

Kodiranje hamiltoniana v kvantni simulaciji razširjanja valovanja, difuzije in stacionarnih stanj

Roman Novak

Inštitut Jožef Stefan, Odsek za komunikacijske sisteme, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, Slovenija
E-pošta: roman.novak@ijs.si

Povzetek. Kvantno računalništvo je temeljno nov pristop k simulaciji realnih pojavov z izkoriščanjem superpozicije, prepletenosti ter interference za kodiranje in obdelavo informacij na podlagi dinamike kvantnih stanj. Kvantni algoritmi za simulacijo problemov na osnovi parcialnih diferencialnih enačb (PDE) so že dosegli določen napredek, zlasti prek reševanja linearnih sistemov, vendar ostajajo drugi, potencialno obetavnejši pristopi razmeroma slabo raziskani. Namen prispevka je analizirati primernost izbranih PDE za neposredno preslikavo na Hamiltonov operator ter opredeliti, kdaj in kako je mogoče te enačbe naravno vključiti v kvantno dinamiko. Osrednji poudarek je na valovni enačbi zaradi njenega pomena za modeliranje razširjanja elektromagnetnih (EM) valov v komunikacijskih sistemih. Kodiranje hamiltoniana valovne enačbe razširimo tudi na toplotno in Poissonovo enačbo. Skupaj te enačbe modelirajo razširjanje valovanja, difuzijo in stacionarne pojave, ki so ključnega pomena v fiziki in inženirstvu. Identificiramo kvantno specifične omejitve, ki nastanejo pri preslikavi teh enačb v kvantne sisteme. Neohranjanje energije, realni robni pogoji in nehomogeni mediji so izzivi, ki jih v klasičnih numeričnih shemah, kot je Yeejeva metoda končnih razlik v časovni domeni (FDTD), ni. Razumevanje teh omejitev je ključno za določitev realnih področij uporabe in za oblikovanje pogojev, pod katerimi lahko kvantna simulacija prinese prednost.

Ključne besede: kvantno računalništvo, kvantni algoritmi, elektromagnetno valovanje, parcialne diferencialne enačbe, valovna, toplotna in Poissonova enačba, metode končnih razlik, simulacija hamiltoniana, numerično modeliranje, kvantno ohlajanje, kvadratna neomejena binarna optimizacija

Hamiltonian Encoding in Quantum Simulation of Wave Propagation, Diffusion, and Steady-State Problems

Quantum computing introduces a fundamentally new paradigm for simulating physical systems by leveraging superposition, entanglement, and interference to encode and manipulate information through the dynamics of quantum states. The application of quantum algorithms to simulate problems based on partial differential equations (PDEs) has made some progress, particularly through linear system solving; however, other potentially more promising methods remain comparatively underexplored. Here we investigate the suitability of selected PDEs for direct Hamiltonian mapping, examining when and how these equations can be naturally embedded into quantum dynamics. Our primary focus is on the wave equation, due to its significance for electromagnetic (EM) propagation modeling in communication systems. We further extend the Hamiltonian encoding to the heat and Poisson equations. Together, these equations model propagation, diffusion, and steady-state phenomena central to physics and engineering. We identify quantum-specific constraints that arise when mapping these equations to quantum systems. Energy non-conservation, realistic boundaries, and general inhomogeneous media pose challenges not present in classical numerical schemes, such as Yee's finite-difference time-domain (FDTD) method. Understanding these limitations is essential for determining realistic

application domains and for formulating conditions under which quantum simulation can provide an advantage.

Keywords: quantum computing, quantum algorithms, electromagnetic propagation, partial differential equations, wave, heat, and Poisson equations, finite difference methods, Hamiltonian simulation, numerical modeling, quantum annealing, quadratic unconstrained binary optimization

1 UVOD

Richard Feynman je leta 1982 [1] prepoznal izjemen potencial kvantnih sistemov za modeliranje in reševanje problemov, ki so za klasične računalnike računsko nerešljivi. Vizija kvantne simulacije predstavlja temelje sodobnega kvantnega računalništva. Prehod s klasičnega na kvantno računanje številni vidijo kot naslednjo tehnološko revolucijo, čeprav je nekaj skepticizma še prisotnega [2]. Moč kvantnih sistemov izhaja iz dveh ključnih načel: superpozicije in prepletenosti. Superpozicija omogoča, da n -kubitni sistem hkrati predstavlja 2^n stanj, kar omogoča izjemno stopnjo paralelizma, medtem ko prepletenost ustvarja edinstvene korelacije med kubitami in s tem nove pristope k računanju. Računski preboji na področju kvantne kriptografije in faktorizacije so se kmalu razširili na področja, kot sta računska kemija in optimizacija, ter razkrili širok potencial kvantnega računalništva.

Prejet 29. maj, 2026
Odobren 21. junij, 2026



Avtorske pravice: © 2026
Creative Commons Attribution 4.0
International License

Temelj kvantne mehanike predstavlja Schrödingerjeva enačba, ki zagotavlja teoretično osnovo za kvantno računalništvo. Kubit kot osnovna informacijska enota se lahko nahaja v stanju 0, 1 ali poljubni kvantni superpoziciji obeh. Lastnost superpozicije izhaja iz linearnosti Schrödingerjeve enačbe: če sta dve stanji veljavni rešitvi, je tudi vsaka njuna linearna kombinacija veljavna rešitev. Kvantna stanja kažejo valovno obnašanje, kar vodi do interferenčnih pojavov, ki so ključni za številne kvantne algoritme. Pri opisu časovnega razvoja kvantnega sistema ima Schrödingerjeva enačba obliko

$$\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} H |\psi\rangle, \quad (1)$$

kjer je $\hbar$ Planckova konstanta in H fiksni hermitski operator, znan kot hamiltonian zaprtega sistema. Lastne vrednosti operatorja H ustrezajo mogočim energijskim nivojem sistema, pri čemer osnovno stanje pomeni konfiguracijo z najnižjo energijo.

Neposredna analogija s klasičnim računalnikom, ki kvantni računalnik obravnava kot stroj, ki izvaja operacije nad kubitom z uporabo kvantnih vrat, ne poudari dovolj dejstva, da je kvantno računanje konceptualno drugačno, ne le hitrejše. Razlike se pojavijo že na ravni abstrakcije vrat. V nasprotju s klasičnimi vrati so kvantna vrata reverzibilna in delujejo na kubitih v superpoziciji stanj. Kvantna vrata so unitarne transformacije, ki v času razvijajo kvantno stanje sistema v skladu s Schrödingerjevo enačbo, pri čemer je povezava med unitarnimi operatorji v končnem časovnem intervalu in hamiltonianom sistema podana z izrazom

$$U(t_1, t_2) \equiv e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar}. \quad (2)$$

Resnična moč kvantnega računanja izhaja iz fizike, ne le iz teorije informacij. Superpozicija, prepletenost in interferenca omogočajo kvantnemu računalniku, da računa z oblikovanjem dinamike amplitud namesto zgolj z manipulacijo logičnih simbolov. Programiranje univerzalnega kvantnega računalnika je dejansko načrtovanje hamiltoniana oziroma zaporedja unitarnih operacij tako, da naravni časovni razvoj sistema izvede izračun.

Nekateri računski problemi se naravneje zapišejo s pomočjo hamiltoniana in ne z zapleteno ter neintuitivno konstrukcijo enostavnih kvantnih vrat. Izraz "enostavna" se nanaša na eno- in dvokubitna vrata, ki jih je mogoče realizirati s kratkimi, koherentnimi fizikalnimi interakcijami in so del univerzalnega nabora vrat kvantnega računalnika. Take probleme najdemo na področju kvantne kemije ali pri reševanju linearnih sistemov.

V tem prispevku se osredotočamo na podrazred problemov, opisanih s parcialnimi diferencialnimi enačbami (PDE). Raziščemo njihovo primernost za neposredno preslikavo na sistemski hamiltonian ter ocenimo potencialne prednosti in omejitve takšnega pristopa. Poleg osnovne valovne enačbe obravnavamo toplotno in Poissonovo enačbo; skupaj tvorijo temeljno trojico linearnih PDE drugega reda. Medtem ko valovna enačba modelira

razširjanje valov in je hiperbolična, toplotna enačba opisuje difuzijske procese in je parabolična. Poissonova enačba opisuje stacionarna stanja in je eliptična. Razumevanje, kako je vsako od teh enačb mogoče učinkovito predstaviti in simulirati na kvantnih računalnikih, je ključno za napredek kvantnih računskih metod za kompleksne fizikalne sisteme. Izražene z Laplaceovim operatorjem za opis razširjanja v prostoru so valovna, toplotna in Poissonova enačba

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \nabla^2 u, \quad f = \nabla^2 u. \quad (3)$$

Trojica obravnavanih enačb spada med najpogostejše uporabljene PDE v znanosti in inženirstvu. Uporabljajo se za modeliranje procesov v fiziki, kemiji, biologiji, financah in računalniški grafiki. Toplotna enačba opisuje difuzijske procese, pri katerih se količine, kot so toplota, delci in verjetnost, širijo v času, ter je ključna pri simulacijah hlajenja, toplotne izolacije, taljenja kovin, finančni matematiki in verjetnostnih procesih. Stacionarno ravnovesje Poissonove enačbe ima bistveno vlogo v elektrostati, toplotni tehniki, problemih tlaka tekočin in računalniški grafiki ter na številnih drugih področjih. Valovna enačba opisuje razširjanje motenj v prostoru in času, kot so mehanski, akustični, vodni in elektromagnetni valovi, z uporabo v brezžičnih komunikacijah, optiki, seizmološkem napovedovanju, medicinskem slikanju in drugje.

Prispevek ima naslednjo strukturo. V drugem poglavju podamo pregled znanih pristopov k reševanju PDE ter izpostavimo njihove prednosti in omejitve. Simulacijo časovnega razvoja kodiranega systemskega hamiltoniana dodatno ponazorimo z osnovnimi matematičnimi koncepti dveh najpomembnejših metod. Podamo tudi pregled drugih pristopov, vključno s kvantnim reševanjem linearnih sistemov, uporabo variacijskih kvantnih algoritmov in pristopi s kvantnim ohlajanjem. V tretjem poglavju se dotaknemo simulacije delovanja hamiltoniana na kvantnem računalniku, ki predstavlja osnovni primitiv več metod, ne le pristopa s kodiranjem hamiltoniana. Četrto poglavje sistematično obravnava prednosti in omejitve neposrednega kodiranja ter nakaže mogoče poti za reševanje glavnih ovir pri reševanju praktičnih problemov. Prispevek zaključimo s sklepnimi ugotovitvami v petem poglavju.

2 KVANTNI PRISTOPI REŠEVANJA PDE

Doslej je bilo predlaganih več pristopov kvantnega reševanja parcialnih diferencialnih enačb, pri čemer vsak temelji na različnih predpostavkah in kvantnih primitivih. Strategije za reševanje linearnih PDE vključujejo:

- neposredno simulacijo časovnega razvoja kvantnega sistema na osnovi njegovega hamiltoniana,
- diskretizacijo prostorske domene, ki ji sledi uporaba kvantnega algoritma za reševanje linearnih sistemov,

- uporabo variacijskih kvantno-klasičnih hibridnih metod ter
- uporabo kvantnega ohlajanja (angl. *quantum annealing*, QA) na funkcijski obliki diferencialnega problema, ki se rešuje z minimizacijo.

Kvantni algoritmi za reševanje parcialnih diferencialnih enačb so predmet vse večjega števila raziskav, vendar so v primerjavi s kvantnimi algoritmi za reševanje navadnih diferencialnih enačb (ODE) še vedno zapostavljeni. Algoritmi za reševanje problemov strukturne mehanike so obširno obravnavani v [3], skupaj s pripadajočimi zahtevami za kvantno strojno opremo. Drugi pregledni članki o reševanju PDE s kvantnimi algoritmi, kot je [4], obravnavajo še računsko zahtevnost in potencial za eksponentno pohitritev, tudi v kontekstih navadnih in nelinearnih diferencialnih enačb. Slika 1 povzema osnovne pristope kvantnih algoritmov za reševanje PDE, ki jih obravnavamo v nadaljevanju.

2.1 Simulacija s časovnim razvojem kodiranega sistemskega hamiltoniana

Kvantno računanje je zaradi valovne narave kvantne obdelave informacij zlasti primerno za numerične metode reševanja valovnih PDE. Algoritem za kvantno simulacijo valovne enačbe (QWE) je bil prvič predlagan v [5]. Avtorji so pokazali, da je mogoče prostorsko diskretizirano valovno enačbo z Dirichletovimi ali Neumannovimi robnimi pogoji časovno simulirati neposredno z razvojem sistemskega hamiltoniana. Predlagana metoda preoblikuje drugi časovni odvod v sistem prvega reda, kar omogoča zapis v obliki Schrödingerjeve enačbe. Pretvorba ohrani čas kot zvezno spremenljivko. Neposredna simulacija hamiltoniana se tako ponuja kot naravna rešitev. Implementacija predlaganega algoritma QWE je bila analizirana v [6], kjer je bilo pokazano, da se teoretična zahtevnost algoritma ujema s potencialno izvedbo na kvantnem čipu IBM Q Melbourne, vendar je bil algoritem še vedno analiziran le na programskem simulatorju. Razen enostavnih Neumannovih in Dirichletovih robnih pogojev z ničelnim odvodom ali vrednostjo polja na robu je implementacija drugih robnih pogojev še vprašljiva, prav tako tudi rešitev drugih praktičnih problemov, ki jih omenimo v nadaljevanju.

Pristop lahko okvirno ponazorimo z naslednjimi enačbami za dvodimenzionalni primer. Diskretizirano obliko osnovne valovne enačbe z uporabo Laplaceovega operatorja L zapišemo kot

$$\frac{\partial^2 \Phi_V}{\partial t^2} = -\frac{1}{a^2} L \Phi_V, \quad (4)$$

pri čemer Φ_V predstavlja vektor točk polja v pravokotni mreži z enotno razdaljo a med točkami v vertikalni in horizontalni smeri. Kvantno stanje $|\psi\rangle$ razdelimo na del z vrednostmi polja v vozliščih Φ_V in na del z vrednostmi na povezavah med vozlišči Φ_E . Če modeliramo elektromagnetno valovanje, prve vrednosti predstavljajo električno polje, medtem ko vrednosti na povezavah

ustrezajo magnetnemu polju. Hilbertov prostor je tako definiran kot vsota dveh podprostorov $\mathcal{H} = \mathcal{H}_V \oplus \mathcal{H}_E$. Sistemski hamiltonian definiramo kot

$$H = \frac{1}{a} \begin{bmatrix} 0 & B \\ B^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \quad (5)$$

z matriko B

$$B_{i,e} = \begin{cases} \sqrt{w_e} & \text{povratna zanka } e \text{ vozlišča } i, \\ \sqrt{w_e} & \text{povezava } e \text{ z izvirnim vozliščem } i, \\ -\sqrt{w_e} & \text{povezava } e \text{ s ponornim vozliščem } i, \\ 0 & \text{sicer,} \end{cases} \quad (6)$$

kjer indeks i določa vozlišče in indeks e povezavo v grafu L . Utež w_e je običajno 1, razen v primeru robnih pogojev ali nehomogenih področij. Costa in sod. so pokazali, da je drugi odvod Schrödingerjeve enačbe (2) za tako definirani hamiltonian (5) enak

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{bmatrix} \Phi_V \\ \Phi_E \end{bmatrix} = -\frac{1}{a^2} \begin{bmatrix} L & 0 \\ 0 & B^\dagger B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_V \\ \Phi_E \end{bmatrix}, \quad (7)$$

kjer je $BB^\dagger = L$. Iz enačbe je razvidno, da časovni razvoj podprostoru Φ_V ustreza rešitvi valovne enačbe (4).

V [7] smo v zgoraj opisani algoritem za kvantno simulacijo valovne enačbe integrirali heksagonalne mreže ter pokazali, da je uporaba enostavnih robnih pogojev še vedno mogoča. Rešitev smo proučili v kontekstu modeliranja razširjanja elektromagnetnega valovanja in jo primerjali s klasično numerično metodo FDTD. Predlagano reševanje v heksagonalni mreži izkazuje disperzijo, primerljivo z metodami četrtega reda v kartezični mreži, ter dosega kvadratno izboljšanje mer anizotropije.

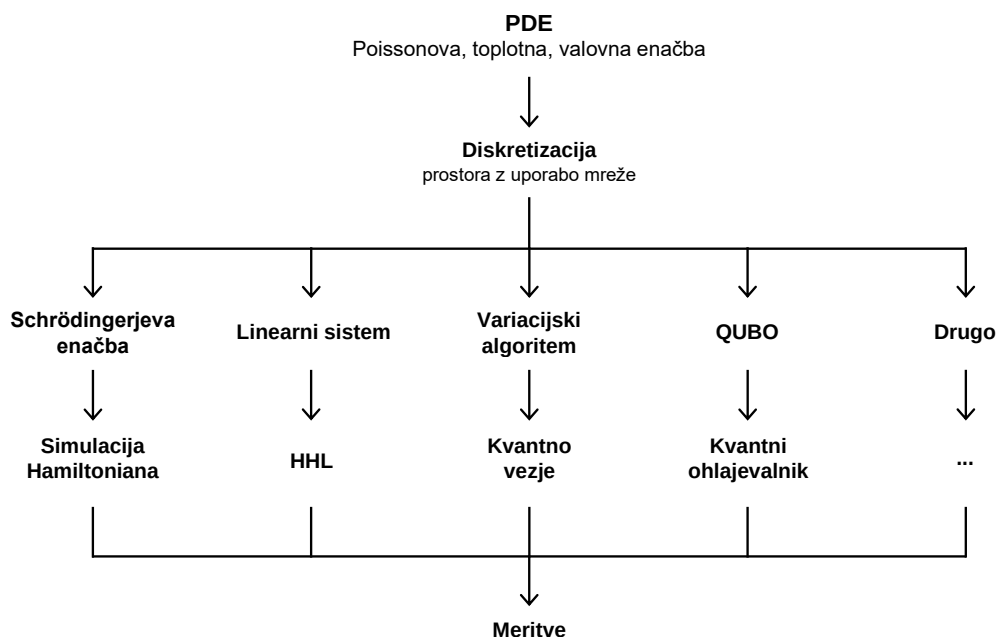
V [8], [9] in [10] je uveden pojem "schrödingelizacije" kot enotne algebralne metode, primerne za katerokoli linearno PDE, vključno z nehermitskimi in disipativnimi primeri. Enačbe so predstavljene v obliki Schrödingerjeve enačbe v prostoru višjih dimenzij in še vedno zahtevajo zgolj simulacijo hamiltoniana. Metoda kvantnim računalnikom, ki lahko izvajajo le unitarni časovni razvoj, omogoča simulacijo neunitarnih fizikalnih procesov z integracijo v večji hermitski sistem. Parabolične, hiperbolične in eliptične enačbe je mogoče izraziti v tej obliki. Žal je metoda v diskretni različici zaradi prehoda v frekvenčno domeno izredno nenatančna in potrebuje izboljšave.

Za ponazoritev metode vzemimo enostavno PDE prvega reda

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = Au(t). \quad (8)$$

Pri prevedbi na hamiltonian kvantnega sistema razdelimo linearni diferencialni operator A na hermitski H_1 in antihermitski del H_2 :

$$\begin{aligned} A &= H_1 - iH_2 \\ H_1 &= (A + A^\dagger)/2 \\ H_2 &= i(A - A^\dagger)/2 \end{aligned} \quad (9)$$



Slika 1 Osnovni pristopi kvantnih algoritmov za reševanje PDE

Iskani vektor u razširimo z uvedbo nove dimenzije prostora, pri čemer definiramo enodimenzionalno spremenljivko $\xi > 0$

$$w(t, \xi) = e^{-\xi} u(t). \quad (10)$$

Razširitev w predstavlja rešitev PDE

$$\frac{dw}{dt} = -H_1 \frac{dw}{d\xi} - iH_2 w. \quad (11)$$

Če je rešitev w znana, je rešitev originalne enačbe $u = e^{\xi} w(t, \xi)$ za $\xi > 0$. Naj bo $\tilde{w}(t, \eta)$ Fourierova transformacija w po spremenljivki ξ . Potem velja

$$\frac{\partial \tilde{w}}{\partial t} = -i(\eta H_1 + H_2) \tilde{w}. \quad (12)$$

Izraz $\eta H_1 + H_2$ je hermitski, zato enačba (12) predstavlja sistem nepovezanih Schrödingerjevih enačb, ki so primerne za kvantno simulacijo.

Neunitarno dinamiko je mogoče v kvantne algoritme uvesti tudi s pomočjo linearne kombinacije unitarnih operatorjev (LCU) [11]. Nedavni predlog [12] je pokazal, da je mogoče energijsko nekonzervativne probleme in probleme s prostorsko spremenljivimi parametri simulirati z linearno kombinacijo hamiltonianovih simulacij (LCHS), katere temelj je LCU. Ključni tehniki LCHS sta učinkovito kodiranje heterogenega medija v hamiltonian z uporabo tehnik minimizacije ter uporaba metod tenzorskih mrež za učinkovito implementacijo kvantnega vezja LCU.

2.2 Kvantno reševanje linearnih sistemov

Linearne PDE lahko aproksimiramo s končnim sistemom algebraičnih enačb z uporabo metod, kot so

končne razlike, končni elementi in končni volumni. Nastali linearni sistem je primeren za reševanje z univerzalnim kvantnim algoritmom za reševanje linearnih sistemov. V literaturi so običajno uporabljeni algoritem HHL (Harrow–Hassidim–Lloyd) ter njegove razširitve in posplošitve. HHL so leta 2009 predlagali Aram Harrow, Avinatan Hassidim in Seth Lloyd [13]. Za določene tipe problemov algoritem potencialno omogoča eksponentno pohitritev v primerjavi s klasičnimi algoritmi, vendar je zelo občutljiv za napake in šum v kvantnih sistemih. Implementacija HHL na današnji kvantni strojni opremi ostaja velik izziv, predvsem zaradi potrebe po dolgi koherenci stanj in zelo natančnih operacijah kvantnih vrat.

Poissonova enačba z ustreznimi robnimi pogoji je pogost testni primer kvantnih algoritmov za reševanje PDE z uporabo HHL. Predlogi, kot sta [14] in [3], predpostavljajo, da je desna stran linearnega sistema že pripravljena kot kvantno stanje. V [15] je diskretni Laplaceov operator predhodno diagonaliziran z uporabo diskretnih sinusnih ali kosinusnih transformacij v regularni mreži [16], kar poenostavi sestavo in obrat linearnega sistema znotraj kvantnih vezij. [17] dodatno uvede binarni razvoj funkcije, kar omogoča zamenjavo računsko zahtevnih operacij potenciranja iz [15] z aritmetičnimi operacijami. V [18] je predlagana nadaljnja optimizacija, ki dodatno zmanjša zahtevnost operacij kontroliranih rotacij.

Kvantni algoritem za reševanje linearnih sistemov je odvisen od pogojnega števila matrike koeficientov. To odvisnost je mogoče omiliti z uporabo valjčne baze [19]. Pri številnih PDE, zlasti eliptičnih enačbah, to

vodi do polilogaritmičnega povečanja sistema glede na število neznank, kar učinkovito odpravi odvisnost od pogojnega števila. V komplementarnem pristopu [20] je uporabljena spektralna metoda za reševanje Poissonove enačbe. Namesto diskretizacije v časovni domeni ta metoda kodira rešitev v spektralni domeni. Pri homogenih Dirichletovih ali Neumannovih robnih pogojih metoda zrcaljenja razširi računsko domeno z ohranitvijo simetrije problema.

Tudi toplotno enačbo je mogoče preoblikovati v zaporedje linearnih sistemov oziroma časovnih korakov. Primerjalna analiza teh tehnik in ocen njihove računske zahtevnosti je podana v [21], kjer so obravnavane tudi alternativne kvantne strategije, kot so pospešeni kvantni prehodi (angl. *fast-forwarded quantum walks*), koherentna diagonalizacija ter različice naključnega sprehoda z ocenjevanjem amplitud.

Pomembno je poudariti, da ima algoritem HHL več omejitev glede razreda linearnih sistemov, ki jih lahko učinkovito rešuje. Da bi našli x , ki zadošča $Ax = b$, mora biti matrika A hermitska, vektor b pa že kodiran kot kvantno stanje $|b\rangle$. Za dosego eksponentne pohitritve mora biti A redka, učinkovito implementabilna in imeti mora majhno pogojno število. Časovna zahtevnost algoritma se namreč povečuje sorazmerno s kvadratom pogojnega števila. Privzeta je tudi učinkovita priprava začetnega stanja, ki ni predvidena v algoritmu. Za reševanje tega problema so Clader in sod. [22] predlagali spremenjeno shemo inicializacije, pri kateri je začetno stanje prepleteno z dodatnim (angl. *ancillary*) kubitom.

Algoritem HHL se opira na simulacijo hamiltoniana, podobno kot pristopi, ki problem neposredno kodirajo v hamiltonian. Ker se zahtevnost HHL povečuje s pogojnim številom matrike koeficientov, se za izboljšanje učinkovitosti pogosto uporablja tehnika predpogojevanja (angl. *preconditioning*) [22]. Izračunane rešitve, predstavljene kot kvantno stanje $A^{-1}|b\rangle$, ni mogoče neposredno odčitati, kar velja tudi za pristop, ki neposredno kodira PDE v sistemski hamiltonian. Za dosego eksponentne pohitritve je izhod algoritma običajno le pričakovana vrednost $\langle x|M|x\rangle$ danega problema z znanim operatorjem M .

2.3 Uporaba variacijskih kvantnih algoritmov

Variacijski kvantni algoritmi (VQA) predstavljajo razred hibridnih kvantno-klasičnih algoritmov, ki uporabljajo variacijsko optimizacijo za reševanje računskih problemov z uporabo omejenega števila kubitov in plitvih kvantnih vezji [23]. Zasnovani so za kvantno strojno opremo v bližnji prihodnosti [24]. VQA preoblikujejo kvantne probleme v optimizacijske naloge, kjer je cilj minimizirati cenovno ali energijsko funkcijo z nastavljanjem parametrov kvantnega vezja, imenovanega tudi "ansatz" ali nastavek. Optimizacijska zanka združuje pripravo kvantnega stanja in meritve na kvantnem procesorju s klasičnimi optimizacijskimi postopki.

VQA so bili že predlagani za reševanje Poissonove enačbe. V [25] je variacijski nastavek zasnovan tako, da minimizira ostanek diskretizirane Poissonove enačbe, pri čemer uporablja različico nastavka na osnovi kvantnih izmeničnih operatorjev (angl. *quantum alternating operator ansatz*) [26]. [27] uporablja podobno variacijsko načelo za dosego istega cilja. Rezultati praktičnih primerjalnih testov teh teoretičnih pristopov so dostopni v [28]. Ocenjena je zmogljivost in občutljivost za šum VQA za Poissonovo enačbo na realni kvantni strojni opremi.

2.4 Kvantno ohlajanje

Kvantno ohlajanje (angl. *quantum annealing*, QA) je alternativni pristop k reševanju računskih problemov z neposrednim razvojem specifičnih časovno odvisnih hamiltonianov, kjer ciljno osnovno stanje kodira iskano rešitev. Namesto neposredne simulacije QA vzpostavi osnovno stanje enostavnega hamiltoniana in ga nato adiabatsko preoblikuje v hamiltonian zastavljenega problema, pri čemer izkorišča pojav kvantnega tuneliranja. Adiabatski razvoj kvantnega sistema zagotavlja, da sistem v osnovnem stanju ostane v stanju najnižje energije, če se hamiltonian sistema spreminja dovolj počasi [29], [30]. Čeprav je adiabatsko kvantno računanje po računski moči dokazljivo enakovredno univerzalnemu kvantnemu računalniku, praktični kvantni ohlajevalniki omejujejo dovoljene hamiltoniane, zaradi česar trpi univerzalnost, a so eksperimentalno bistveno dostopnejši. V nasprotju z univerzalnimi kvantnimi računalniki, ki so še v povojih, je danes že na voljo strojna oprema za kvantno ohlajanje s tisoči kubitov. Podobno kot v VQA je tudi v QA cilj poiskati stanje najnižje energije kvantnega sistema, ki ustreza rešitvi problema, vendar je način doseganja takšnega stanja bistveno drugačen.

Pomemben razred problemov, ki jih je mogoče reševati s QA, so problemi, ki jih je mogoče formulirati kot kvadratno neomejeno binarno optimizacijo (QUBO). Matematična formulacija QUBO omogoča zapis širokega nabora optimizacijskih problemov, vključno z binarnim celoštevilskim programiranjem, kvadratičnim programiranjem in kombinatorično optimizacijo. Za reševanje problema QUBO s kvantnim ohlajanjem se običajno izvede pretvorba v Isingov model [31], [32]. Formulaciji sta matematično in računsko ekvivalentni, a je Isingov model bližji razpoložljivi strojni opremi. Ob koncu ohlajanja se sistem nahaja v osnovnem stanju Isingovega hamiltoniana, kar ustreza približni rešitvi optimizacijskega problema. Pomembno je poudariti, da obstoj kvantne prednosti za QA še ni dokončno dokazan. Poleg tega je metoda omejena na reševanje problemov stacionarnih stanj.

Ena prvih demonstracij reševanja diferencialnih enačb s kvantnim ohlajanjem je predstavljena v [33]. Funkcionalna oblika diferencialnega problema, primerna za minimizacijo, je preoblikovana v diskretizirano obliko in formulirana kot kombinatorični optimizacijski problem.

Končni problem ima obliko NP-težkega problema binarnega barvanja grafa.

Hibridni kvantno-klasični pristop reševanja toplotne enačbe je raziskan v [34]. Kvantno ohlajanje je uporabljeno kot podprogram v iterativni shemi. Pri reševanju izvirnega linearnega sistema je uporabljena Gauss–Seidlova metoda, sistem pa je razdeljen na računске bloke z Dirichletovimi robnimi pogoji. Metoda je bila implementirana in preizkušena na kvantnih ohlajevalnikih podjetja D-Wave Systems [35].

Omenjeni kvantni ohlajevalnik je bil uporabljen tudi v [36] za reševanje toplotne in Poissonove enačbe za kvadratno površino s fiksnimi temperaturnimi robnimi pogoji, pri čemer je bil uporabljen ohlajevalnik z več kot 5.000 kubiti. Tako kot v [34] je bila diskretizirana PDE najprej zapisana kot sistem linearnih enačb in nato razdeljena na manjše podsisteme. Konvergenca Gauss–Seidlove metode je bila izboljšana z blokovno zaporedno prekomerno relaksacijo (angl. *block successive over-relaxation*). Podsistemi so bili nato preoblikovani v probleme QUBO in reševani na kvantnem ohlajevalniku. Omeniti moramo še [37], ki opisuje soroden pristop, pri katerem je bil sistem linearnih navadnih diferencialnih enačb, torej enostavnejše oblike splošnega diferencialnega problema, preoblikovan v obliko, primerno za kvantno ohlajanje.

2.5 Drugi pristopi

Novejši kvantni algoritem zmanjšuje računsko obremenitev, povezano s kvantno aritmetiko in simulacijo hamiltoniana z rešitvijo, ki temelji na kontroliranih rotacijah [38]. V kontekstu nelinearnih PDE [39] je v [40] predlagano reševanje sistemov navadnih diferencialnih enačb, dobljenih z diskretizacijo nelinearnih PDE, z algoritmom kvantnega ocenjevanja amplitud [41]. Metoda vključuje točke Gauss–Lobatto–Chebyshev in interpolacijo s kubičnimi zlepkami, njena učinkovitost pa je demonstrirana na enodimenzionalni toplotni enačbi.

3 SIMULACIJA HAMILTONIANA

Časovni razvoj kvantnega sistema za časovno neodvisen hamiltonian je unitarna transformacija. Vsako unitarno operacijo nad kubiti je zaradi univerzalnosti kvantnega računalnika mogoče realizirati s končnim zaporedjem kvantnih vrat. V praksi je neposredna dekompozicija časovnega razvoja e^{-iHt} na vrata pri velikih in strukturiranih hamiltonianih pogosto neobvladljiva. Da bi se izognili eksponentnemu naraščanju števila potrebnih vrat, delovanje hamiltoniana simuliramo, ne da bi oblikovali celotne matrike, na primer z uporabo Trotter–Suzukijevega razcepa kot najenostavnejše metode. Poudariti je treba, da simulacija še vedno poteka na kvantnem računalniku, ne na klasičnem: definiramo hamiltonian kvantnega sistema, ki modelira realni problem, nato ga simuliramo znotraj kvantnega sistema kvantnega

računalnika. Simulacija hamiltoniana je aproksimacija in zato na rešitev vpliva na kvantno specifičen način.

Na splošno so simulirani hamiltoniani zelo kompleksni, pogosto vključujejo večkubitne interakcije ali prepletenost. Ker kvantni računalnik izvaja operacije z uporabo kvantnih vrat, ki delujejo le na enem ali dveh kubitih hkrati, je treba hamiltonian razstaviti v obliko, primerno za implementacijo. Pogost pristop je zapis hamiltoniana kot vsote tenzorskih produktov Paulijevih matrik in operatorja identitete [42]. Z zapisom v Paulijevi bazi dobimo preslikavo na standardna kvantna vrata.

Eksponent vsote tenzorskih produktov Paulijevih matrik v časovnem razvoju kvantnega sistema zaradi nekomutativnosti ni enak vsoti eksponentov posameznih tenzorskih produktov Paulijevih matrik, zato je potrebna aproksimacija. V ta namen se pogosto uporablja dekompozicija Trotter–Suzuki [43], [44]. Metoda razdeli čas evolucije na manjše intervale in zaporedno uporabi eksponente posameznih Paulijevih členov, s čimer se rezultat približa pravi vrednosti. Napaka Trotterjeve aproksimacije prvega reda je $\mathcal{O}(t^2/n)$, kjer je n število časovnih intervalov. Za doseganje večje natančnosti je mogoče uporabiti Suzukijeve formule višjega reda.

Izboljšano asimptotično obnašanje dosežemo z uteženo vsoto unitarnih operatorjev, ki jo realiziramo z uporabo pomožnih kubitov in ojačanih amplitud. Opisani pristop je dejansko implementacija časovnega razvoja sistema v obliki okrnjene Taylorjeve vrste [45].

Kubitizacija (angl. *qubitization*) je zmogljiva tehnika, ki integrira hamiltonian v blokovno kodiran unitarni operator. Z uporabo polinomskih transformacij lastnih vrednosti unitarnega operatorja in skrbno zasnovanega zaporedja enokubitnih rotacij metoda doseže skoraj optimalno kompleksnost števila kvantnih vrat [46], [47].

Variacijski kvantni algoritmi ponujajo alternativno rešitev, pri kateri se dinamika hamiltoniana aproksimira s parametriziranim kvantnim vezjem [48]. Druge strategije, vključno z naključnimi metodami in kvantnimi sprehodi, čeprav teoretično izvedljive, so v praksi težko izvedljive.

Na področju razvoja kvantnih vezij za simulacijo tako redkih kot gostih hamiltonianov je bil v zadnjem času dosežen znaten napredek [49], [50], [51]. Pričakovati je, da se bosta algoritemska natančnost in strojna učinkovitost še naprej izboljševali. Primer je nedavna izboljšava simulacije z uporabo ojačenja spektra v kombinaciji z optimizirano tenzorsko faktorizacijo [52].

4 PREDNOSTI IN OMEJITVE NEPOSREDNEGA KODIRANJA

Temeljna prednost kvantnega računanja, ne le pristopa z neposrednim kodiranjem hamiltoniana, je prostor stanj, katerega velikost z naraščanjem števila kubitov eksponentno raste. Ta lastnost se v ustrezno zasnovanem algoritmu kaže kot eksponentna pohitritev in je lahko koristna za znanstvene računske probleme, ki temeljijo

na obravnavanih PDE. Na primer, finejša prostorska in časovna diskretizacija v klasičnem računanju izboljša natančnost in stabilnost rešitve, kar ponazarja znani Courant–Friedrichs–Lewyjev (CFL) pogoj metode končnih razlik v časovni domeni (FDTD).

Uporaba kvantnih algoritmov za numerično simulacijo prinaša edinstvene izzive v kvantni obdelavi informacij, ne le izjemne prednosti masivnega paralelizma. Prisotne so nove specifične omejitve s praktičnimi posledicami za uporabo obravnavanih algoritmov. Na primer, pri simulaciji valovanja amplitude valov predstavimo z amplitudami posameznih kvantnih stanj. Ker je vsota kvadratov kvantnih amplitud vedno ena, se mora energija simuliranega problema ohranjati. Neumannovi in Dirichletovi robni pogoji se zožijo na primere, ko sta odvod in vrednost polja na robu enaka nič. Absorpcijski robni pogoji, ki učinkovito simulirajo odprte meje in absorbirajo izhodne valove, kršijo zahtevo ohranitve energije, razen če absorbirana energija na neki način ostane znotraj sistema ali je potencialno korigirana s časovno odvisnim hamiltonianom. Upoštevanje poševnih robnih pogojev, zagotavljanje natančnih odbojev in prehodov v nehomogenih medijih razširjanja valov ter drugi, za zdaj še neprepoznani problemi imajo v klasičnih algoritmičnih rešitvah, medtem ko v kvantnem pristopu neposrednega kodiranja hamiltoniana zanje trenutno še ni ustreznih rešitev. V nadaljevanju izpostavimo najpomembnejše odprte probleme algoritmov z neposrednim kodiranjem hamiltoniana, s povzetkom v tabeli 1.

4.1 Omejitve diskretizacije

Klasična simulacija FDTD diskretizira prostor in čas, medtem ko kvantni algoritem, ki temelji na časovnem razvoju, diskretizira le prostor in išče rešitev v zveznem času. Pomembno je poudariti, da simulacija hamiltoniana, ki je sestavni del predlaganih kvantnih algoritmov, vključuje diskretizacijo časa, vendar tega ne smemo zamenjevati z zvezno časovno obravnavo v algoritmu. Napak, ki izhajajo iz izbrane aproksimacije matričnega eksponenta na eni strani in časovnih korakov metode FDTD na drugi, ni mogoče obravnavati enako. Prva vrsta napake je strogo omejena navzgor [49]. Ker je kvantni algoritem po svoji naravi le delno diskreten, bo izkazoval lastnosti, ki so bile v klasičnih algoritmičnih proučevanih le v omejenem obsegu.

4.2 Topologija in gostota mreže

V klasičnih algoritmičnih ima gostitev mreže diskretizacije omejeno praktično vrednost, saj naraščajoča časovna zahtevnost hitro onemogoči izvedbo izračunov v razumnem času. Poleg tega finejša prostorska diskretizacija pri dani topologiji mreže, ki jo je zaradi eksponentne rasti prostora stanj sicer lažje doseči v kvantnih pristopih, ne more odpraviti vseh vrst napak. Numerične metode so podvržene disperziji, napaki, ki nastane zaradi diferenčnih aproksimacij odvodov. Ta lastnost lahko vodi do nefizikalnih pojavov, kot je anizotropija. Tehnika

zgojitve mreže in ustrezná implementacija robnih pogojev lahko le delno zmanjšata nekatere napake ter izboljšata natančnost simulacij. V klasičnih algoritmičnih je problematičen tudi prevelik časovni korak, ki vodi do nestabilnosti, povzroča divergenco numerične rešitve ali pojav oscilacij. Zvezni čas kvantnega pristopa lahko nekatere artefakte omili, drugi, kot je anizotropija, ostajajo. Proučevanje alternativnih topologij mrež za kvantne algoritme je zato še vedno nujno in koristno, kot smo že pokazali v [7].

4.3 Zahteva po ohranitvi energije

V kvantni mehaniki je amplituda kvantnega stanja predstavljena s kompleksnim številom, katerega kvadrat absolutne vrednosti določa verjetnost, da bo sistem ob meritvi zaznan v določenem stanju. Zahteva, da je vsota verjetnosti enaka ena, ustreza ohranitvi klasične energije v simuliranem problemu, kar izključuje številne scenarije, ki jih klasični numerični algoritmi lahko obravnavajo. Omejitve je najlažje ponazoriti na primeru simulacije razširjanja elektromagnetnega valovanja kot primera valovne PDE. Izvora zveznega valovanja v tem okviru ni mogoče simulirati, saj bi tak pristop povzročil naraščanje energije polja skozi celotno simulacijo. Primernejši so problemi impulznega razširjanja valov, za katere so značilni elektromagnetni valovi kratkega trajanja in visoke intenzitete. Te predstavimo kot začetno kvantno stanje, ustrezno skalirano z verjetnostnim kriterijem. Ena izmed možnosti, ki jih je smiselno proučiti za omilitve te omejitve, je uvedba skritih dimenzij Hilbertovega prostora.

4.4 Splošnost robnih pogojev

Najpreprostejši Neumannovi in Dirichletovi robni pogoji morajo zaradi načela ohranjanja energije predpostaviti, da je odvod ali vrednost polja na robu enaka nič. Absorpcijski robni pogoji, ki simulirajo odprte meje in absorbirajo izhodne valove, to načelo kršijo. Potencialna rešitev je zadržati absorbirano energijo znotraj sistema ali jo zmanjšati s časovno odvisnim hamiltonianom. V primeru toplotne enačbe ničelni odvod kot robni pogoj modelira toplotno izolirano računsko domeno. Prenos toplote v okolico ali periodični robni pogoji še niso ustrezno obravnavani v okviru kvantnih algoritmov. Podobne težave se pojavijo pri iskanju ravnovesja, kot ga opisuje Poissonova enačba. Poleg podpore različnim vrstam robnih pogojev je aktualen tudi problem poševnih robov, ki niso poravnani z mrežo diskretizacije. Osnovni matematični izziv podpore splošnim robnim pogojem pri preslikavi obravnavanega problema na sistemski hamiltonian je simetrizacija Laplaceovega operatorja, ki ni trivialna in zahteva premišljene pristope.

4.5 Modeliranje nehomogenih domen

Materiale simuliranih računskih domen je trenutno mogoče vključiti v simulacijo z ustreznim uteževanjem členov Laplaceovega operatorja, če ti ne povzročajo

Tabela 1 Odprti problemi reševanja osnovnih PDE v kvantnih algoritmihi z neposredno preslikavo na sistemski hamiltonian

Tema	Problem	Izvedljivost in vodila
Osnovna preslikava PDE v okvir Schrödingerjeve enačbe	Razvoj in analiza osnovnih formulacij, vključno z metodami schrödingerizacije in neunitarne dinamike.	Costa in sod. so že prikazali osnovno preslikavo za valovno enačbo. Razširitev na parabolične in eliptične enačbe temelji na teoriji PDE in na relacijah med enačbami.
Prostor in čas	Analiza vpliva prostorske diskretizacije in ohranitve zveznega časa na lastnosti, kot sta stabilnost računa in razširljivost rešitve.	Sistematična prilagoditev znanih rezultatov analize klasičnih numeričnih metod.
Mreža diskretizacije	Obravnava pravokotnih in alternativnih mrež, kot so dvodimenzionalne heksagonalne mreže in tridimenzionalne tetradekaederske/dualno-tetraedrske mreže.	Obravnava lahko sledi pristopom analize v klasičnem računanju, kot je bilo prikazano za heksagonalne mreže in valovno enačbo v [7].
Neohranitev energije	Razvoj algoritmov, ki omogočajo simulacijo energijsko nekonzerativnih problemov ob hkratnem ohranjanju kvantne konsistentnosti.	Uvedba skritih dimenzij Hilbertovega prostora ali obravnava problema v frekvenčnem prostoru, kot je predlagano v [8].
Robni pogoji	Raziskava splošnih tipov robnih pogojev, kot so periodični in absorpcijski, ter robnih pogojev, ki geometrijsko niso poravnani z mrežo diskretizacije.	Prilagoditev klasičnih numeričnih rešitev omejitvam kodiranja sistema hamiltoniana.
Nehomogene domene	Upoštevanje materialov simuliranih računskih domen.	Poleg nastavitve ustreznih uteži Laplaceovega operatorja se integrirajo rešitve neohranitve energije zaradi mogoče absorpcije.
Simulacija hamiltoniana	Raziskava vpliva tehnik simulacije na numerično natančnost, konvergenco in ujemanje izračunanih rešitev s fizikalno realnostjo.	Metode simulacije hamiltoniana so dobro proučene, z analitično omejenimi napakami in znanimi konstrukcijami kvantnih vezij.
Nastavitev začetnega stanja in branje končnega stanja	Splošen problem prehoda med klasičnim in kvantnim prostorom.	Kvantni algoritem se uporabi kot podprogram drugega kvantnega algoritma ali pa se bere le reduciran rezultat v smislu pričakovane vrednosti.

izgub. Simulacija izgub zaradi absorpcije, ki na primer povzroča slabljenje valov med razširjanjem, trenutno ni mogoča.

4.6 Metoda simulacije hamiltoniana

Simulacija hamiltoniana vpliva na kakovost rešitve, zato je potrebna identifikacija najprimernejšega pristopa. Različni problemi vodijo do hamiltonianov z različnimi matematičnimi in fizikalnimi lastnostmi. Zaradi te raznolikosti se lahko izbira algoritma za simulacijo in potrebnih virov (število kubitov, globina vezja) med

primeri razlikuje za več velikostnih redov. Način kodiranja hamiltoniana vpliva na redkost (število neničelnih Paulijevih členov), lokalnost operatorjev, občutljivost za napake ter število kvantnih vrat. Vpliv izbrane simulacije je treba proučiti za vsak primer posebej. Metoda Trotter–Suzuki daje prednost lokalnim hamiltonianom z majhnim številom členov. Kubitizacija je zlasti učinkovita pri redkih hamiltonianih z učinkovito izračunljivimi matričnimi elementi. Variacijski pristopi so primernejši za šumne arhitekture in plitva vezja. Izbira najprimernejše metode, ki zagotavlja najboljše

ravnovesje med natančnostjo in robustnostjo, ostaja eden od odprtih problemov.

4.7 Priprava začetnega stanja in branje rezultatov

Pri izvajanju kvantnega algoritma v Hilbertovem prostoru stanj se običajno pričakuje eksponentna ali kvadratna pospešitev, medtem ko priprava začetnega stanja in branje rezultatov ostajata problematična, kar je značilno tudi za številne druge kvantne algoritme. Kvantni sistemi imajo lahko ogromno število baznih stanj glede na število vhodnih kubitov, ki jih klasični računalniki ne morejo niti pomniti. Priprava poljubnega stanja zahteva nadzor nad amplitudami in fazami vsakega baznega stanja. Z naraščanjem velikosti kvantnega sistema število parametrov, potrebnih za določitev začetnega stanja, eksponentno narašča, zaradi česar je nalogo vse težje izvesti. Izjema je priprava enostavnih začetnih stanj, ki vključuje superpozicijo in prepletanje med kubiti v osnovnem stanju.

Prehod med klasičnim in kvantnim svetom, bodisi v fazi priprave vhodnih podatkov bodisi v fazi pridobivanja rezultatov, ostaja odprt problem, ki ni specifičen za obravnavano tematiko PDE. Branje celotnega nabora amplitud kvantnih stanj je zamudno, zahteva številne ponovitve celotnega algoritma in lahko izniči potencialno pospešitev. Težave s pripravo vhoda oziroma branjem izhoda izginejo, kadar se kvantni algoritem uporabi kot podprogram drugega kvantnega algoritma ali kadar je potreben le reduciran rezultat v smislu pričakovane vrednosti.

5 ZAKLJUČEK

V prispevku smo se osredotočili na podrazred problemov, opisanih s parcialnimi diferencialnimi enačbami, in analizirali njihovo primernost za neposredno preslikavo na sistemski hamiltonian. Osrednja hipoteza je, da je mogoče določene razrede parcialnih diferencialnih enačb bolj naravno in učinkovito simulirati na kvantnih napravah, če jih neposredno preslikamo na sistemski hamiltonian, namesto da bi se zanašali na kvantno reševanje linearnih sistemov in druge pristope, predstavljene v stanju raziskav na tem področju. Pri simulaciji časovnega razvoja kodiranega systemskega hamiltoniana se izognemo uporabi algoritma HHL. Menimo, da izločitev algoritma HHL prinaša prednosti, saj ta stremi k univerzalnosti, ki jo je v kvantnem svetu težje doseči kot v klasičnem.

Ocenjujemo, da obstajajo dobre možnosti za razširitev obstoječega osnovnega pristopa preslikave valovne enačbe na druge kanonične tipe PDE, ki opisujejo različne fizikalne procese. Dotaknili smo se nekaterih specifičnih omejitev kvantnih algoritmov v kontekstu treh tipov enačb ter simulacije hamiltoniana, potrebne za časovni razvoj kodiranega problema.

Predstavljeni odprti problemi in možnosti njihovega reševanja izhajajo iz želje po nadgradnji osnovnih

konceptov kvantnega reševanja PDE v obliko, ki bo omogočala obravnavo realnih problemov v smislu podpore kompleksnim robnim pogojem, heterogenim materialom računskih domen in dinamiki, ki ne ohranja energije simuliranega problema.

ZAHVALA

Raziskavo je omogočila Javna agencija za znanstveno-raziskovalno in inovacijsko dejavnost Republike Slovenije v okviru programa P2-0016 Komunikacijska omrežja in storitve.

LITERATURA

- [1] R. P. Feynman, "Simulating physics with computers," *Int. J. Theor. Phys.*, zv. 21, št. 6, str. 467–488, 1982. doi: 10.1007/BF02650179
- [2] M. Dyakonov, "The case against: Quantum computing," *IEEE Spectr.*, zv. 56, št. 3, str. 24–29, marec 2019. doi: 10.1109/MSPEC.2019.8651931
- [3] G. Tosti Balducci, B. Chen, M. Möller, M. Gerritsma, in R. De Breuker, "Review and perspectives in quantum computing for partial differential equations in structural mechanics," *Front. Mech. Eng.*, zv. 8, 2022. doi: 10.3389/fmech.2022.914241
- [4] A. Pesah, "Quantum algorithms for solving partial differential equations," *University College London, London, UK*, 2020.
- [5] P. C. S. Costa, S. Jordan, in A. Ostrander, "Quantum algorithm for simulating the wave equation," *Phys. Rev. A*, zv. 99, p. 012323, januar 2019. doi: 10.1103/PhysRevA.99.012323
- [6] A. Suau, G. Staffellbach, in H. Calandra, "Practical quantum computing: Solving the wave equation using a quantum approach," *ACM Trans. Quantum Comput.*, zv. 2, št. 1, februar 2021. doi: 10.1145/3430030
- [7] R. Novak, "Quantum algorithm for solving the wave equation on a hexagonal grid," *IEEE Access*, zv. 12, str. 131 009–131 022, 2024. doi: 10.1109/ACCESS.2024.3459471
- [8] S. Jin, N. Liu, in Y. Yu, "Quantum simulation of partial differential equations via Schrödingerization," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 133, p. 230602, december 2024. doi: 10.1103/PhysRevLett.133.230602
- [9] J. Hu, S. Jin, in L. Zhang, "Quantum algorithms for multiscale partial differential equations," *Multiscale Model. Simul.*, zv. 22, št. 3, str. 1030–1067, 2024. doi: 10.1137/23M1566340
- [10] J. Hu, S. Jin, N. Liu, in L. Zhang, "Quantum circuits for partial differential equations via Schrödingerisation," *Quantum*, zv. 8, p. 1563, december 2024. doi: 10.22331/q-2024-12-12-1563
- [11] D. An, J.-P. Liu, in L. Lin, "Linear combination of Hamiltonian simulation for nonunitary dynamics with optimal state preparation cost," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 131, p. 150603, oktober 2023. doi: 10.1103/PhysRevLett.131.150603
- [12] Y. Sato, H. Tezuka, R. Kondo, in N. Yamamoto, "Quantum algorithm for partial differential equations of nonconservative systems with spatially varying parameters," *Phys. Rev. Appl.*, zv. 23, p. 014063, januar 2025. doi: 10.1103/PhysRevApplied.23.014063
- [13] A. W. Harrow, A. Hassidim, in S. Lloyd, "Quantum algorithm for linear systems of equations," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 103, p. 150502, oktober 2009. doi: 10.1103/PhysRevLett.103.150502
- [14] B. Daribayev, A. Mukhanbet, in T. Imankulov, "Implementation of the HHL algorithm for solving the Poisson equation on quantum simulators," *Appl. Sci.*, zv. 13, št. 20, 2023. doi: 10.3390/app132011491
- [15] Y. Cao, A. Papageorgiou, I. Petras, J. Traub, in S. Kais, "Quantum algorithm and circuit design solving the Poisson equation," *New J. Phys.*, zv. 15, št. 1, p. 013021, januar 2013. doi: 10.1088/1367-2630/15/1/013021
- [16] A. Klappenecker in M. Roetteler, "Discrete cosine transforms on quantum computers," 2001. doi: 10.48550/arXiv.quant-ph/0111038

- [17] S. Wang, Z. Wang, W. Li, L. Fan, G. Cui, Z. Wei, in Y. Gu, "Quantum circuits design for evaluating transcendental functions based on a function-value binary expansion method," *Quantum Inf. Process.*, zv. 19, september 2020. doi: 10.1007/s11128-020-02855-7
- [18] S. Wang, Z. Wang, W. Li, L. Fan, Z. Wei, in Y. Gu, "Quantum fast Poisson solver: The algorithm and complete and modular circuit design," *Quantum Inf. Process.*, zv. 19, april 2020. doi: 10.1007/s11128-020-02669-7
- [19] M. Bagherimehrab, K. Nakaji, N. Wiebe, G. K. Brennen, B. C. Sanders, in A. Aspuru-Guzik, "Fast quantum algorithm for differential equations," 2025. doi: https://arxiv.org/abs/2306.11802
- [20] A. M. Childs, J.-P. Liu, in A. Ostrander, "High-precision quantum algorithms for partial differential equations," *Quantum*, zv. 5, p. 574, november 2021. doi: 10.22331/q-2021-11-10-574
- [21] N. Linden, A. Montanaro, in C. Shao, "Quantum vs. classical algorithms for solving the heat equation," *Commun. Math. Phys.*, zv. 395, str. 601–641, avgust 2022. doi: 10.1007/s00220-022-04442-6
- [22] B. D. Clader, B. C. Jacobs, in C. R. Sprouse, "Preconditioned quantum linear system algorithm," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 110, p. 250504, junij 2013. doi: 10.1103/PhysRevLett.110.250504
- [23] M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cincio, in P. J. Coles, "Variational quantum algorithms," *Nat. Rev. Phys.*, zv. 3, št. 9, str. 625–644, september 2021. doi: 10.1038/s42254-021-00348-9
- [24] J. Preskill, "Quantum Computing in the NISQ era and beyond," *Quantum*, zv. 2, p. 79, avgust 2018. doi: 10.22331/q-2018-08-06-79
- [25] H.-L. Liu, Y.-S. Wu, L.-C. Wan, S.-J. Pan, S.-J. Qin, F. Gao, in Q.-Y. Wen, "Variational quantum algorithm for the Poisson equation," *Phys. Rev. A*, zv. 104, p. 022418, avgust 2021. doi: 10.1103/PhysRevA.104.022418
- [26] S. Hadfield, Z. Wang, B. O'Gorman, E. G. Rieffel, D. Venturelli, in R. Biswas, "From the quantum approximate optimization algorithm to a quantum alternating operator ansatz," *Algorithms*, zv. 12, št. 2, 2019. doi: 10.3390/a12020034
- [27] Y. Sato, R. Kondo, S. Koide, H. Takamatsu, in N. Imoto, "Variational quantum algorithm based on the minimum potential energy for solving the Poisson equation," *Phys. Rev. A*, zv. 104, p. 052409, november 2021. doi: 10.1103/PhysRevA.104.052409
- [28] M. Ali in M. Kabel, "Performance study of variational quantum algorithms for solving the Poisson equation on a quantum computer," *Phys. Rev. A*, zv. 20, št. 1, julij 2023. doi: 10.1103/physrevapplied.20.014054
- [29] M. Born in V. Fock, "Beweis des adiabatsatzes," *Zeitschrift für Physik*, zv. 51, št. 3, str. 165–180, 1928. doi: 10.1007/BF01343193
- [30] T. Kato, "On the adiabatic theorem of quantum mechanics," *J. Phys. Soc. Jpn.*, zv. 5, št. 6, str. 435–439, 1950. doi: 10.1143/JPSJ.5.435
- [31] A. Lucas, "Ising formulations of many NP problems," *Front. Phys.*, zv. 2, str. 1–15, 2014. doi: 10.3389/fphy.2014.00005
- [32] C. C. McGeoch, "Theory versus practice in annealing-based quantum computing," *Theor. Comput. Sci.*, zv. 816, št. C, str. 169–183, maj 2020. doi: 10.1016/j.tcs.2020.01.024
- [33] S. Srivastava in V. Sundararaghavan, "Box algorithm for the solution of differential equations on a quantum annealer," *Phys. Rev. A*, zv. 99, p. 052355, maj 2019. doi: 10.1103/PhysRevA.99.052355
- [34] G. G. Pollachini, J. P. L. C. Salazar, C. B. D. Góes, T. O. Maciel, in E. I. Duzzioni, "Hybrid classical-quantum approach to solve the heat equation using quantum annealers," *Phys. Rev. A*, zv. 104, p. 032426, september 2021. doi: 10.1103/PhysRevA.104.032426
- [35] C. C. McGeoch, R. Harris, S. P. Reinhardt, in P. I. Bunyk, "Practical annealing-based quantum computing," *Computer*, zv. 52, št. 6, str. 38–46, 2019. doi: 10.1109/MC.2019.2908836
- [36] A. Farghadan, M. M. Masteri Farahani, in M. Akbari, "A fast quantum algorithm for solving partial differential equations," *Sci Rep.*, zv. 15, p. 5317, februar 2025. doi: 10.1038/s41598-025-89302-8
- [37] B. Zanger, C. B. Mendl, M. Schulz, in M. Schreiber, "Quantum algorithms for solving ordinary differential equations via classical integration methods," *Quantum*, zv. 5, p. 502, julij 2021. doi: 10.22331/q-2021-07-13-502
- [38] S. Wang, Z. Wang, G. Cui, S. Shi, R. Shang, J. Li, W. Li, Z. Wei, in Y. Gu, "Quantum Poisson solver without arithmetic," *IMTS*, zv. 2, št. 3, p. 15, februar 2024. doi: 10.1007/s44295-023-00020-1
- [39] F. Gaitan, "Finding solutions of the Navier-Stokes equations through quantum computing - Recent progress, a generalization, and next steps forward," *Adv. Quantum Technol.*, zv. 4, št. 10, p. 2100055, 2021. doi: 10.1002/qute.202100055
- [40] F. Oz, O. San, in K. Kara, "An efficient quantum partial differential equation solver with Chebyshev points," *Sci Rep.*, zv. 13, št. 1, p. 7767, maj 2023. doi: 10.1038/s41598-023-34966-3
- [41] G. Brassard, P. Høyer, M. Mosca, in A. Tapp, "Quantum amplitude amplification and estimation," *Contemp. Math.*, zv. 305, str. 53–74, 2002. doi: 10.1090/conm/305/05215
- [42] L. Hantzko, L. Binkowski, in S. Gupta, "Tensorized Pauli decomposition algorithm," 2023. doi: 10.48550/arXiv.2310.13421
- [43] H. F. Trotter, "On the product of semi-groups of operators," *Proc. Am. Math. Soc.*, zv. 10, št. 4, str. 545–551, 1959. doi: 10.2307/2033649
- [44] D. W. Berry, G. Ahokas, R. Cleve, in B. C. Sanders, "Efficient quantum algorithms for simulating sparse Hamiltonians," *Commun. Math. Phys.*, zv. 270, št. 2, str. 359–371, marec 2007. doi: 10.1007/s00220-006-0150-x
- [45] D. W. Berry, A. M. Childs, R. Cleve, R. Kothari, in R. D. Somma, "Simulating Hamiltonian dynamics with a truncated Taylor series," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 114, p. 090502, marec 2015. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.090502
- [46] G. H. Low in I. L. Chuang, "Optimal Hamiltonian simulation by quantum signal processing," *Phys. Rev. Lett.*, zv. 118, p. 010501, januar 2017. doi: 10.1103/PhysRevLett.118.010501
- [47] —, "Hamiltonian simulation by qubitization," *Quantum*, zv. 3, p. 163, julij 2019. doi: 10.22331/q-2019-07-12-163
- [48] B. Commeau, M. Cerezo, Z. Holmes, L. Cincio, P. J. Coles, in A. Sornborger, "Variational Hamiltonian diagonalization for dynamical quantum simulation," 2020. doi: 10.48550/arXiv.2009.02559
- [49] D. W. Berry, A. M. Childs, in R. Kothari, "Hamiltonian simulation with nearly optimal dependence on all parameters," *IEEE 56th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, Berkeley, CA, 2015, str. 792–809. doi: 10.1109/FOCS.2015.54
- [50] C. Wang in L. Wossnig, "A quantum algorithm for simulating non-sparse Hamiltonians," *Quantum Inf. Comput.*, zv. 20, št. 7-8, str. 597–615, 2020. doi: 10.26421/QIC20.7-8-5
- [51] D. W. Berry, A. M. Childs, R. Cleve, R. Kothari, in R. D. Somma, "Exponential improvement in precision for simulating sparse hamiltonians," *Forty-Sixth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. New York, NY: Association for Computing Machinery, 2014, str. 283–292. doi: 10.1145/2591796.2591854
- [52] G. H. Low, R. King, D. W. Berry, Q. Han, A. E. DePrince, A. F. White, R. Babbush, R. D. Somma, in N. C. Rubin, "Fast quantum simulation of electronic structure by spectral amplification," *Phys. Rev. X*, zv. 15, p. 041016, oktober 2025. doi: 10.1103/pb2g-j9cw

Roman Novak je na Odseku za komunikacijske sisteme Inštituta Jožef Stefan zaposlen od leta 1992, v zadnjih letih na mestu višjega znanstvenega sodelavca. V letih 1992 in 1995 je diplomiral in magistriral na Fakulteti za elektrotehniko Univerze v Ljubljani, doktoriral pa je leta 1998 na Fakulteti za računalništvo in informatiko Univerze v Ljubljani. Kot gostujoči znanstvenik je deloval na inštitutu Joanneum Research in Tehniški univerzi v Gradcu. Njegovo preteklo in sedanje raziskovalno delo obsega razvoj telekomunikacijskih omrežij, modeliranje razširjanja radijskih valov in komunikacijskih kanalov, mrežne protokole, informacijsko varnost, obdelavo signalov, kvantne komunikacije in kvantno računalništvo.