

求解线性微分方程的高阶量子算法

王心锐

2025 年 8 月 25 日

1 线性系统方法

为解决复杂度随演化时间 Δt 呈指数增长和无法求解非齐次线性微分方程的问题，我们提出一种基于 HHL 算法的方法。其关键在于引入“费曼时钟 (Feynman's clock)”——通过一个额外的寄存器对时间进行编码。随后，我们仅用一个量子态就能对微分方程在所有时刻的解进行编码。也就是说，我们希望得到一个与之成比例的最终量子态：

$$|\psi\rangle := \sum_{j=0}^{N_t} |t_j\rangle |x_j\rangle.$$

其中， $:=$ 是定义符号， N_t 为时间步数， $t_j = t_0 + jh$ (h 是微分方程离散化后的时间步长， t_0 是微分方程求解的初始时刻)， x_j 是时刻 t_j 处向量 x 的近似值， Δt 是求解微分方程的总时间跨度。本文中，我们用下标 j 表示向量的索引，用上标表示向量的分量。

一旦构建出这个量子态，通过测量编码时间的寄存器并得到最终时刻 $t_0 + \Delta t$ ，就能近似得到编码该时刻解的量子态。不过，仅采用这种方法时，测得最终时刻的概率很低，仅为 $\frac{1}{N_t+1}$ 。为显著提高成功概率，我们可以在 $t_0 + \Delta t$ 之后增加一段“解保持恒定”的时间区间：令向量 x 在 $t_0 + \Delta t$ 到 $t_0 + 2\Delta t$ 时间段内保持不变，此时时间步数满足 $N_t = \frac{2\Delta t}{h}$ 。这样一来，只要测量到的时间落在该区间内，就能得到对应解的量子态。通过这种方法，成功概率可显著提高，且不会改变 N_t 的复杂度缩放趋势。

数值求解微分方程的最简单方法是欧拉法 (Euler method)，其将微分方程离散化为：

$$\frac{x_{j+1} - x_j}{h} = A(t_j)x_j + b(t_j).$$

对 $t > t_0 + \Delta t$ 的时间段，我们令 $x_{j+1} = x_j$ ，以确保解的恒定。将欧拉法编码为线性方程组的形式十分直接，即：

$$\mathcal{A}\vec{x} = \vec{b}.$$

其中， \vec{x} 是由各时刻向量 x_j 构成的块向量， \vec{b} 是由非齐次项 b 和初始条件 x_{in} 构成的块向量， \mathcal{A} 是描述离散化微分方程的块矩阵。当 A 和 b 不随时间变化时，可给出如下简单示例：

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(\mathbf{I} + Ah) & \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(\mathbf{I} + Ah) & \mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathbf{I} & \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{pmatrix}}_{\mathcal{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}}_{\vec{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} x_{in} \\ bh \\ bh \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\vec{b}}.$$

矩阵 \mathcal{A} 的每个元素都是与矩阵 A 同维度的块，向量 \vec{x} 和 \vec{b} 的每个元素都是与向量 x 同维度的块。其中：

- 第一行用于设定初始值，即 $x_0 = x_{in}$ ；
- 后续几行对应欧拉法离散化的微分方程，即 $x_{j+1} - (x_j + Ax_j h) = bh$ ；
- 最后几行对应“解保持恒定”的约束条件，即 $x_{j+1} - x_j = 0$ 。

欧拉法的单步误差缩放阶为 $O(h^2)$ ，因此总模拟误差可表示为 $O(N_t h^2) = O\left(\frac{\Delta t^2}{N_t}\right)$ 。若要求总误差不超过 ϵ （此处 ϵ 为微分方程求解的允许误差，与线性方程组求解的允许误差 ϵ_L 相区分），则需选择时间步数 $N_t = O\left(\frac{\Delta t^2}{\epsilon}\right)$ 。要确定通过 HHL 算法求解该线性方程组的复杂度，需先估算其条件数。

对条件数的粗略估算可通过分析“给定 \vec{b} 时 \vec{x} 的最大可能规模”实现：直观上， \vec{b} 的每个分量可视为一个“激励源”，该激励会导致后续时刻 \vec{x} 的数值增大；由于共有 $O(N_t)$ 个时刻受此激励影响，因此 \vec{x} 的规模约为 \vec{b} 的 $O(N_t)$ 倍。不难发现，矩阵 \mathcal{A} 的算子范数 $\|\mathcal{A}\| \approx 1$ ，因此其条件数 $\kappa(\mathcal{A}) = O(N_t)$ 。这使得算法复杂度的缩放阶至少为 $O(\Delta t^4)$ （后续章节将对此进行严格证明）。

条件数的定义是：

$$\kappa(\mathcal{A}) = \|\mathcal{A}\| \cdot \|\mathcal{A}^{-1}\|$$

其中 $\|\mathcal{A}^{-1}\|$ 是逆矩阵 \mathcal{A}^{-1} 的算子范数，衡量逆矩阵对向量的最大放大能力。

结合式子的物理意义：离散化矩阵 \mathcal{A} 对应的线性系统 $\mathcal{A}\vec{x} = \vec{b}$ 中， \vec{b} 是输入（如初始条件 x_{in} 、激励 bh ）， \vec{x} 是输出（各时间步的状态 x_0, x_1, \dots, x_{N_t} ）。由于状态 \vec{x} 是通过 N_t 个时间步累积得到的（每一步的状态依赖前一步），逆矩阵 \mathcal{A}^{-1} 的作用本质是“从输入 \vec{b} 还原出累积的状态 \vec{x} ”，其放大能力会随时间步数 N_t 增长——即

$$\|\mathcal{A}^{-1}\| \approx O(N_t)$$

（与时间步数成正比）。

再结合 $\|\mathcal{A}\| \approx 1$ ，代入条件数定义可得：

$$\kappa(\mathcal{A}) = \|\mathcal{A}\| \cdot \|\mathcal{A}^{-1}\| \approx 1 \cdot O(N_t) = O(N_t)$$

相较于哈密顿模拟中 $O(\Delta t)$ （或接近线性）的时间缩放阶，上述 Δt 的缩放效果并不理想。与哈密顿模拟类似，我们可通过高阶方法改善缩放性能——对于微分方程，适用的高阶方法是线性多步法（Linear Multistep Methods）。第四部分将介绍多步法的基本原理，第五部分将说明如何对条件数进行界估计，第六部分则会阐述 HHL 算法的具体应用及最终复杂度。

2 多步法

线性多步法的通用形式如下：

$$\sum_{\ell=0}^k \alpha_{\ell} x_{j+\ell} = h \sum_{\ell=0}^k \beta_{\ell} [A(t_{j+\ell}) x_{j+\ell} + b(t_{j+\ell})].$$

选择合适的多步法可使误差在步长 h 上达到更高阶，但该方法存在稳定性问题。为保证误差有界，矩阵 $A(t_j)$ 的特征值需满足“实部非正”——否则误差会呈指数增长。若 $A(t_j)$ 存在实部为正

的特征值，可通过减去单位矩阵的若干倍并对解进行重新缩放来处理。即便如此，当微分方程的精确解有界时，差分方程的数值解仍可能无界。

为分析稳定性，定义生成多项式：

$$\rho(\zeta) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \zeta^j, \quad \sigma(\zeta) = \sum_{j=0}^k \beta_j \zeta^j.$$

稳定性可通过以下方程的根进行分析：

$$\rho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) = 0.$$

定义集合 S ：

$$S := \left\{ \mu \in \mathbb{C} \mid \begin{array}{l} \text{方程 } \rho(\zeta) - \mu\sigma(\zeta) = 0 \text{ 的所有根 } \zeta_j(\mu) \\ \text{满足 } |\zeta_j(\mu)| \leq 1 \text{ 重根满足 } |\zeta_j(\mu)| < 1 \end{array} \right\}.$$

集合 S 被称为多步法的稳定域 (Stability Domain)。此外，若多项式 $\sigma(\zeta)$ 的所有根满足 $|\zeta| \leq 1$ ，且重根满足 $|\zeta| < 1$ ，则称该多步法在“无穷远处稳定 (stable at infinity)”。

若线性多步法的局部误差缩放阶为 $O(h^{p+1})$ ，则称该方法为 p 阶方法。这意味着：若将该方法应用于测试方程 $\dot{x} = t^q$ ($0 \leq q \leq p$) 且初始值精确，则该方法可无误差地对该方程进行积分。线性多步法为 p 阶的充要条件是：

$$\rho(e^h) - h\sigma(e^h) = O(h^{p+1}).$$

线性多步法的一个重要性质是“A-稳定性 (A-stable)”。

定义 1 (A-稳定性). 若线性多步法的稳定域 S 包含整个左半复平面 ($\mathbb{C}^- = \{\mu \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re}(\mu) \leq 0\}$)，即：

若 $\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0$ ，则方程 $\dot{x} = \lambda x$ 的数值解有界

该定义表明：若微分方程的精确解有界，则多步法给出的近似解也有界。对于标量微分方程，只要 λ 落在左半复平面内，多步法的数值解就有界。虽然欧拉法具备 A-稳定性，但无法构造任意阶数的 A-稳定多步法——这就是“达尔奎斯特第二障碍 (Second Dahlquist Barrier)”：A-稳定线性多步法的阶数 $p \leq 2$ 。由于本文需考虑高阶多步法，因此放宽稳定性要求，采用“A (α)-稳定性 (A (α)-stable)”。

定义 2 (A (α)-稳定性). 对于 $0 < \alpha < \frac{\pi}{2}$ ，若线性多步法的稳定域 S 包含“左半复平面内的 α -楔形区域” S_α ，即：

$$S \supset S_\alpha = \{\mu \in \mathbb{C} \mid |\arg(-\mu)| < \alpha, \mu \neq 0\},$$

则称该线性多步法是 A (α)-稳定的。

该定义表明：

- 对于标量微分方程，只要特征值 λ 落在左半复平面内的 α -楔形区域（即 $|\arg(-\lambda)| \leq \alpha$ ），多步法的数值解就有界；
- 对于向量微分方程，只需系数矩阵 A 的所有特征值满足上述 α -楔形区域条件即可。

已知结论为：对于任意 $\alpha < \frac{\pi}{2}$ 和正整数 k ，存在“ k 步、 $p = k$ 阶”的 A(α)-稳定线性多步法。

微分方程数值解的总误差缩放阶为 $O(N_t \Delta t^{p+1})$ 。为得到严格的误差界，本文限定系数矩阵 A 和非齐次项 b 与时间无关（即线性定常微分方程）。

定理 1. 设线性多步法为 p 阶方法，且满足 A (α)-稳定和无穷远处稳定。若矩阵 A 可对角化（即存在矩阵 V ，使得 $V^{-1}AV = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_x})$ ），且其特征值满足：

$$|\arg(-\lambda_i)| \leq \alpha \quad (i = 1, 2, \dots, N_x),$$

则存在仅依赖于该多步法的常数 M ，使得对所有 $h > 0$ ，全局误差满足：

$$\|x(t_m) - x_m\| \leq M\kappa_V \left(\max_{0 \leq j < k} \|x(t_j) - x_j\| + h^p \int_{t_0}^{t_m} \|x^{(p+1)}(\xi)\| d\xi \right),$$

其中 $\kappa_V = \|V\| \cdot \|V^{-1}\|$ 是矩阵 V 的条件数，上标 $(p+1)$ 表示向量的 $(p+1)$ 阶导数。

利用上述定理，可得到关于误差缩放阶的引理：

引理 1. 设线性多步法为 p 阶方法，且满足 A (α)-稳定和无穷远处稳定。若矩阵 A 可对角化（即存在矩阵 V ，使得 $V^{-1}AV = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_x})$ ），其特征值满足：

$$|\arg(-\lambda_i)| \leq \alpha \quad (i = 1, 2, \dots, N_x),$$

且非齐次项 b 为常数，则全局误差满足：

$$\|x(t_m) - x_m\| = O \left(\kappa_V^2 \left(\|x_{init}\| + \frac{\|b\|}{\|A\|} \right) \left[\kappa_V h \|A\|^2 + mh \|A\|^{p+1} \right] \right),$$

其中 $\kappa_V = \|V\| \cdot \|V^{-1}\|$ 是矩阵 V 的条件数。

证明. 线性多步法需通过“启动方法 (starting method)”获取 $0 < j < k$ 时 x_j 的值，式中 $\max_{0 \leq j < k} \|x(t_j) - x_j\|$ 项即源于启动方法的误差。此处可直接采用欧拉法作为启动方法，其误差缩放阶为 $O(h^2)$ ；虽也可采用更高阶的启动方法，但目前缺乏便于应用的严格误差结果。

对欧拉法的误差分析可直接利用定理 1：欧拉法的步数 $k = 1$ 、阶数 $p = 1$ ，且初始点误差为 0 ($x(t_0) = x_0$)，因此定理 1 给出：

$$\|x(t_j) - x_j\| \leq M_E \kappa_V h \int_{t_0}^{t_j} \|x^{(2)}(\xi)\| d\xi,$$

其中 M_E 是欧拉法对应的常数。将该式应用于 $0 \leq j < k$ ，可得：

$$\max_{0 \leq j < k} \|x(t_j) - x_j\| \leq M_E \kappa_V h^2 (k-1) \max_{\xi \in [t_0, t_0 + (k-1)h]} \|x^{(2)}(\xi)\|.$$

分析上述结果时，需对 $\|x^{(p+1)}(\xi)\|$ 和 $\|x^{(2)}(\xi)\|$ 进行上界估计，这两个量通常依赖于 $b(t)$ 及其时间相关性。当 b 为常数时，微分方程的精确解为：

$$x(t) = e^{A(t-t_0)} (x_{init} + A^{-1}b) - A^{-1}b.$$

其 ℓ 阶导数为：

$$x^{(\ell)}(t) = e^{A(t-t_0)} (A^\ell x_{init} + A^{\ell-1}b),$$

因此导数的范数满足：

$$\begin{aligned} \|x^{(\ell)}(t)\| &= \|V e^{D(t-t_0)} V^{-1} (A^\ell x_{init} + A^{\ell-1}b)\| \\ &\leq \kappa_V (\|A\|^\ell \|x_{init}\| + \|A\|^{\ell-1} \|b\|) \end{aligned}$$

上式第一行利用了矩阵 A 的对角化性质，第二行利用了特征值的约束条件 $|\arg(-\lambda_i)| \leq \alpha$ 。

将上述结果代入定理 1，可得误差界：

$$\begin{aligned}
\|x(t_m) - x_m\| &\leq M\kappa_V \left(\max_{0 \leq j < k} \|x(t_j) - x_j\| + h^p \int_{t_0}^{t_m} \|x^{(p+1)}(\xi)\| d\xi \right) \\
&\leq M\kappa_V \left[M_E \kappa_V^2 h^2 k \left(\|x_{\text{init}}\| + \frac{\|b\|}{\|A\|} \right) \|A\|^2 + \right. \\
&\quad \left. h^p (t_m - t_0) \kappa_V \left(\|x_{\text{init}}\| + \frac{\|b\|}{\|A\|} \right) \|A\|^{p+1} \right] \\
&= O \left(\kappa_V^2 \left(\|x_{\text{init}}\| + \frac{\|b\|}{\|A\|} \right) \left[\kappa_V h \|A\|^2 + m h \|A\|^{p+1} \right] \right).
\end{aligned}$$

□

该结果表明：若忽略对多数参量的依赖及启动方法的误差，总误差随总时间 Δt 的缩放阶为 $O(\|A\| h^p \|A\| \Delta t)$ 。若要求总误差不超过 ϵ ，则需选择时间步数：

$$N_t = O \left(\frac{\|A\| \Delta t^{1+\frac{1}{p}}}{\epsilon^{\frac{1}{p}}} \right).$$

即所需时间步数随总时间 Δt 的增长接近线性。

接下来考虑如何将多步法编码为线性方程组 $\mathcal{A}\vec{x} = \vec{b}$ 。前文已介绍欧拉法的编码方式，更一般地，我们采用“欧拉法启动 \rightarrow 高阶多步法迭代 \rightarrow 恒定解约束”的流程：对于 $N_t \geq 2k$ ，矩阵 \mathcal{A} 的块元素定义为：

$$\begin{cases} \mathcal{A}_{j,j} = \mathbf{I}, & 0 \leq j < k, \frac{N_t}{2} < j \leq N_t, \\ \mathcal{A}_{j,j-1} = -(\mathbf{I} + Ah), & 1 \leq j < k, \\ \mathcal{A}_{j,j-k+\ell} = \alpha_\ell \mathbf{I} - \beta_\ell Ah, & k \leq j \leq \frac{N_t}{2}, 0 \leq \ell \leq k, \\ \mathcal{A}_{j,j-1} = -\mathbf{I}, & \frac{N_t}{2} < j \leq N_t. \end{cases}$$

采用该矩阵时需满足 $N_t \geq 2k$ ，否则缺乏足够的时间步启动线性多步法。向量 \vec{b} 的块元素定义为：

$$\begin{cases} b_0 = x_{in}, \\ b_j = bh, & 1 \leq j < k, \\ b_j = \sum_{\ell=0}^k \beta_\ell bh, & k \leq j \leq \frac{N_t}{2}, \\ b_j = 0, & \frac{N_t}{2} < j \leq N_t. \end{cases}$$

本文要求矩阵 A 、向量 b 和初始向量 x_{in} 均为稀疏矩阵/向量，即任意行或列的非零元素个数不超过 s 。假设所用“预言机 (oracle)”的形式与文献 [8] 一致：

- 矩阵 A 的预言机是一个么正算子，作用形式为：

$$O_A |j, \ell\rangle |z\rangle = |j, \ell\rangle |z \oplus A^{[j, \ell]}\rangle,$$

其中 \oplus 表示模加法， $A^{[j, \ell]}$ 是矩阵 A 第 j 行第 ℓ 列元素的二进制表示（上标表示块内索引）。

- 稀疏性预言机用于定位非零元素：设函数 $f(j, \ell)$ 表示“第 j 列第 ℓ 个非零元素所在的行索引”，则该预言机为么正算子，作用形式为：

$$O_F |j, \ell\rangle = |j, f(j, \ell)\rangle.$$

由于矩阵 A 非厄米，还需类似的预言机定位“给定行中的非零元素”；同时，还需用于获取 b 和 x_{in} 非零元素“位置与数值”的预言机。这些预言机可确保高效制备与 \vec{b} 对应的初始量子态；此外，也可假设 b 和 x_{in} 满足文献 [24] 中“高效制备流程”的条件。

利用文献 [12] 中的算法求解上述线性方程组，其复杂度为 $\tilde{O}(\log(N)s^4\kappa^2/\epsilon_L)$ ，其中 κ 是矩阵 \mathcal{A} 的条件数， ϵ_L 是线性方程组求解的允许误差（需注意：文献 [12] 中 s 的指数误写为 2，实际应为 4）。需强调的是， ϵ_L 是线性方程组求解的允许误差，与微分方程求解的允许误差 ϵ 是两个不同的量。