子中。最后，我们在第V节总结本研究的主要结果，并讨论未来可能的发展方向。

II. 背景

A. 偏微分方程的量子算法

人们提出了许多用于模拟酉动力学的量子算法，这类算法称为哈密顿量模拟算法。这些算法在渐近复杂度上的改进，对于降低经典计算难以处理的模拟问题的成本至关重要。此外，还可以通过哈密顿量模拟的线性组合 [25, 26], 薛定谔化 [27, 28], 等技术[29, 30]来模拟线性非酉动力学。最简单的线性非酉动力学之一，由以下与时间无关的齐次线性常微分方程（ODE）生成

$$\frac{dw(t)}{dt} = -Aw(t), \quad w(0) = w_0. \tag{1}$$

在量子查询模型中，模拟这种动力学的量子复杂度通常以对两个酉算子的查询次数来衡量：一个用于制备初始态 $|w_0\rangle$，另一个用于制备算子A。此外，通过空间离散化，偏微分方程可化为常微分方程，如式（1）所示，从而可以使用量子计算机进行模拟。当前面临的重大挑战，是将这些量子算法应用于实际问题，同时降低总体成本。具体而言，主要有两项挑战：高效地将偏微分方程信息（包括初始/边界条件和控制方程）加载到量子计算机中，以及从解态中高效提取所需信息。

B. 量子数据加载

如上所述，量子偏微分方程模拟的整体实现要求将以经典方式描述的偏微分方程信息高效地加载到量子电路中。如果这些经典数据中不存在可利用的结构，这种编码将在量子复杂度方面产生难以承受的开销。例如，对于一般的稠密无结构矩阵 $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$，使用以下谕示：$O|0\rangle|i\rangle|j\rangle \mapsto (A_{ij}|0\rangle + \sqrt{1-A_{ij}}|1\rangle)|i\rangle|j\rangle$，假设 $|A_{ij}| \le 1, \ \forall i, \ j$。要实现该谕示，标准方法需要 $O(N^2)$ 个 CNOT操作 [31]。

另一方面，在可以假设数据具有结构的情况下，有许多高效方法可供使用。例如，如果目标量子态的振幅稀疏，其制备成本与非零元素的数量成正比 [19]。同样，如果该量子态具有低纠缠度，矩阵乘积态（MPS）形式体系便可实现高效实现 [19, 20]。

本文聚焦于对角矩阵的块编码，下文将其称为对角块编码。具体而言，当对角矩阵的元素以函数值的形式给出时，存在高效的方法 [23, 32–35]。一个典型示例是，在量子相位估计中，利用对角块编码在辅助量子比特上制备 Kaiser 窗函数。在偏微分方程参数信息的编码方面，这些方法也已得到应用。例如，文献 [36] 采用了与文献 [33] 类似的量子线路，构造了具有周期边界条件的椭圆算子的对角块编码。

C. 《Quantum》偏微分方程约束优化

求解以偏微分方程形式约束的优化问题，是最具挑战性的计算问题之一，因为这需要优化技术与偏微分方程数值模拟的相互配合。对于式（1）所示形式的偏微分方程，在进行空间离散化并引入设计参数 $\xi \in \Xi$，其中 Ξ表示设计空间（包括连续变量和离散变量）后，关于 ξ 的偏微分方程约束优化问题可表述为

$$\begin{aligned} &\min_{\xi\in\Xi} \mathcal{F}(w(t;\xi)) \\ &\text{s.t.} \quad \frac{dw(t;\xi)}{dt} = -A(\xi)w(t;\xi), \quad w(0;\xi) = w_0, \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$\mathcal{F}(w(t;\xi))$ 表示参数化偏微分方程解态 $w(t;\xi)$ 的目标函数。我们预期，借助量子偏微分方程模拟的加速，这个问题也能在量子计算机上高效求解。具体而言，将优化与偏微分方程模拟联系起来的关键技术，可表述为构造目标函数 $\mathcal{F}(\cdot)$ 的块编码 $\hat{\mathcal{F}} := \sum_\xi \mathcal{F}(w(t;\xi))|\xi\rangle\langle\xi|$，从而能够使用量子优化算法 [37, 38]。尽管将量子偏微分方程模拟用作子程序所需的量子资源多于独立模拟，但预计它可以解决输出问题，即从偏微分方程解态中提取所需信息，也就是最优设计参数值。为了构造 $\mathcal{F}$ 的块编码，需要进行 sim-

化一个设计参数相关常微分方程

$$\frac{d\tilde{w}(t;\xi)}{dt} = -\tilde{A}(\xi)\tilde{w}(t;\xi), \quad \tilde{A}(\xi) \coloneqq \sum_{\xi} |\xi\rangle\langle\xi| \otimes A(\xi), \tag{3}$$

以初始态 $\tilde{w}(0;\xi) = |\psi\rangle \otimes w_0$，其中 $|\psi\rangle = \sum_{\xi} \psi_\xi |\xi\rangle$ 是一个任意量子态，且满足 $\psi_\xi \in \mathbb{C}$。由于上述方程可视为式（1）中的线性常微分方程，因此可以用第 IIA 节介绍的量子算法进行模拟。核心挑战在于降低每次查询 $A(\xi)$ 的成本，同时保留对 $A(\xi)$ 参数化的灵活性；本研究旨在应对这一挑战。

III. 所提出的框架

我们提出了一种量子算法框架，用于模拟具有空间变化系数的偏微分方程，并将其扩展至参数依赖设置。第 IIIA 节概述了我们考虑的偏微分方程类别，并推导出方程（ A中出现的相关算子1）。在第 IIIB 节中，我们展示如何通过块编码构造将算子 A编码到量子电路中。最后，第 IIIC 节介绍了按设计参数对 A 进行参数化的策略 ξ，从而能够模拟方程（3）中的设计参数相关常微分方程。

A. 感兴趣的问题

我们考虑以下关于时间的二阶与一阶线性偏微分方程，它们定义在有界开集 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$上，空间坐标为 $\boldsymbol{x}$，其中 d 表示空间维数:

$$\varrho(\boldsymbol{x})\frac{\partial^2 u(t,\boldsymbol{x})}{\partial t^2} + \zeta(\boldsymbol{x})\frac{\partial u(t,\boldsymbol{x})}{\partial t} - \nabla\cdot\kappa(\boldsymbol{x})\nabla u(t,\boldsymbol{x}) + \gamma(\boldsymbol{x})u(t,\boldsymbol{x}) = 0, \tag{4}$$

and

$$\frac{\partial u(t,\boldsymbol{x})}{\partial t} - \nabla\cdot\kappa(\boldsymbol{x})\nabla u(t,\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x})\cdot\nabla u(t,\boldsymbol{x}) + \gamma(\boldsymbol{x})u(t,\boldsymbol{x}) = 0, \tag{5}$$

在适当的初始条件下。在将这些偏微分方程转换为常微分方程（1）的各种映射方法中，我们遵循参考文献 [7], 中的相同步骤，其中

方程（4）和（5）表示为

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\sqrt{\varrho}\dot{u}\\ \sqrt{\kappa}\nabla u\\ \sqrt{\gamma}u\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}\frac{\zeta(\boldsymbol{x})}{\varrho(\boldsymbol{x})} & -\frac{1}{\sqrt{\varrho(\boldsymbol{x})}}\nabla^\top\sqrt{\kappa(\boldsymbol{x})} & \sqrt{\frac{\gamma(\boldsymbol{x})}{\varrho(\boldsymbol{x})}}\\ -\sqrt{\kappa(\boldsymbol{x})}\nabla\frac{1}{\sqrt{\varrho(\boldsymbol{x})}} & 0 & 0\\ -\sqrt{\frac{\gamma(\boldsymbol{x})}{\varrho(\boldsymbol{x})}} & 0 & 0\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}\sqrt{\varrho}\dot{u}\\ \sqrt{\kappa}\nabla u\\ \sqrt{\gamma}u\end{pmatrix}, \tag{6}$$

and

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\nabla\cdot\kappa(\boldsymbol{x})\nabla - \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x})\cdot\nabla - \gamma(\boldsymbol{x})\right)u. \tag{7}$$

我们将区域 Ω 离散为包含 $N = \prod_{\mu=0}^{d-1} N_\mu$ 个点的网格（本文假设 $N_\mu = 2^{n_\mu}$），并将标量场 u 表示为 $[u\ x^{[0]}\ \ u\ x^{[1]}\ \ \ldots\ u\ x^{[N-1]}]^\top$，其中 $x^{[j]}$ 表示第 j 个网格点的坐标。随后，通过引入一个对角算子

$$C_f \coloneqq \sum_{j=0}^{2^n-1} f(\boldsymbol{x}^{[j]})\,|j\rangle\langle j|\,, \tag{8}$$

表示空间变化系数 $f(\boldsymbol{x})$，连同前向和后向差分算子 D_μ^+ 和 D_μ^-，与式（6）和（7）相对应的算子可以写成

$$\begin{aligned}A^{(2\mathrm{nd})} = {}& |0\rangle\langle 0|\otimes C_\varrho^{-1}C_\zeta - \sum_{\mu=0}^{d-1}|0\rangle\langle\mu+1|\otimes C_\varrho^{-\frac{1}{2}}D_\mu^+C_\kappa^{\frac{1}{2}}\\ &+ |0\rangle\langle d+1|\otimes C_\varrho^{-\frac{1}{2}}C_\gamma^{\frac{1}{2}} - \sum_{\mu=0}^{d-1}|\mu+1\rangle\langle 0|\otimes C_\kappa^{\frac{1}{2}}D_\mu^-C_\varrho^{-\frac{1}{2}}\\ &- |d+1\rangle\langle 0|\otimes C_\varrho^{-\frac{1}{2}}C_\gamma^{\frac{1}{2}} + \mathrm{b.c.},\end{aligned} \tag{9}$$

and

$$\begin{aligned}A^{(1\mathrm{st})} = -\Bigg(&\frac{1}{2}\sum_{\mu=0}^{d-1}(D_\mu^+C_\kappa D_\mu^- + D_\mu^-C_\kappa D_\mu^+)\\ &+\sum_{\mu=0}^{d-1}(C_{\beta_\mu^+}D_\mu^- + C_{\beta_\mu^-}D_\mu^+) + C_\gamma\Bigg) + \mathrm{b.c.},\end{aligned} \tag{10}$$

分别。此处，$\beta_\mu^+(\boldsymbol{x}) = \max(\beta_\mu(\boldsymbol{x}),0)$，且 $\beta_\mu^-(\boldsymbol{x}) = \min(\beta_\mu(\boldsymbol{x}),0)$，而b.c. 表示由边界条件产生的其余项。关于这些变换的细节，我们参阅文献 [7]。我们注意到，其他映射（例如文献 [39, 40],中所提出的映射）也能得到类似的算子结构，即它由对角算子 C_f 与差分算子 D之积的线性组合构成。

鉴于上述内容，我们的首要目标是构造算子 A的块编码，重点是 C_f的对角块编码。我们的第二个目标是概述为参数化偏微分方程模拟构造算子 $A(\xi) = \sum_\xi |\xi\rangle\langle\xi| \otimes A(\xi)$的块编码的方法。

B. 块编码

在此，我们介绍如何构造算子 A，其中空间变化系数通过对角块编码实现编码，并分析其查询复杂度和门复杂度。构造对角块编码[17, 23, 32–35]存在若干种方法 C_f。由于适当的构造方法取决于 f的具体形式，我们在此不局限于某一种特定方法；相反，我们假设可以访问α_f、a_f、ϵ_f-块编码 C_f，并重点讨论如何由此构造算子 A的块编码。我们的分析首先考虑存在一般的α_f、a_f、ϵ_f-块编码 C_f时的查询复杂度。接着，在假设对角块编码采用参考文献 [34]中的 LCU 傅里叶方法实现的条件下，我们推导其门复杂度。类比这一分析，只需代入相应的门开销，即可推导任意其他对角块编码的门复杂度。

1. *Second-order linear PDE*

我们首先假设可以访问$_{11}$ $_1C_\varrho^{-2}$、C_κ^2、C_ζ和 C_γ^2的块编码。

假设 1（系数 $A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码）。我们可以访问以下块编码:

- $U_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$, an $(\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, \epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}})$-block-encoding of $C_\varrho^{-\frac{1}{2}}$, and its inverse
- $U_{\sqrt{\kappa}}$, an $(\alpha_{\sqrt{\kappa}}, a_{\sqrt{\kappa}}, \epsilon_{\sqrt{\kappa}})$-block-encoding of $C_\kappa^{\frac{1}{2}}$
- U_ζ, an $(\alpha_\zeta, a_\zeta, \epsilon_\zeta)$-block-encoding of C_ζ
- $U_{\sqrt{\gamma}}$, an $(\alpha_{\sqrt{\gamma}}, a_{\sqrt{\gamma}}, \epsilon_{\sqrt{\gamma}})$-block-encoding of $C_\gamma^{\frac{1}{2}}$

注意，边界条件的残差项可包含在差分算子 D_μ^+ 和 D_μ^- 中，我们将修改后的差分算子记为 $D_\mu^{+'}$ 和 $D_\mu^{-'}$。为简单起见，我们假设对于每个 μ，两个算子的算子范数均有界于 α_D，且它们的块编码至多使用 a_D 个辅助量子比特。

假设 2（差分算子的块编码）。我们可以访问以下块编码:

- $U_{D_\mu^{+'}}$, an $(\alpha_D, a_D, 0)$-block-encoding of $D_\mu^{+'}$
- $U_{D_\mu^{-'}}$, an $(\alpha_D, a_D, 0)$-block-encoding of $D_\mu^{-'}$

对于 $\mu = 0, \ldots\ldots, d-1$。

例如，参见文献 [12, 附录A]，了解具体构造。

在这些假设下，我们给出 $A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码的查询复杂度。

定理 3（$A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码的查询复杂度）。假设我们可以访问假设 *1* 和 *2* 中的块编码。那么，我们可以构造一个 $A^{(2\mathrm{nd})}$ 的 $\left((d+2)\max(\alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_\zeta, \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_{\sqrt{\kappa}}\alpha_D\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_{\sqrt{\gamma}}) a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + \max(a_{\sqrt{\kappa}}, a_\zeta, a_{\sqrt{\gamma}}) + a_D + 1, \quad (d+2)\max(\alpha_D\alpha_{\sqrt{\kappa}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_D\epsilon_{\sqrt{\kappa}}, \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_{\sqrt{\gamma}} + \alpha_{\sqrt{\gamma}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, \alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_\zeta + 8\alpha_\zeta\sqrt{\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}})\right)$-块编码；该构造使用 $U_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$ 的受控版本 $2d+2$ 次、$U^\dagger_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$ *1* 次、$U_{\sqrt{\kappa}}$ $2d$ 次、U_ζ *1* 次、$U_{\sqrt{\gamma}}$ *1* 次、$U_{D_\mu^{+'}}$ d 次，以及 $U_{D_\mu^{-'}}$ d 次。

接下来，我们分析构造上述块编码所需的门复杂度。为此，我们假设所有空间变化系数都可以用 K 阶傅里叶级数近似，从而能够显式构造假设 1中的块编码。

定理 4（$A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码的门复杂度）。设 n 可被 d 整除，且对所有μ均有 $n_\mu = n/d$。当我们对假设 *1*采用最高次数为 K 的 *LCU* 傅里叶变换 *[34]*，并对假设 *2*采用附录*A]* 中的方法时，构造定理 *3* 中的$A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码需要 $\mathcal{O}(dK^d + dn\log K + n^2)$ 个双量子比特门。

上述定理的证明细节见附录A1。我们可以看到，在假设空间变化系数能够通过傅里叶展开高效近似的情况下，按照定理 3 中推导出的 $A^{(2\mathrm{nd})}$ 的块编码构造方法，可以避免复杂度与网格点数成正比，也就是 $\mathcal{O}(2^n)$ 的指数增长。我们强调，这一观察并不限于基于傅里叶的构造，而是更普遍地适用于任何能够以关于 n 的多项式门复杂度实现 C_f 的块编码的方法。然而，一个关键问题是如何处理由此产生的 $A^{(2\mathrm{nd})}$ 块编码误差。由于论证过程类似，这里省略相关内容，并在 $A^{(1\mathrm{st})}$ 的讨论中予以说明。

2. *First-order linear PDE*

为简便起见，我们假设对于每个 μ， $C_{\beta_\mu^+}$和 $C_{\beta_\mu^-}$的算子范数均不超过 α_β，且其块编码最多使用 a_β 个辅助量子比特。

假设5（系数的块编码，$A^{(1\mathrm{st})}$）。我们可以访问以下块编码:

- U_κ, an $(\alpha_\kappa, a_\kappa, \epsilon_\kappa)$-block-encoding of C_κ
- U_γ, an $(\alpha_\gamma, a_\gamma, \epsilon_\gamma)$-block-encoding of C_γ
- $U_{\beta_\mu^+}$, an $(\alpha_\beta, a_\beta, \epsilon_\beta)$-block-encoding of $C_{\beta_\mu^+}$
- $U_{\beta_\mu^-}$, an $(\alpha_\beta, a_\beta, \epsilon_\beta)$-block-encoding of $C_{\beta_\mu^-}$

基于上述假设以及对差分算子的假设，我们得到以下查询复杂度。

定理 6（ $A^{(1st)}$的块编码查询复杂度）。假设我们可以使用假设5和2中的块编码。那么，我们可以构造一个 $A^{(1st)}$ 的 $((2a_D+\lceil 2\ 4d+1\ \rceil\ 3d+1\quad 3d+1\quad \alpha_\kappa\alpha_D^2\ \alpha_\beta\alpha_D\ \alpha_\gamma\ ,\quad a_\kappa\ a_\beta\ +)\ max(,,)\ max(,)\ log(),()\ max(,,))$-块编码，其中受控版本的 $2d$ 使用 U_κ 次、d 使用 $U_{\beta_\mu^+}$ 次、d 使用 $U_{\beta_\mu^-}$ 次、U_γ 使用 1 次、$3d$ 使用 $U_{D_\mu^{+\prime}}$ 次，以及 $3d$ 使用 $U_{D_\mu^{-\prime}}$ 次。

此外，假设5 和2 中显式块编码构造的可用性使我们能够分析门复杂度。

定理 7（对$A^{(1st)}$进行块编码的门复杂度）。设 n 可被 d 整除，且 $n_\mu = n/d$ 对所有μ均成立。对于假设 [34] 5，使用最高次数为 K 的 LCU 傅里叶变换来处理假设 5，并采用附录A]的方法处理假设 2，根据定理 $A^{(1st)}$ 6 对 $A^{(1st)}$ 进行块编码需要 $\mathcal{O}(dK^d + dn\log K + n^2)$ 个双量子比特门。

上述定理的证明细节见附录 A2。同样，假设系数的傅里叶近似可以高效实现，定理 6 的方法避免了 n中的指数标度。此外，通过确定达到给定最终块编码误差所需的近似次数K ，可以进行更详细的分析，以处理 $A^{(1st)}$。附录中的推论13 表明，当空间变化系数可以用傅里叶级数很好地近似时，可以构造一个误差不超过 ϵ 的 $A^{(1st)}$ 块编码，其门复杂度为多项式(n)。

C. 参数化

这里我们考虑引入设计参数 ξ ，以参数化空间变化系数。就算子 $A^{(2nd)}$ 和 $A^{(1st)}$而言， C_f式（8）中定义的对角算子可推广为参数化形式，记作 C_f（ξ）：$= \sum_{j=1}^{2^n-1} f$（$\boldsymbol{x}^{[j]}$; ξ）$|j\rangle\langle j|$。在量子偏微分方程约束优化中，需要对˜的 A（ξ）进行块编码，以模拟式（3）中依赖于设计参数的常微分方程。值得注意的是，由于可以采用上一小节所述的相同步骤，构造˜的块编码 A（ξ）可归结为构造.....的块编码

$$\tilde{C}_f(\xi) := \sum_\xi |\xi\rangle\langle\xi| \otimes C_f(\xi) = \sum_\xi \sum_j f(\boldsymbol{x}^{[j]}; \xi)\, |\xi\rangle\langle\xi| \otimes |j\rangle\langle j| \,. \tag{11}$$

因此，这里的重点是构造˜ C_f(ξ)的块编码。为此，我们特别关注所用到的量子性质，或者等价地说，采用哪些量子预言机来引入设计参数 ξ。本文讨论了文献 [37, 41] 中提出的关于变量 ξ的函数 g(ξ)的三种量子预言机。鉴于我们的目标是实现对角块编码，从一开始就围绕对角块编码组织讨论，可以使表述更加简洁。

第一种是概率预言机，

$$U_{\text{prob}} : |0^a\rangle\,|\xi\rangle \mapsto \left(\sqrt{p(\xi)}\,|0\rangle\ |\psi_\xi^{(0)}\rangle + \sqrt{1-p(\xi)}\,|1\rangle\ |\psi_\xi^{(1)}\rangle\right)|\xi\rangle\,, \tag{12}$$

其中 p(·) 是一个取值于 $[0,1]$, 的实值函数，且 $|\psi_\xi^{(0)}\rangle$ 和 $|\psi_\xi^{(1)}\rangle$ 是任意的归一化量子态。注意， $W := U^\dagger$ 概率$(Z \otimes I^{\otimes a-1})U_{\text{prob}}$ 可以视为以下对象的 (1， a， 0)-对角块编码

$$\sum_\xi g(\xi)\,|\xi\rangle\langle\xi|\,, \tag{13}$$

其中 $g(\xi) = 2p(\xi) - 1$ [41]。第二种是相位预言机，

$$U_{\text{phase}} : |0^a\rangle\,|\xi\rangle \mapsto e^{ig(\xi)}\,|0^a\rangle\,|\xi\rangle\,, \tag{14}$$

对于一个取值于 $[-1,1]$ 的实值函数 g(·)。加载数据时通常不会使用相位，但在某些情况下，相位信息可能有助于高效表示空间变化系数。注意，相位预言机可以视为以下对象的 (1， a， 0)-对角块编码

$$\sum_\xi e^{ig(\xi)}\,|\xi\rangle\langle\xi|\,. \tag{15}$$

第三种是二进制预言机，

$$U_{\text{binary}} : |0^a\rangle\,|\xi\rangle \mapsto |\tilde{g}(\xi)\rangle\,|\xi\rangle\,, \tag{16}$$

其中， g(·) 是实值函数， $\tilde{g}$(·) 表示其定点二进制表示。例如，它可用于将空间变量 x 参数化为 ξ。由于量子偏微分方程模拟通常使用计算基来表示空间坐标，因此相应的比特串可用于控制空间变换。该二进制预言机仅由按位运算构成，因此不存在相应的块编码表示。

在本小节余下部分，我们将通过明确构造˜的块编码，展示几种有用的参数化方式 C_f(ξ)。为具体起见，我们基于参考文献 [34] 关于式（13）和（15）中对角块编码的结果，以及参考文献[16]关于二进制预言机的结果。

1. Probability

我们介绍概率预言机最直接的一种用法。对于形式为 $f(x;\xi)=\sum_k \xi_k\phi_k(x)$ 的函数参数化，其中包含某个基函数$\{\phi_k(x)\}$，我们将 $C_f(\xi)$ 分解为

$$\tilde{C}_f(\xi)=\sum_{k=0}^{M-1}(I^{\otimes mk}\otimes\sum_{\xi_k}\xi_k\left|\xi_k\right\rangle\!\left\langle\xi_k\right|\otimes I^{\otimes m(M-1-k)}\otimes C_{\phi_k}), \tag{17}$$

与离散化算子 C_{ϕ_k} 对应的 $\phi_k(x)$。这种块编码可以通过对采用如下形式（13）的对角块编码所构造的块编码矩阵进行线性组合来构造，其中 $g(\xi)=\xi$，并且还可以访问 $\{C_{\phi_k}\}$的块编码，这与参考文献 [12]中的做法类似。在电路层面，对 C_f 的块编码进行参数化，归结为添加$\sum_\xi \xi\left|\xi\right\rangle\!\left\langle\xi\right|$的对角块编码。

这种表示涵盖了许多空间变化系数。当基函数表示局部区域时，我们可以线性地调整该区域内的振幅。当函数可以通过切比雪夫逼近高效表示时，便可以对切比雪夫系数进行参数化。例如，参数化函数 $f((x,\ y);\xi)=-(x^2+y^2)+\xi$可用于调整圆的半径。其块编码可以通过对$I^{\otimes m}\otimes\sum_x x^2\left|x\right\rangle\!\left\langle x\right|\otimes I^{\otimes n_y}$、$I^{\otimes m}\otimes I^{\otimes n_x}\otimes\sum_y y^2\left|y\right\rangle\!\left\langle y\right|$和$\sum_\xi \xi\left|\xi\right\rangle\!\left\langle\xi\right|\otimes I^{\otimes n_x+n_y}$的块编码进行线性组合来构造。对于类似于$\sum_x x^2\left|x\right\rangle\!\left\langle x\right|$的对角算子，可以利用参考文献[34]提出的第 k个切比雪夫基函数的 $(1,\ \lceil\log_2(n_x)\rceil,\ 0)$-块编码。然后，进一步利用量子奇异值变换对 $\mathrm{sign}(\cdot)$ 进行多项式逼近，并结合 $-(x^2+y^2)+\xi$的对角块编码，即可轻松得到参数化函数$f((x,\ y);\xi)=\mathrm{sign}(-(x^2+y^2)+\xi)$ 的对角块编码。这种函数可以逼近一个空间变化系数：圆内取值为 1，圆外取值为 -1，并以圆的半径作为参数ξ。

2. Phase

当函数可以高效地表示为以相位为参数的形式时，相位预言机可能会很有用。主要的表示形式是傅里叶级数逼近。例如，当函数可以近似表示为 $f(x;\ \xi)=\sum_k c_k e^{i\pi k(x+\xi)}$时，可以使用相位预言机，或形如（15）且$g(\xi)=\pi k\xi$的对角块编码来表示空间平移。可以利用文献 [34]中提出的次傅里叶基函数的（1，0，0）块编码。

在第IV节针对二维系统进行的数值演示中，已知函数 $f(x,\ y)$可表示为有限傅里叶级数其形式为

$$f(x,y)\approx f^F_{(K_x,K_y)}(x,y)=\sum_{k=-K_x}^{K_x}\sum_{l=-K_y}^{K_y}c_{k,l}e^{i\pi kx}e^{i\pi ly}, \tag{18}$$

我们将空间平移 $\xi=(\xi_x,\ \xi_y)$ 作为一个独立的相位因子来处理:

$$f^F_{(K_x,K_y)}(x+\xi_x,y+\xi_y)=\sum_{k=-K_x}^{K_x}\sum_{l=-K_y}^{K_y}c_{k,l}e^{i\pi k\xi_x}e^{i\pi l\xi_y}e^{i\pi kx}e^{i\pi ly}. \tag{19}$$

按照文献 [34], , 对变量 ˜、 x、 y、 ξ_x 和 ξ_y 进行离散化后， $C_f(\xi)$ 可以近似表示为

$$\begin{aligned}&\tilde{C}_{f^F_{(K_x,K_y)}}(\xi) \qquad (20)\\ &=\sum_{\xi_x,\xi_y}\left|\xi_y,\xi_x\right\rangle\!\left\langle\xi_y,\xi_x\right|\otimes C_f(\xi_x,\xi_y)\\ &=\left(U_{\xi_x}^{-K_x}\otimes U_{\xi_y}^{-K_y}\otimes U_x^{-K_x}\otimes U_y^{-K_y}\right)\\ &\quad\times\left(\sum_{\mu_x=0}^{2K_x}\sum_{\mu_y=0}^{2K_y}\lambda_{\mu_x,\mu_y}U_{\xi_x}^{\mu_x}\otimes U_{\xi_y}^{\mu_y}\otimes U_x^{\mu_x}\otimes U_y^{\mu_y}\right),\end{aligned} \tag{21}$$

其中，我们引入变量变换 $\mu_x=k_x+K_x$、$\mu_y=k_y+K_y$、$\lambda_{\mu_x,\ \mu_y}=c_{\mu_x-K_x,\ \mu_y-K_y}$，以及一个作用于寄存器 $r=x$、y、ξ_x、ξ_y 上的 n 比特酉算子 $U_r=e^{i\pi H_r^F}$，其满足 $H_r^F=\sum_{j=0}^{2^n-1}j/(2^n-1)\left|j\right\rangle\!\left\langle j\right|$。由于式（21）中的表示形式是幺正算子线性组合（LCU），因此可以通过 LCU 方法构造 $C_{f^F(K_x,K_y)}(\xi)$ 的 $(\sum_{\mu_x=0}^{2K_x}\sum_{\mu_y=0}^{2K_y}\left|\lambda_{\mu_x,\mu_y}\right|,\lceil\log_2(2K_x+2K_y+2)\rceil,\ 0)$ 块编码。从这个例子可以看出，只需在设计参数寄存器上添加受控相移门，就能构造式（11）中对角算子的块编码。在数值演示中，我们明确构造了一个对以中心平移为参数的二维高斯函数的截断傅里叶级数逼近进行编码的对角块编码，如（ξ_x,ξ_y）所示。

3. Binary

根据定义，二进制预言机并未以块编码形式提供；然而，在某些情境下，它可能发挥至关重要的作用。具体而言，如文献 [33] 所示，在构造函数的块编码时，它有助于处理不连续性。考虑函数 $f(x;\ \xi)=\sum_k c_k\phi_k(x;\xi)$ 的分段表示，其中 $\phi_k(x;\xi)=\phi_k(x)$ 在区间 $\xi_{k-1}\le x<\xi_k$上成立。在这种情况下，给定操作

$$\left|x\right\rangle\left|\xi_k\right\rangle\left|0\right\rangle_{\mathrm{flag}}\mapsto\begin{cases}\left|x\right\rangle\left|\xi_k\right\rangle\left|0\right\rangle_{\mathrm{flag}} & \text{if } x<\xi_k,\\ \left|x\right\rangle\left|\xi_k\right\rangle\left|1\right\rangle_{\mathrm{flag}} & \text{if } x\ge\xi_k,\end{cases} \tag{22}$$

文献中介绍的 [16]，方法可以构造该分段函数的对角块编码，其区间参数可通过 ξ_k进行调节；具体而言，使用 $\phi_k(x)$ 的对角块编码的受控版本，并将标志量子比特用作控制量子比特。通过有效利用二进制预言机，或许能够高效实现无法用单个全局多项式表示的复杂函数。

IV. 数值演示

在此，我们使用 PennyLane [42]，通过 (i) 正向模拟和 (ii) 参数设计，对所提出的框架进行数值演示，应用场景为二维声学模拟。我们还使用 pyqsp [43–45] 来确定基于量子奇异值变换的哈密顿量模拟所需的相位角。控制波动方程如下：

$$\frac{1}{c(x,y)^2}\frac{\partial^2 u(t,x,y)}{\partial t^2} = \nabla^2 u(t,x,y), \quad (x,y)\in(0,1)^2, \tag{23}$$

其中，$c(x,\ y) = \sqrt{1/\varrho(x,\ y)}$ 表示声速，其数值可能随空间变化；我们假设其遵循二维平移高斯剖面

$$c(x,y) = -\exp\left(-\left(\frac{(x-1/2)^2}{2\cdot(1/20)^2}+\frac{(y-1/2)^2}{2\cdot(1/5)^2}\right)\right)+1, \quad (x,y)\in(0,1)^2. \tag{24}$$

将定义域 $(0,\ 1)^2$ 离散为均匀网格，如第 IIIA 节所述，控制方程可写成常微分方程（1）的形式，其中 $w\ (t) = (\underline{C}^{-1}\frac{\partial u}{\partial t},\ \nabla_x u,\ \nabla_y u,\ 0)^T$ 且

$$A = -\begin{pmatrix} 0 & CD_x^+ & CD_y^+ & 0 \\ D_x^- C & 0 & 0 & 0 \\ D_y^- C & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{25}$$

其中 $C = \sum_{x,\ y} c(x,\ y)\,|x,\ y\rangle\langle x,\ y|$。顶部和底部边界施加周期边界条件，而左侧和右侧边界分别施加狄利克雷边界条件和诺伊曼边界条件。在这些条件下，$(D_x^+)^\dagger = -D_x^-$ 和 $(D_y^+)^\dagger = -D_y^-$成立，从而确保 A 为反厄米。

在数值模拟中，空间坐标使用 8 个量子比特表示，即 $n = 4$ 每个维度的量子比特数。图 1 (a) 展示了高斯剖面 $c(x,\ y)$，图 1 (b) 和 (c) 分别展示了其三阶（$K = K_x = K_y = 3$）和十阶傅里叶级数近似。如图 1(c) 所示，提高次数可定性地提升近似精度；不过，为提高量子电路模拟的效率，我们选择较低的次数 $K = 3$。还需指出，由于此处考虑的函数不满足周期解析性（引理 12中的情形 (a)），因此预计近似误差仅随次数呈多项式衰减。我们采用文献 C 中介绍的方法构造[34]的块编码。该构造需要 $\mathcal{O}(d^D + Dn\log\ d)$ 个双量子比特门，以及用于傅里叶基函数线性组合酉表示的 $D\lceil\log_2(2d+1)\rceil$ 个辅助量子比特；因此，在我们的情形中，对角块编码需要 6 个辅助量子比特。我们将初始条件设为

$$c(x,y)^{-1}\frac{\partial u(0,x,y)}{\partial t} = \begin{cases} 2^{-5/2} & x \geq (2^4-2)/(2^4-1) \\ 0 & x < (2^4-2)/(2^4-1) \end{cases}, \tag{26}$$

$$\nabla_x u(0,x,y) = 0 \tag{27}$$

$$\nabla_y u(0,x,y) = 0, \tag{28}$$

这确保了 $\|u(0)\| = 1$在整个数值演示过程中成立。请注意，这个初始态可以通过一个简单的量子电路制备。

首先，我们使用 C 的块编码进行正向模拟。我们额外使用四个辅助量子比特来完成 A 的块编码：一个用于通过 qml.BlockEncode 实现差分算子的块编码（从而避免显式构造，以限制模拟规模），两个用于按照式（25）将系统表示为四维，另一个用于线性组合 $|0\rangle\langle 1|\otimes CD_x^+ + |1\rangle\langle 0|\otimes D_x^- C$ 和 $|0\rangle\langle 2|\otimes CD_y^+ + |2\rangle\langle 0|\otimes D_y^- C$。然后，可以利用 A 的块编码，并额外使用两个辅助量子比特，通过量子奇异值变换（QSVT）构造 $\exp(-At)$ 的块编码推论 62], ，总计使用 20 个量子比特。从图 2中时间 $t = 1.0$ 的正向模拟结果可以看出，波从右向左传播时，靠近 $y = 0.5$ 的部分传播得更慢，这表明高斯剖面已被正确编码。

接下来，我们通过将二维高斯分布的空间平移参数化为

$$c(x,y;\xi) = -\exp\left(-\left(\frac{(x-\xi_x)^2}{2\cdot(1/20)^2}+\frac{(y-\xi_y)^2}{2\cdot(1/5)^2}\right)\right)+1, \tag{29}$$

设计参数 $\xi = (\xi_x,\xi_y)$。我们使用 $n_{\xi_x} = n_{\xi_y} = 4$个量子比特，因此总计需要 28 个量子比特。请注意，参数设计无需额外的辅助量子比特。这里，我们希望最大化$c(x,y;\ \xi)^{-1}\partial u(t,x,y;\xi)/\partial t$ 在时间 $t = 1.0$ 于图 3 (a) 所示的目标区域处的值，方法是调整高斯分布的位置。也就是说，我们考虑以下优化问题

$$\max_{\xi=(\xi_x,\xi_y)} \mathcal{F}(\xi), \quad \mathcal{F}(\xi) = \left|\sum_{(x,y)\in S} w_1(1,x,y;\xi)^2\right|^{1/2}, \tag{30}$$

其中 $w_1(t,\ x,\ y;\ \xi) = c(x,\ y;\ \xi)^{-1}\partial u(t,\ x,\ y;\ \xi)/\partial t$ 和S 是目标区域的一组坐标点。

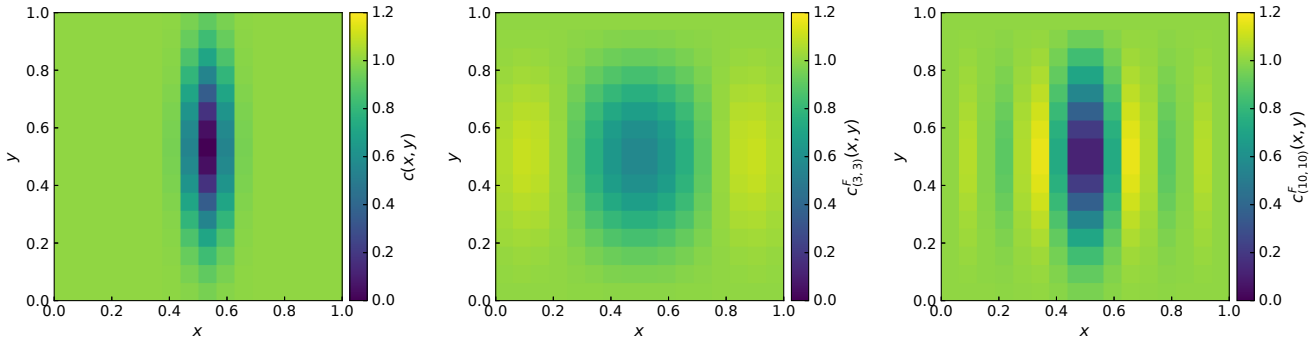

图 1. 波动方程中空间变化系数 $c(x,\ y)$ 的取值。(a) 原始的二维高斯剖面 $c(x,\ y)$，(b) 其三阶傅里叶级数逼近 $c^{F}{}_{(3,\ 3)}(x,\ y)$，以及 (c) 其 10 阶傅里叶级数逼近 $c^{F}{}_{(10,\ 10)}(x,\ y)$。数值模拟中使用了低阶逼近 (b)，以缩小量子电路模拟的规模。

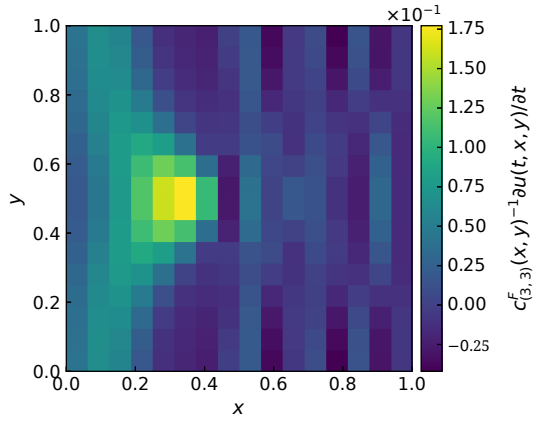

图 2 $c^{F}_{3,3}\ x\ y\ ^{-1}\partial u\ t\ x\ y\ /\partial t$ $t =$. 时刻的 $_{()}(,\ )\ (,\ ,\ )$ 1.0 取值。

ˆ 目标函数的块编码，$\mathcal{F} = \sum_{\xi} \mathcal{F}(w(t;\ \xi))\ |\xi\rangle\langle\xi|$，可采用参考文献 [12] 中讨论的相同流程构造。图 3(b) 和 (c) 分别展示了通过矩阵计算和量子电路模拟得到的目标函数值。尽管量子电路模拟存在由量子奇异值变换实现的哈密顿量模拟所导致的误差，但我们观察到，其变化趋势在定性上与矩阵计算得到的结果相同，且误差非常小。

V. 结论

在本工作中，我们开发了一种用于偏微分方程参数化的量子算法框架，该框架利用对角块编码来表示空间变化系数场。这种方法使人们能够将具有结构且可能并不简单的剖面纳入量子电路，而无需借助量子随机存取存储器（QRAM）等非结构化数据加载方法。我们首先介绍一种利用对角块编码，为与线性偏微分方程相关的算子构造块编码的过程。我们已经证明，就门复杂度而言，当空间变化系数具有高效的对角块编码时，偏微分方程信息可以被高效编码；特别是当系数能够通过傅里叶级数进行高效逼近时。基于这些构造，我们针对三种标准的数据加载预言机，分析了可能的参数化策略。这种基于量子谕示的视角支持广泛的参数化方式，因而在工程应用中具有实际意义。随后，我们通过数值模拟展示了所提出的框架能够成功地对偏微分方程进行参数化。在此框架基础上，可以在基于预言机的量子算法中，跨参数值相干地调用参数化的偏微分方程正向模拟，从而为设计和优化等更高层次的任务提供实现路径 [12]。

未来仍有几个值得探索的方向。首先，尽管本文侧重于线性偏微分方程时间演化算子的参数化，该框架还可扩展至定常问题和非线性偏微分方程，以及初始条件的优化。其次，除了偏微分方程约束优化之外，探索偏微分方程相关谕示的其他潜在用途也十分重要，这些用途可借助参数化偏微分方程模拟实现。

致谢

感谢 Dr. Seiji Kajita 提供了富有见地的意见。

附录A：定理证明

我们首先回顾块编码矩阵的乘积和线性组合的基本结果。

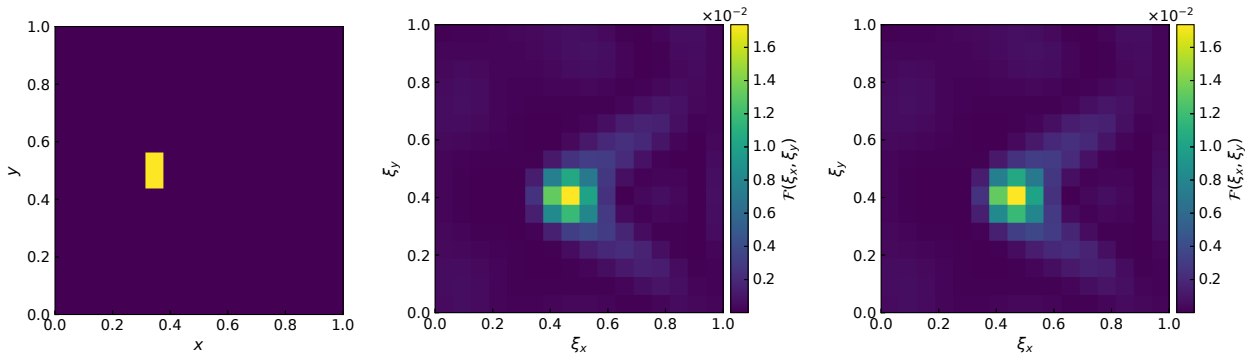

图3. 参数设计问题的数值模拟结果。(a) 目标区域（黄色）。(b) 通过矩阵计算得到的目标函数 $\mathcal{F}(\xi_x,\ \xi_y)$。(c) 通过量子电路模拟得到的目标函数 $\mathcal{F}(\xi_x,\ \xi_y)$。在 (c) 中，块编码矩阵根据 $2/\alpha_{\text{for}}^2)\mathcal{F}(\xi_x,\ \xi_y)-1$ 得到 [12], 其中 α_{for} 是波动方程正向模拟的归一化常数。为便于与 (b) 比较，我们绘制了缩放后的值 $\mathcal{F}(\xi_x,\ \xi_y)$。

引理 8 (两个块编码矩阵的乘积，[46,引理 53])。若 U_A 是算子 A的一个 n 量子比特算子 $(\alpha_A, a_A, \epsilon_A)$-块编码，且 U_B 是算子 B的一个 n 量子比特算子 $(\alpha_B, a_B, \epsilon_B)$-块编码，则 $(I_b \otimes U_A)(I_a \otimes U_B)$ 是 AB的一个 $(\alpha_A\alpha_B, a_A+a_B, \alpha_A\epsilon_B+\alpha_B\epsilon_A)$-块编码。

由于上述引理，可以直接构造多重乘积 $A_1A_2...A_m$ 的 $(\prod_{j=0}^{m-1}\alpha_j,\ \sum_{j=0}^{m-1}a_j,\ \sum_{j=0}^{m-1}\epsilon_j\prod_{k\neq j}\alpha_k)$- 块编码，给定 A_j 的 $(\alpha_j,\ a_j,\ \epsilon_j)$-块编码，其中 $j=0,\ \ldots,\ m-1$。

我们对 [46, 引理 52]稍作修改，以适用于块编码矩阵的线性组合。

引理 9 (块编码算子的线性组合)。设 $y\in\mathbb{C}^m$。设 U_j 是算子 A_j 的一个 n 量子比特 $(\alpha_j, a_j, \epsilon_j)$-块编码，其中 $j=0, ..., m-1$。令我们定——

记 $\alpha := \max_j \alpha_j$, $a := \max_j a_j$, $\epsilon := \max_j \epsilon_j$。另记 $\alpha_{\text{prep}} \geq \sum_j |y_j|(\alpha_j/\alpha)$ 和 $a_{\text{prep}} := \lceil \log_2(m) \rceil$。假设 (P_L, P_R) 是针对 $z\in\mathbb{C}^m$ 的一个 $(\alpha_{\text{prep}}, a_{\text{prep}}, \epsilon_{\text{prep}})$-态制备对，其中 $z_j := y_j(\alpha_j/\alpha)$，且 $P_L|0\rangle = \sum_{j=0}^{2^{a_{\text{prep}}}-1} c_j|j\rangle$，并且 $P_R|0\rangle = \sum_{j=0}^{2^{a_{\text{prep}}}-1} d_j|j\rangle$ 满足 $\sum_{j=0}^{m-1}|\alpha_{\text{prep}}(c_j^*d_j) - z_j| \leq \epsilon_{\text{prep}}$，且对于 $j=m, ..., 2^{a_{\text{prep}}}-1$ 有 $c_j^*d_j=0$, 以及 $W = \sum_{j=0}^{m-1}|j\rangle\langle j|\otimes(I^{\otimes a-a_j}\otimes U_j) + (I^{\otimes a_{\text{prep}}} - \sum_{j=0}^{m-1}|j\rangle\langle j|)\otimes I^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n}$。那么，我们可以实现 $\sum_{j=0}^{m-1} y_jA_j$ 的一个 $(\alpha\alpha_{\text{prep}}, a+a_{\text{prep}}, \alpha\epsilon_{\text{prep}}+\epsilon\|y\|_1)$- 块编码。

证明。令 $\tilde{W} = (P_L^\dagger\otimes I^{\otimes a+n})W(P_R\otimes I^{\otimes a+n})$。则有

$$\left\|\sum_j y_jA_j - \alpha\alpha_{\text{prep}}(\langle 0|^{\otimes a_{\text{prep}}}\otimes\langle 0|^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})\tilde{W}(|0\rangle^{\otimes a_{\text{prep}}}\otimes|0\rangle^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})\right\| \tag{A1}$$

$$= \left\|\sum_j y_jA_j - \alpha\sum_j \alpha_{\text{prep}}(c_j^*d_j)(\langle 0|^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})(I^{\otimes a-a_j}\otimes U_j)(|0\rangle^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})\right\| \tag{A2}$$

$$\leq \alpha\epsilon_{\text{prep}} + \left\|\sum_j y_jA_j - \sum_j y_j\alpha_j(\langle 0|^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})(I^{\otimes a-a_j}\otimes U_j)(|0\rangle^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})\right\| \tag{A3}$$

$$\leq \alpha\epsilon_{\text{prep}} + \sum_j |y_j|\left\|A_j - \alpha_j(\langle 0|^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})(I^{\otimes a-a_j}\otimes U_j)(|0\rangle^{\otimes a}\otimes I^{\otimes n})\right\| \tag{A4}$$

$$\leq \alpha\epsilon_{\text{prep}} + \sum_j |y_j|\epsilon_j \tag{A5}$$

$$\leq \alpha\epsilon_{\text{prep}} + \epsilon\|y\|_1. \tag{A6}$$

引理的证明至此结束。 □

在特殊情况 $\epsilon_{\text{prep}}=0$ 下，结果的形式更为简单

形式。

推论 10. 当我们选择一个$(\|y\|_1, a_{\text{prep}}, 0)$-态制备对时，可以实现 $\sum_{j=0}^{m-1} y_j A_j$ 的$(\alpha\|y\|_1, a + a_{\text{prep}}, \epsilon\|y\|_1)$-块编码。

与大多数研究中的通常做法一样，我们使用该推论以便于下面的算法层面分析。不过，我们注意到，在实际的端到端容错量子计算资源/误差核算中，需要考虑并分配 ϵ_{prep}，使其足够小而不会影响最终误差界；也就是说，与整体块编码误差相比，ϵ_{prep} 足够小。

1. $A^{(2\text{nd})}$ 的块编码

在定理 3 的证明之前，我们先建立一个利用 $A^{(2\text{nd})}$ 结构的引理。

引理 11. 假设 U_1 和 U_2 分别是 A_1 和 A_2 的(α, a, ϵ)-块编码。令 S 为具有 k 个量子比特的选择寄存器。那么，对于任意 $j = 1, ..., 2^k - 1$，我们可以实现 $M_j := |0\rangle\langle j|_S \otimes A_1 + |j\rangle\langle 0|_S \otimes A_2$ 的(α, a, ϵ)-块编码。

证明。我们首先添加两个工作量子比特 f_0，f_j 并初始化为$|0\rangle$。这些量子比特用作标志量子比特，使得 f_j 当且仅当寄存器 S 等于 j 时为 1，其中 $j = 0, ..., 2^k - 1$。这一计算对应于与操作，可通过一串 $4k - 2$ 托福利门 [47,引理 7。2]来实现。我们首先计算一个标志，然后应用一个受控于该标志的单控 U_1 或 U_2 操作，最后将该标志反计算。为指定 $|0\rangle\langle j|_S$（或 $|j\rangle\langle 0|_S$）的非对角元素，还需要对选择寄存器执行 SWAP 操作。块编码 M_j 的完整量子电路实现如图4所示。

□

应用此引理，我们得到关于 $A^{(2\text{nd})}$查询复杂度的证明。

定理 3 的证明。我们首先利用引理 8 将每一项构造为块编码矩阵的乘积，从而得到 $C_\varrho^{-2} D_\mu^+ C_\kappa^2$ and 1 1$C_\kappa^2 D_\mu^- C_\varrho^{-2}$ 的 ($\alpha_{\sqrt{\kappa}}\alpha_D\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$, $a_{\sqrt{\kappa}} + a_D + a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$, $\alpha_D\alpha_{\sqrt{\kappa}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + 1\,1\,\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_D\epsilon_{\sqrt{\kappa}}$)-块编码，以及 $C_\varrho^{-2} C_\gamma^2$ 的 ($\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_{\sqrt{\gamma}}$, $a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + a_{\sqrt{\gamma}}$, $\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_{\sqrt{\gamma}} + \alpha_{\sqrt{\gamma}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$)- 1 1 1 块编码。根据 [46, 引理 22]，使用量子奇异值变换对 C_ϱ^{-2} 平方，只需使用一次 $U_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$ 及其逆，我们便得到 C_ϱ^{-1} 的 ($\alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}$, $a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + 1, 8\sqrt{\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}}$)-块编码。因此，我们可以构造 $C_\varrho^{-1} C_\zeta$ 的 ($\alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_\zeta, a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + a_\zeta + 1, \alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_\zeta + 8\alpha_\zeta\sqrt{\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}}$)-块编码。然后，根据引理 11 和推论 10，我们添加一个选择寄存器，并将所有项线性组合起来，构造 $A^{(2\text{nd})}$ 的 ($\alpha\|y\|_1, a + a_{\text{prep}}, \epsilon\|y\|_1$)-块编码，其参数为 $\alpha = \max(\alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_\zeta, \alpha_{\sqrt{\kappa}}\alpha_D\alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_{\sqrt{\gamma}})$，

$a = \max(a_{\sqrt{\kappa}} + a_D + a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + a_{\sqrt{\gamma}}, a_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + a_\zeta + 1)$，$a_{\text{prep}} = \lceil \log_2(d+2) \rceil$，$\epsilon = \max(\alpha_D\alpha_{\sqrt{\kappa}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}} + \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\alpha_D\epsilon_{\sqrt{\kappa}}, \alpha_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_{\sqrt{\gamma}} + \alpha_{\sqrt{\gamma}}\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}, \alpha^2_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}\epsilon_\zeta + 8\alpha_\zeta\sqrt{\epsilon_{\frac{1}{\sqrt{\varrho}}}})$，以及 $\|y\|_1 = d + 2$。

□

结合各个块编码的门复杂度结果，我们推导出 $A^{(2\text{nd})}$的门复杂度。

定理 4 的证明。根据参考文献 [34], , 对于一个 d 维函数 f 的最大次数为 K 的傅里叶近似，LCU 傅里叶变换对一个 n 量子比特算子 C_f 进行块编码需要 $\mathcal{O}(K^d + n\log K)$ 个双量子比特门。参考文献 [12, 附录A] 表明，对有限差分算子进行块编码需要 $\mathcal{O}(n^2/d)$ 个双量子比特门。按照引理 11 中的形式 M_j 构造块编码，再加上外层 LCU 中的 SELECT 操作，只需额外增加 $\mathcal{O}(\log d)$ 个双量子比特门。（具体而言，可以将 $\lceil \log_2(d+2) \rceil$ 个控制位的 AND 运算结果写入一个标志量子比特，应用单控制块编码，然后将该标志量子比特恢复为原状态。）外层 LCU 中的 PREP 操作需要 $\mathcal{O}(d)$ 个双量子比特门。结合这些开销与定理 3 中的查询复杂度，可得双量子比特门的总复杂度为 $\mathcal{O}(dK^d + dn\log K + n^2)$。

□

2. $A^{(1\text{st})}$ 的块编码

$A^{(1\text{st})}$ 的块编码的查询复杂度可以通过将每一项构造为乘积，再对所有项作线性组合，直接推导如下：

定理 6 的证明。首先，根据引理 8，我们构造 $D_\mu^+ C_\kappa D_\mu^-$ 和 $D_\mu^- C_\kappa D_\mu^+$ 的 $(\alpha_\kappa\alpha_D^2, a_\kappa + 2a_D, \alpha_D^2\epsilon_\kappa)$-块编码，以及 $C_{\beta_\mu^+} D_\mu^-$ 和 $C_{\beta_\mu^-} D_\mu^+$ 的 $(\alpha_\beta\alpha_D, a_\beta + a_D, \alpha_D\epsilon_\beta)$- 块编码。接下来，应用推论 10，对所有 $4d + 1$ 项对应的块编码矩阵作线性组合，得到 $A^{(1\text{st})}$ 的 $(\alpha\|y\|_1, a + a_{\text{prep}}, \epsilon\|y\|_1)$-块编码，其中 $\alpha = \alpha_\kappa\alpha_D^2\ \alpha_\beta\alpha_D\ \alpha_\gamma \quad a = a_\kappa + 2a_D\ a_\beta + a_D\ a_\gamma \quad \epsilon = \alpha_D^2\epsilon_\kappa\ \alpha_D\epsilon_\beta\ \epsilon_\gamma \quad a_{\text{prep}} = \lceil {}_2\ 4d+1 \rceil$

max(, ,), max(, ,), max(, ,), log ( ), 且 $\|y\|_1 = 3d + 1$。

□

明确每个块编码的门复杂度，即可轻松得出总门复杂度。

定理证明 7。采用与定理证明4 相同的论证思路，可得相应结果。

□

当我们对目标函数 f 作出一些假设时，截断次数 K 可以用近似误差 ϵ_f 来表示，如下列引理所示：

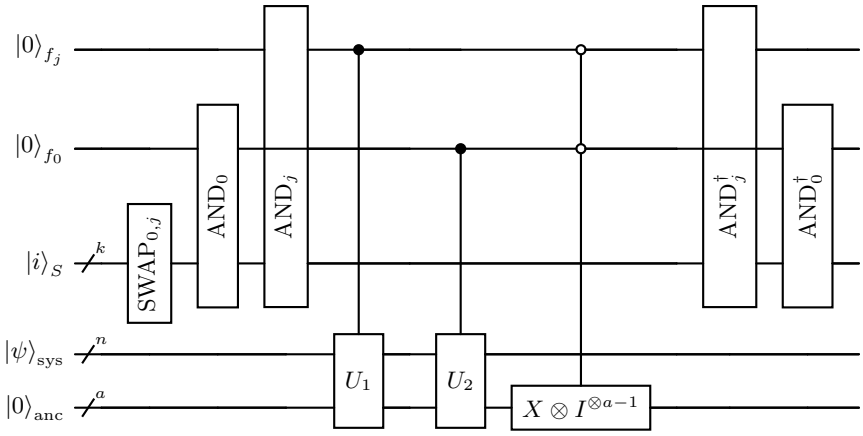

图 4. 对 M_j 进行块编码的量子电路。令 $[k]=\{0,\ldots,k-1\}$，并令由 k 位字符串表示的整数 $j\in[2^k]$ 为 $j=j_{k-1}\ldots j_0$，即 $j=\sum_{i\in[k]} j_i 2^i$，其中 $j_i\in\{0,1\}$。我们将 AND$_j$ 记作谕示 $|x\rangle_S|0\rangle_{f_j}\mapsto|x\rangle_S|f(x)\rangle_{f_j}$，其中 $f(x)=\wedge_{i=1}^k(1\oplus x_i\oplus j_i)$。SWAP$_{0,\,j}$ 是一个酉算子 $U=|0\rangle\langle j|+|j\rangle\langle 0|+\sum_{i\notin\{0,j\}}|i\rangle\langle i|$。利用 $\langle 0^a|X\otimes I^{\otimes a-1}|0^a\rangle=0$ 这一事实，对多量子比特控制的 $X\otimes I^{\otimes a-1}$ 进行操作，从而在无关的选择器基上将左上块编码为零。电路末尾的 AND$_j$ 和 AND$_0$ 的逆操作使标志量子比特恢复为干净状态。

引理 12（K 的傅里叶级数取值）。假设 f 是定义在 $[0,2\pi]$ 上的利普希茨连续周期函数。对于 f 的傅里叶级数逼近，若要将近似误差控制在 ϵ_f 以内（无穷范数），傅里叶级数的次数需要满足

(a) $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon_f))$ 当 f 在复数 t-平面中实轴周围半宽为 α 的开带状区域内解析，且 $f|(\cdot)|\le M$，或

(b) $\mathcal{O}((1/\epsilon_f)^{1/\nu})$ 当 f 可微 $\nu\ge 1$ 次，且 $f^{(\nu)}$ 在 $[0,2\pi]$ 上有有界变差 V 时。

证明。证明见 [48, 定理 4。2] 。 □

利用该引理，门复杂度可进一步细化，从而界定 $A^{(1\text{st})}$的块编码误差。

推论13。考虑引理*12*中的情形*(a)*和*(b)*。假设 $\max(\alpha_D^2\epsilon_\kappa,\alpha_D\epsilon_\beta,\epsilon_\gamma)=\alpha_D^2\epsilon_\kappa$。要将 $A^{(1st)}$ 的块编码误差界定在 ϵ以内，即$(3d+1)\alpha_D^2\epsilon_\kappa\le\epsilon$，我们需要

- $\mathcal{O}(d(\log d+\frac{n}{d}+\log(1/\epsilon))^d+dn(\log\,d+\frac{n}{d}+\log(1/\epsilon))+n^2)$ 个双量子比特门，当 $\kappa(\cdot)$ 满足 *(a)* 时，且
- $\mathcal{O}(d^3\frac{d}{\nu}+1\,4^{\frac{n}{\nu}}(1/\epsilon)^{\frac{d}{\nu}}+dn(1/\nu)\log(1/\epsilon)+n^2)$ 个双量子比特门，当 $\kappa(\cdot)$ 满足 *(b)* 时。

证明。根据参考文献 [12, 附录A]，$\alpha_D=3d/h$。接着，将 $A^{(1\text{st})}$ 的块编码误差界定为 ϵ，$\epsilon_\kappa=\mathcal{O}((h^2/d^3)\epsilon)$。将此代入引理 12 中的截断阶数，并将其用于定理7 的结果，其中 $h=\mathcal{O}(2^{-n/d})$，即可完成证明。 □

[1] 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年）。[2] P. C. S. 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年）。[3] 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，《物理评论 X》**13**，041041（2023年）。[4] A. M. Childs、J.-P. Liu 和 A. Ostrander，偏微分方程的高精度量子算法，《Quantum》**5**，574（2021年）。[5] 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¨，《Quantum》**8**，1563（2024年）。

[6]Y. Sato、R. Kondo、I. Hamamura、T. Onodera 和 N. Yamamoto，利用可扩展量子电路模拟双曲型偏微分方程的哈密顿量，《物理评论研究》**6**，033246（2024年）。[7] Y. Sato、H. Tezuka、R. Kondo 和 N. Yamamoto，针对参数随空间变化的非守恒系统偏微分方程的量子算法，《物理评论应用》**23**，014063（2025年）。[8] A. M. Dalzell、S. McArdle、M. Berta、P. Bienias、C.-F. Chen、A. Gily´en、C. T. Hann、M. J. Kastoryano、E. T. Khabiboulline、A. Kubica、G. Salton、S. Wang 和 F. G. S. L. Brand˜ao，*Quantum Algorithms: A Survey of Applications and End-to-end Complexities*（剑桥大学出版社，剑桥，2025年）。[9] J. Stein、L. M¨uller、L. H¨olscher、G. Chnitidis、J. Jojo、A. Farea、M. S. C¸elebi、D. Bucher、J. Wulf、D. Fischer，

P. Altmann、C. Linnhoff-Popien 和 S. Feld，基于模拟的优化应用中的指数级量子加速（2024年），arXiv:2305.08482。[10] L. H¨olscher、L. M¨uller、O. Samimi 和 T. Danzig，冷却系统的量子模拟优化（2025年），arXiv:2504.15460。[11] L. H¨olscher、O. Ahrend、L. Karch、C. L'Estocq、M. M. Andreu、T. Stollenwerk、F. K. Wilhelm 和 J. Kowalski，结构力学拓扑优化的端到端量子算法（2025年），arXiv:2510.07280。[12] Y. Sato、J. Kato、H. Yano、K. Ito 和 N. Yamamoto，偏微分方程约束优化的显式块编码（2025年），arXiv:2511.14420。[13] M. Hinze，*Optimization with PDE Constraints*，《数学建模：理论与应用》第23卷（施普林格，多德雷赫特，2009年）。[14] J. C. De Los Reyes，*Numerical PDE-Constrained Opti-mization*，《施普林格优化简明丛书》（施普林格国际出版，查姆，2015年）。[15] L. K. Grover，通过量子计算合成量子叠加态，《物理评论快报》85，1334（2000年）。[16] Y. R. Sanders、G. H. Low、A. Scherer 和 D. W. Berry，无需算术运算的黑盒量子态制备，《物理评论快报》122，020502（2019年）。[17] L. Grover 和 T. Rudolph，创建对应于可高效积分概率分布的叠加态（2002年），arXiv:quant-ph/0208112。[18] R. Babbush、C. Gidney、D. W. Berry、N. Wiebe、J. Mc-Clean、A. Paler、A. Fowler 和 H. Neven，以线性 T 复杂度在量子电路中编码电子能谱，《物理评论 X》8，041015（2018年）。[19] S. Fomichev、K. Hejazi、M. S. Zini、M. Kiser、J. Fraxanet、P. A. M. Casares、A. Delgado、J. Huh、A.-C. Voigt、J. E. Mueller 和 J. M. Arrazola，量子计算机量子化学的初态制备，《PRX Quantum》5，040339（2024年）。[20] D. W. Berry、Y. Tong、T. Khattar、A. White、T. I. Kim、G. H. Low、S. Boixo、Z. Ding、L. Lin、S. Lee、G. K.-L. Chan、R. Babbush 和 N. C. Rubin，强关联分子量子模拟的快速初态制备，《PRX Quantum》6，020327（2025年）。[21] D. Camps、L. Lin、R. V. Beeumen 和 C. Yang，特定稀疏矩阵分块编码的显式量子电路（2023年），arXiv:2203.10236。[22] M. Moosa、T. W. Watts、Y. Chen、A. Sarma 和 P. L. McMahon，加载任意函数傅里叶近似的线性深度量子电路，《量子科学与技术》9，015002（2023年）。[23] J. Zylberman、U. Nzongani、A. Simonetto 和 F. Deb-basch，具有时空精度权衡的非酉与酉对角算子的高效量子电路，《ACM量子计算汇刊》6，15:1（2025年）。[24] G. Alonso-Linaje、U. Azad、J. Soni、J. Smalley、L. Lap-worth 和 J. M. Arrazola，数据加载量子编译框架（2025年），arXiv:2512.05183。[25] D. An、J.-P. Liu 和 L. Lin，具有最优态制备成本的非酉动力学哈密顿量模拟线性组合，《物理评论快报》131，150603（2023年）。[26] D. An、A. M. Childs 和 L. Lin，具有近乎最优的 De-成本的线性非酉动力学量子算法

对所有参数的依赖性，《数学物理通讯》407，19（2025年）。[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，《物理评论A》108，032603（2023年）。[28] S. Jin、N. Liu 和 Y. Yu，通过薛定谔化实现偏微分方程的量子模拟，《物理评论快报》133，230602（2024年）。[29] D. W. Berry、A. M. Childs、A. Ostrander 和 G. Wang，线性微分方程量子算法：对精度的依赖性呈指数级改善，《数学物理通讯》356，1057（2017年）。[30] G. H. Low 和 Y. Su，量子特征值处理，载于 *2024 IEEE 65th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS)* 2024 1051 1062 ( ) 第 – 页。[31] D. Camps 和 R. Van Beeumen，FABLE：用于块编码的快速近似量子电路，载于2022 *IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)* 2022 104 113 ( ) 第 – 页。[32] D. Motlagh 和 N. Wiebe，广义量子信号处理，《PRX Quantum》5，020368（2024年）。[33] S. McArdle、A. Gilyen 和 M. Berta，无需相干算术的量子态制备（2025年），arXiv:2210.14892。[34] M. Rosenkranz、E. Brunner、G. Marin-Sanchez、N. Fitzpatrick、S. Dilkes、Y. Tang、Y. Kikuchi 和 M. Benedetti，多变量函数的量子态制备，《Quantum》9，1703（2025年）。[35] H. Mori、K. Mitarai 和 K. Fujii，用于多变量蒙特卡罗模拟的高效态制备（2024年），arXiv:2409.07336。[36] H. Li、H. Ni 和 L. Ying，关于伪微分算子的高效量子块编码，《Quantum》7，1031（2023年）。[37] A. Gilyen、S. Arunachalam 和 N. Wiebe，通过更快的量子梯度计算优化量子优化算法，载于 *Proceedings of the 2019 Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA)*，论文集（工业与应用数学学会，2019年），第1425–1444页。[38] A. B. Catli、S. Simon 和 N. Wiebe，通过动力学模拟实现量子优化的指数级更优界（2025年），arXiv:2502.04285。[39] M. Schade、C. Bōsch、V. Hapla 和 A. Fichtner，一种具有指数级加速的1维弹性波模拟量子计算方案，《国际地球物理学杂志》238，321（2024年）。[40] N. Guseynov、X. Huang 和 N. Liu，用于模拟偏微分方程所需哈密顿量的块编码量子门构造，《物理评论研究》7，033100（2025年）。[41] A. Gilyen，*Quantum Singular Value Transformation & Its Algorithmic Applications*，博士论文，阿姆斯特丹大学（2019年）。[42] V. Bergholm、J. Izaac、M. Schuld、C. Gogolin、S. Ahmed、V. Ajith、M. S. Alam、G. Alonso-Linaje、B. Akash-Narayanan、A. Asadi、J. M. Arrazola、U. Azad、S. Banning、C. Blank、T. R. Bro mley、B. A. Cordier、J. Ceroni、A. Delgado、O. D. Matteo、A. Dusko、T. Garg、D. Guala、A. Hayes、R. Hill、A. Ijaz、T. Isacsson、D. Ittah、S. Jahangiri、P. Jain、E. Jiang、A. Khandelwal、K. Kottmann、R. A. Lang、C. Lee、T. Loke、A. Lowe、K. McKiernan、J. J. Meyer、J. A. Montanez-Barrera、R. Moyard、Z. Niu，

L. J. O'Riordan、S. Oud、A. Panigrahi、C.-Y. Park、D. Polatajko、N. Quesada、C. Roberts、N. S´a、I. Schoch、B. Shi、S. Shu、S. Sim、A. Singh、I. Strandberg、J. Soni、A. Sz´ava、S. Thabet、R. A. Vargas-Hern´andez、T. Vincent、N. Vitucci、M. Weber、D. Wierichs、R. Wiersema、M. Willmann、V. Wong、S. Zhang 和 N. Killoran，PennyLane：混合量子-经典计算的自动微分（2022年），arXiv:1811.04968。[43] R. Chao、D. Ding、A. Gilyen、C. Huang 和 M. Szegedy，以机器精度求解量子信号处理的角度（2020年），arXiv:2003.02831。[44] Y. Dong、X. Meng、K. B. Whaley 和 L. Lin，量子信号处理中高效的相位因子求值，《物理评论A》**103**，042419（2021年）。[45] J. M. Martyn、Z. M. Rossi、A. K. Tan 和 I. L. Chuang，量子算法的大统一，《PRX Quantum**2**, 040203（2021年）。[46] A. Gily´en、Y. Su、G. H. Low 和 N. Wiebe，《量子奇异值变换及其拓展：量子矩阵算术的指数级改进》，载于 *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*，STOC 2019（计算机协会，纽约，NY，美国，2019年），第193–204页。[47] A. Barenco、C. H. Bennett、R. Cleve、D. P. DiVincenzo、N. Margolus、P. Shor、T. Sleator、J. A. Smolin 和 H. Weinfurter，《量子计算的基本门》，《物理评论A》**52**，3457（1995年）。[48] G. B. Wright、M. Javed、H. Montanelli 和 L. N. Trefethen，《将 Chebfun 扩展至周期函数》，《SIAM科学计算杂志》**37**，C554（2015年）。