微扰量子色动力学中的色荷量子模拟

Herschel A. Chawdhry[1⋆] 和 Mathieu Pellen[2†]

1 牛津大学 Rudolf Peierls 理论物理中心，Clarendon 实验室，Parks Road，牛津，OX1 3PU，英国**2** 弗赖堡阿尔伯特-路德维希大学，物理研究所，Hermann-Herder-Straße 3，D-79104 弗赖堡，德国

⋆ herschel.chawdhry@physics.ox.ac.uk，† mathieu.pellen@physik.uni-freiburg.de

arXiv:2303.04818v2 [hep-ph] 1 Dec 2023

摘要

量子计算机有望大幅加速量子系统的模拟。在这项工作中，我们提出了用于模拟微扰量子色动力学（量子色动力学）中夸克与胶子相互作用之颜色部分的量子门。作为首次应用，我们在模拟的无噪声量子计算机上实现了这些量子电路，并用它们计算了多个费曼图示例的颜色因子。这项工作是迈向微扰量子色动力学中通用散射过程量子模拟的首个关键步骤。

版权所有：H. A. Chawdhry 和 M. Pellen。
本作品依据知识共享署名 4.0 国际许可协议授权。
由 SciPost 基金会出版。

收稿日期 17-03-2023 接收日期
10-11-2023 检查更发布日期 24-11-2(
r
新doi：10.21468/SciPostPhys.15.5.205

目录

1 引言 2

2 方法 3
2.1 说明性示例 3
2.2 幺正化寄存器 6
2.3 相互作用门的构造 9
2.3.1 夸克-胶子相互作用门 Q 10
2.3.2 三胶子相互作用门 G 12

3 结果 13

4 结论 15

A 其他量子门 16

参考文献 17

1 引言

量子计算备受关注，因为它能为从素因数分解 [1] 到无结构搜 [2]索等各种问题提供指数级或多项式级加速。量子计算机的一个自然用途是模拟其他量子系统，在计算化学 [3, 4] 和凝聚态物理 [5,6]领域已有众所周知的应用。

近年来，人们提出了将量子计算机应用于基于晶格的量子场论（QFT）模拟（参见文献 [7,8] 及其中的参考文献），包括模拟量子色动力学（QCD）；量子色动力学是描述夸克和胶子基本相互作用的理论。晶格量子色动力学非常适合研究量子色动力学的低能（亚 GeV）行为，但随着晶格尺寸增大，计算成本会迅速攀升，因此很难用晶格量子色动力学模拟大型强子对撞机（LHC）等高能对撞机所探测的最短长度尺度上的碰撞。在这些能量下，量子色动力学耦合常数 α_s 变小，因此微扰计算成为首选方法。

迄今为止，利用量子计算机模拟微扰量子色动力学中的硬散射过程，在很大程度上仍未得到探索。这或许部分是因为微扰量子场论计算与大多数量子模拟的目标不同：大多数量子模拟（包括晶格量子色动力学）旨在获取已知的哈密顿量，并利用它对量子系统进行（幺正）演化；而微扰量子场论计算旨在计算描述指定外态散射的跃迁矩阵（它是厄米的，但并非幺正的），从而研究基本粒子的产生或衰变。

目前仍缺少一种在量子计算机上模拟一般微扰量子色动力学过程的方法，但出于多种原因，这种方法值得开发。首先，微扰量子色动力学计算需要评估许多不可观测中间态的贡献，并以量子相干的方式将这些贡献组合起来；因此，这类计算天然适合利用量子计算机操控量子态叠加的能力。其次，这种能力也意味着，量子模拟可能非常适合对具有高多重数末态的过程进行计算，并完整体现干涉效应。第三，通过利用量子振幅估计等已知量子算法提供的加速，针对一般微扰量子色动力学过程的量子模拟有望提高微扰量子色动力学预测的速度和精度 [9–12]。

本文旨在迈出步伐，推动利用量子计算机模拟一般微扰量子色动力学过程。微扰量子色动力学计算可以通过对费曼图的贡献求和来完成。每一项贡献都可以分解为颜色部分和运动学部分。颜色部分比运动学部分更容易计算；事实上，已有高效程序 [13–18] 可在经典计算机上计算色因子。尽管如此，颜色部分仍然体现了在量子计算机上模拟微扰量子色动力学过程时面临的一些普遍挑战。例如，构成量子计算机的量子门必须始终是幺正的，而描述费曼图各组成部分的费曼规则（无论是颜色部分还是运动学部分）通常并非幺正。这意味着，颜色部分为开发费曼图量子计算框架提供了一个有用的简化起点，因此也是本文的研究重点。

本文的主要结果是两个量子门，Q 和 G，它们分别表示描述夸克-胶子和三胶子相互作用顶点的费曼规则中的颜色部分。为实现这些量子门，我们引入了幺正化寄存器$\mathcal{U}$这一新概念，它使夸克和胶子的非幺正相互作用得以模拟。[1] 作为

[1]尽管如今使用辅助量子比特来保证幺正性已是成熟做法，例如分块

使用Q 和 G的一个示例是，我们使用 Qiskit [24] 量子计算框架构建量子电路，以计算各种费曼图的颜色因子。这绝非Q 和 G的唯一应用；例如，它们还可用于模拟夸克和胶子的发射、吸收与交换，无论是在散射振幅中还是在部分子簇射中。这些量子电路也可以成为量子蒙特卡罗程序的组成部分；正如参考文献 [25], 所强调的，该程序可使截面的计算获得二次加速。

最后，我们提及，本文是高能物理中量子技术应用这一更广泛探索的一部分（参见例如已有的综述 [7, 8, 26, 27] 及其中的参考文献）。尽管这方面的探索大多集中于高能物理的实验领域，但近几年也涌现出许多面向高能理论不同课题的应用，包括部分子分布函数（部分子分布函数） [28, 29]、振幅 [30–34], 有效场论 [35], 截面计算 [25], 部分子簇射 [30, 36–38], 以及事例生成 [38–40]。

本文结构安排如下：第 2 节首先概述如何利用我们的量子电路计算简单费曼图的颜色因子（见第 2.1节）。第2 节其余部分详细介绍所采用的方法和算法。具体而言，第 2.2节解释前文提到的幺正化寄存器的工作原理，而第2.3节介绍实现夸克和胶子相互作用的量子电路。在第3节中，我们将方法推广至模拟更复杂的过程，并通过使用模拟的无噪声量子计算机计算各种费曼图的颜色因子来验证这些方法。最后，第 4 节总结我们的发现并给出结语。附录 A介绍了若干与计算迹相关的其他量子门。

2 方法

2.1 说明性示例

本文的主要成果是两个量子门，Q 和 G，它们分别模拟夸克-胶子顶点的色因子 $T_{a\,ij}$和三胶子顶点的 f_{abc}。我们将在第 Q 和 G 节介绍它们的具体构造方法，即第 2.3节。如第 3节所述，这些量子门可用于计算任意费曼图的颜色因子。本节将通过计算图 1左侧所示的简单费曼图的颜色因子，说明我们的方法如何发挥作用。

一般而言，任何涉及夸克-胶子或胶子-胶子相互作用的费曼图都携带来自量子色动力学 SU(3)对称群的色荷信息。将图平方以求得截面时，必须进行色代数运算，从而得到所谓的色因子。每个夸克-胶子顶点对应一个生成元T^a，每个三胶子顶点对应一个结构常数f^{abc}。[2] 在当前示例中，颜色因子为

$$C = \sum_{\substack{a\in\{1,\ldots,8\}\\ i,j,k\in\{1,2,3\}}} T^a_{ij} T^a_{jk} \delta_{ik}\,, \tag{1}$$

其中

$$T^a = \frac{1}{2}\lambda^a\,, \tag{2}$$

编码 [19–22] 或 量子比特化 [23], 据我们所知，我们的实现是原创的，其优点是只需少量辅助量子比特，便可依次执行多个相互独立的非幺正操作，详见第 2.2 节。[2]关于色代数的更多参考资料和信息，可参见参考文献 [41, 42]。

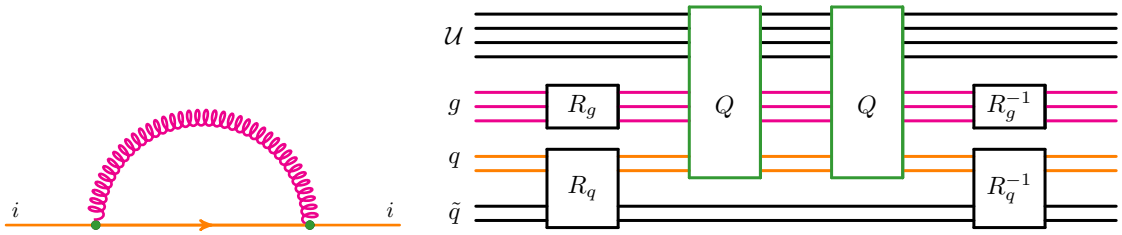


图1：费曼图示例（左）及其对应电路的图示表示（右）。

而 λ^a 是盖尔曼矩阵：

$$\lambda^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\lambda^4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$
$$\lambda^7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

这个颜色因子可通过图1右侧所示的量子电路计算，其工作原理将在下文解释。该电路包含若干量子比特，我们将它们组合成称为寄存器的若干组。每个寄存器 r 初始时处于某个参考态 $|\Omega\rangle_r$.[3]在这个特定示例中，有一个标记为 g 的胶子寄存器，以及一对标记为 q 和 ˜q 的夸克寄存器。一般而言，费曼图中的每个胶子都对应一个胶子寄存器，图中的每条夸克线都对应一对夸克寄存器。我们将看到，q寄存器的态会因模拟胶子的发射和吸收而改变，而 ˜q 寄存器则不受影响，仅用于实现方程 (1) 中的 δ_{ik} 项。每个夸克寄存器由 2 个量子比特构成，其态 $|00\rangle$ 、$|01\rangle$ 、$|10\rangle$ 表示 $N_c = 3$ 种夸克颜色$|1\rangle$ 、$|2\rangle$ 、$|3\rangle$ ，而态 $|11\rangle$ 未使用。胶子寄存器由 3 个量子比特构成，其 8 个态 $|000\rangle$ 、$|001\rangle$ 、.....、$|111\rangle$ 表示胶子的 N^2c 种颜色 $-1 = 8$ $|1\rangle$ 、$|2\rangle$ 、.....、$|8\rangle$ 。此外，还有一个标记为 $\mathcal{U}$ 的幺正化寄存器，其用途将在第 2.2 节说明。因此，电路的初始态为 $|\Omega\rangle_g |\Omega\rangle_q |\Omega\rangle_{\tilde{q}} |\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$。

首先，将门 R_g 应用于胶子寄存器，使其处于色态的等幅叠加态中。关于 R_g 的详细定义将在附录 A 中给出，其作用如下：

$$R_g |\Omega\rangle_g = \sum_{a=1}^{8} \frac{1}{\sqrt{8}} |a\rangle_g . \tag{4}$$

该门 R_q （其定义也将在附录A中给出）现在应用于夸克寄存器，且
接下来
ing 效应：

$$R_q |\Omega\rangle_q |\Omega\rangle_{\tilde{q}} = \sum_{k=1}^{3} \frac{1}{\sqrt{3}} |k\rangle_q |k\rangle_{\tilde{q}} . \tag{5}$$

[3]在实际操作中，在本研究中我们始终选择 $|\Omega\rangle_r$ 为这样一种态：r 中的每个量子比特都处于态 $|0\rangle$ 。

因此，应用R_g和R_q量子门后，量子计算机处于以下态

$$\frac{1}{\sqrt{24}}\sum_{a=1}^{8}\sum_{k=1}^{3}|a\rangle_g|k\rangle_q|k\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}\,. \tag{6}$$

接下来，Q门作用于g和q寄存器。Q表示夸克-胶子相互作用，其设计方式（见第2.3.1节）满足：对于胶子颜色基态$|a\rangle_g$和夸克颜色基态$|k\rangle_q$，其中$a\in\{1,\ldots,8\}$且$k\in\{1,2,3\}$，下式成立：

$$Q|a\rangle_g|k\rangle_q|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}=\sum_{j=1}^{3}T^a_{jk}|a\rangle_g|j\rangle_q|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}+(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_{\mathcal{U}})\,. \tag{7}$$

注意，Q不作用于$\tilde{q}$寄存器。量子门的线性确保了Q能够正确地模拟夸克-胶子相互作用，即使夸克寄存器或胶子寄存器处于颜色基态的叠加态，或与其他寄存器发生纠缠。因此，在应用一次Q门后，量子计算机处于以下状态

$$\frac{1}{\sqrt{24}}\sum_{\substack{a\in\{1,\ldots,8\}\\ j,k\in\{1,2,3\}}}T^a_{jk}|a\rangle_g|j\rangle_q|k\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}+(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_{\mathcal{U}})\,. \tag{8}$$

Q门现在第二次作用于g和q寄存器，以模拟第二个夸克-胶子顶点。此时量子计算机处于以下状态

$$\frac{1}{\sqrt{24}}\sum_{\substack{a\in\{1,\ldots,8\}\\ i,j,k\in\{1,2,3\}}}T^a_{ij}T^a_{jk}|a\rangle_g|i\rangle_q|k\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}+(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_{\mathcal{U}})\,. \tag{9}$$

由于R_g是幺正的，通过对方程（4）求逆可知，R_g^{-1}作用于胶子寄存器的任意态$\sum_{a=1}^{8}c_a|a\rangle_g$时，将产生以下态

$$R_g^{-1}\sum_{a=1}^{8}c_a|a\rangle_g=\left(\frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{a=1}^{8}c_a\right)|\Omega\rangle_g+\left(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_g\right). \tag{10}$$

同样，通过对方程（5）求逆可知，R_q^{-1}作用于q和$\tilde{q}$寄存器的任意态$\sum_{i,k\in\{1,2,3\}}c_{ik}|i\rangle_q|k\rangle_{\tilde{q}}$时，将产生以下态

$$R_q^{-1}\sum_{i,k\in\{1,2,3\}}c_{ik}|i\rangle_q|k\rangle_{\tilde{q}}=\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\sum_{i=1}^{3}c_{ii}\right)|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}+\left(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}\right). \tag{11}$$

因此，取方程（9）中产生的态，并作用量子门R_g^{-1}和R_q^{-1}后，量子电路的态变为

$$\frac{1}{24}\left(\sum_{\substack{a\in\{1,\ldots,8\}\\ i,j\in\{1,2,3\}}}T^a_{ij}T^a_{ji}\right)|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}+\left(\text{terms orthogonal to }|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}\right). \tag{12}$$

因此，在量子电路的最终量子态（12）中，待计算的色迹（1）被编码在参考态$|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$的系数中。正如我们接下来将要讨论的，这一电路既可以作为高层算法的一部分，也可以直接提取输出态（12）中的信息。

验证这一结果的一种简单方法是对该电路进行多次独立运行：每次运行后，测量所有寄存器的最终态，然后将其重置为初始态$|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$。随后，可以统计最终态被测量为 $|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$的运行次数，并将其与方程 (12) 的预测进行比较。该方程预测，在每次运行中，最终态的测量结果为 $|\Omega\rangle_g|\Omega\rangle_q|\Omega\rangle_{\tilde{q}}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$的概率为 $\frac{\mathcal{C}^2}{24^2}$，其中$\mathcal{C}$ 在方程 (1) 中定义。[4] 我们注意到，尽管这一测量策略相对容易理解，但这里只是将其作为一种直观的方式，用于验证量子态 (12) 是否被正确制备。对于研究、测量和利用量子态，还存在更先进的方法。例如，可以采用量子振幅估计 [9–12] ，从而实现速度上的二次提升。或者，为了超越单个费曼图的颜色因子计算，可以将电路的输出 (12) 直接用作未来算法的一个组成部分，例如计算运动学因子并对费曼图求和的算法，或执行蒙特卡洛积分以计算截面的算法。

虽然这个简单的费曼图示例并不需要它，但我们还是要说明，除了上面使用的Q 门之外，我们还设计了一个表示三胶子相互作用的门 G 。关于 G 的详细定义将在第2.3.2节给出，但现在我们只需指出，与方程（7）类似，G 被设计为作用于 3 个胶子寄存器（g_1, g_2,和 g_3），并且 $\mathcal{U}$ 使得

$$G|a\rangle_{g_1}|b\rangle_{g_2}|c\rangle_{g_3}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}} = f^{abc}|a\rangle_{g_1}|b\rangle_{g_2}|c\rangle_{g_3}|\Omega\rangle_{\mathcal{U}} + (\text{terms orthogonal to } |\Omega\rangle_{\mathcal{U}}) , \tag{13}$$

其中 f^{abc} 是上文提到的 SU(3)结构常数。请注意，为避免人为地区分“发射出的”胶子和“发射者”胶子，我们为三胶子顶点处的 3 个胶子分别设置了独立寄存器，因此方程（13）中的 G 门只会将振幅（投影到 $|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$）按 f_{abc}缩放，而不会旋转胶子色态。相比之下，q寄存器表示一整条夸克线，其态（投影到 $|\Omega\rangle_{\mathcal{U}}$）会在每次相互作用时被$Q$门旋转。还需注意，我们没有为四胶子顶点构造专门的门，因为该顶点可以分解为三胶子顶点乘积的线性组合，每个乘积都具有独立的运动学系数。

至此，我们完成了色迹计算的示例。在第3节中，我们将把这一方法推广到更复杂过程的色迹计算。不过，在此之前，我们将说明此前暂未讨论的细节：在第2.2 节中，我们将介绍幺正化寄存器的用途及其运作方式 $\mathcal{U}$，并在第2.3 节中，给出Q 和G 门的具体构造。

2.2 幺正化寄存器

为了模拟微扰量子色动力学过程，我们希望为这 8 个线性算子构造量子门

$$|j\rangle_q \to \sum_i T^a_{ij}|i\rangle_q , \tag{14}$$

以及（对角）线性算子

$$|a\rangle_{g_1}|b\rangle_{g_2}|c\rangle_{g_3} \to f^{abc}|a\rangle_{g_1}|b\rangle_{g_2}|c\rangle_{g_3} , \tag{15}$$

其中 q 是夸克寄存器，而 g_1,g_2, g_3 是胶子寄存器。然而，量子门只能针对幺正算符构造。当且仅当线性算符的矩阵表示的各行正交归一时，该线性算符才是幺正的。式（14）和（15）的矩阵表示

[4]这种验证无法提供迹的复相位信息，但可以通过改为实施广为人知的哈达玛测试来获得该信息 [43]。

由彼此正交但不一定具有单位范数的行组成；[5] 事实上，许多行为零。在本节中，我们将介绍一种规避这一问题的方法。

设 L 是作用于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_1$上的线性算符。若 L 是非幺正的，则无法将其实现为量子电路。方程（3）中的盖尔曼矩阵就是此类非幺正操作的例子。不过，我们仍可能定义一个作用于更大希尔伯特空间 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_\mathcal{U}$ 上的酉算符 $\hat{L}$，使得对于某个态 $|\Omega\rangle_\mathcal{U} \in \mathcal{H}_\mathcal{U}$ 以及任意态$|\chi_1\rangle$，$|\chi_2\rangle \in \mathcal{H}_1$均满足以下方程：

$$\langle\Omega|_\mathcal{U} \langle\chi_2|\hat{L}|\chi_1\rangle |\Omega\rangle_\mathcal{U} = \langle\chi_2|L|\chi_1\rangle \,. \tag{16}$$

显然，实现方程（16）有许多种方式，各有不同优点。在本研究中，我们寻求一种方法：首先允许多个彼此独立的非幺正操作依次执行；其次使 $\mathcal{H}_\mathcal{U}$的规模保持较小；第三，无需中间测量即可保持量子相干性，从而使这些量子电路能够用作高层算法的构件。具体而言，无论费曼图有多复杂，我们都引入一个额外的寄存器 $\mathcal{U}$，其规模较小：它包含 $\mathrm{N}_\mathcal{U} = \lceil \log_2(\mathrm{N}_V + 1) \rceil$ 个量子比特，其中 N_V 是费曼图中的顶点数。更一般地说，N_V 表示待执行的非幺正操作数。我们将$\mathcal{U}$称为幺正化寄存器，并将其 $2^{N_\mathcal{U}}$基态记为 $|\mathrm{k}\rangle_\mathcal{U}$，其中 $\mathrm{k} \in \{0, \ldots, 2^{N_\mathcal{U}} - 1\}$。本节稍后将定义两个门 A 和 B($\alpha$)，其中 $\alpha \in \mathbb{C}$ 和 $|\alpha|^2 \leq 1$，它们旨在按以下方式作用于 $\mathcal{U}$：

$$B(\alpha)A|k\rangle = \begin{cases} \alpha|0\rangle + \sqrt{1-|\alpha|^2}\,|1\rangle \,, & \text{if } k = 0 \,, \\ |k+1\rangle \,, & \text{if } 0 < k < 2^{N_\mathcal{U}} - 1 \,, \\ \sqrt{1-|\alpha|^2}\,|0\rangle - \alpha|1\rangle \,, & \text{if } k = 2^{N_\mathcal{U}} - 1 \,. \end{cases} \tag{17}$$

态 $|0\rangle_\mathcal{U}$ 具有特殊性质，我们也将其记作 $|\Omega\rangle_\mathcal{U}$。方程（17）表明了两个关键性质：首先，

$$\langle\Omega|_\mathcal{U} B(\alpha)A|\Omega\rangle_\mathcal{U} = \alpha \,, \tag{18}$$

其次，我们可以反复应用A 门和B 门[6]，最多应用 $2^{N_\mathcal{U}} - 1$ 次，从而得到

$$\langle\Omega|_\mathcal{U} \prod_{i=1}^{N_{ops}} \{B(\alpha_i)A\} |\Omega\rangle_\mathcal{U} = \prod_{i=1}^{N_{ops}} \alpha_i \,, \tag{19}$$

其中，操作次数$N_{ops} \leq 2^{N_\mathcal{U}} - 1$。

给定算符 L，我们实现满足方程 (16) 的算符 $\hat{\mathrm{L}}$ 的一般策略包含两个步骤。第一步是对 $\mathcal{H}_1$ 施加一个幺正算符，该算符的各行与 L 的对应行仅相差一个（依赖于行的）归一化因子。第二步是以一种受控方式对$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_\mathcal{U}$ 施加 A 和 B(α) 门的[7] 版本；根据方程 (18)，这样便能修正归一化的变化。[8] 方程 (16) 可直接由这两个步骤得出。若要应用一系列非幺正操作，只需重复这两个步骤。一般而言，这会使 $\mathcal{U}$ 处于多个态的叠加态中，其中与 $|\Omega\rangle_\mathcal{U}$ 成比例的分量包含了我们感兴趣的信息，这是由方程 (16) 所保证的。由于作用于$\mathcal{H}_1$ 的步骤不会影响 $\mathcal{U}$，而作用于 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_\mathcal{U}$的步骤根据方程 (17) 至多使 $\mathcal{U}$ 的态递增 1，且只要 $\mathrm{k} < 2^{N_\mathcal{U}} - 1$，就不会使其递减，因此可以看出

[5]对后文很有帮助的是，方程（12）中的因子确保所有行的范数均为 ≤ 1。[6]事实证明，$B(0) = \mathbb{1}$，因此将 A 门与 $B(\alpha)$ 门分开，就可以在 $B(\alpha)$ 门满足 $\alpha = 0$ 时将其省略。[7]稍后将对此作出解释。[8]通过应用适当的旋转，我们的方法可以扩展到 L 的各行不再彼此正交的情形，但这超出了本文的讨论范围。

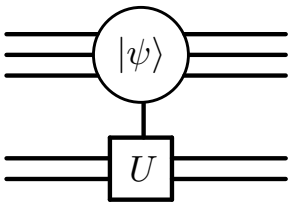


图2：图示 $|\psi\rangle$ -控制-U 门$C_{|\psi\rangle}[U]$ 的定义见方程（20）。此处， $|\psi\rangle$ 是上方寄存器的任意指定态，而U 是定义在下方寄存器希尔伯特空间上的任意算符。

这两个步骤最多可以重复 $2^{N_{\mathcal{U}}}-1$ 次，之后幺正化寄存器就会溢出。因此，正如所期望的，所需的 $\mathcal{U}$ 规模很小：它与我们希望执行的连续非幺正操作次数呈对数关系。此外，我们的幺正化策略保留了非幺正操作所产生态的量子相干性，因此本文中的量子电路可以用作高层算法的构建模块。方程 (16) 对方程 (14) 和 (15) 中线性算符的具体实现留待第 2.3 节讨论。本节余下部分将介绍受控量子门的记号，并给出 A 和 $B(\alpha)$ 门的明确定义。

为方便起见，我们先定义一些关于受控量子门的符号，这些符号将在本节和下一节中使用。对于任意量子门，其受控版本可粗略理解为：当一个或多个其他寄存器（称为控制寄存器）处于某个指定态时，将该量子门作用于一个寄存器（称为目标寄存器）。例如，正如我们将在第2.3.1节中看到的，Q 门通过施加一个旋转来实现夸克-胶子相互作用，该旋转作用于夸克寄存器，而旋转的选择由胶子寄存器的态控制。更确切地说，设U （不要与$\mathcal{U}$混淆）是作用于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_{\text{trgt}}$ 上的任意量子门，并设 $|\psi\rangle$ 是另一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}_{\text{ctrl}}$中的归一化态。于是，我们将作用于希尔伯特空间 $|\psi\rangle$ -控制-U 门$C_{|\psi\rangle}[U]$ 的定义如下：

$$C_{|\psi\rangle}[U] = |\psi\rangle\langle\psi| \otimes U + \left(\mathbb{1}_{\mathcal{H}_{\text{ctrl}}} - |\psi\rangle\langle\psi|\right) \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{H}_{\text{trgt}}} . \tag{20}$$

这里 $\mathbb{1}_{\mathcal{H}_i}$ 是作用于希尔伯特空间 $\mathcal{H}_i$上的恒等算符。在方程（20）中，我们将由 $\mathcal{H}_{\text{ctrl}}$ 表示的量子比特称为控制量子比特，将由$\mathcal{H}_{\text{trgt}}$ 表示的量子比特称为目标量子比特。方程（20）特别意味着，对于任意态 $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{trgt}}$,

$$C_{|\psi\rangle}[U]\{|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle\} = |\psi\rangle \otimes U|\phi\rangle , \tag{21}$$

并且，对于任何满足 $\langle\psi'|\psi\rangle = 0$ 的态 $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}_{\text{ctrl}}$,

$$C_{|\psi\rangle}[U]\{|\psi'\rangle \otimes |\phi\rangle\} = |\psi'\rangle \otimes |\phi\rangle . \tag{22}$$

本文中，任意受控门 $C_{|\psi\rangle}[U]$ 均按图 2所示方式绘制。在我们的 Qiskit 程序中，我们使用了函数 `qiskit.extensions.UnitaryGate.control` 来实现方程（20）。

现在我们来定义众所周知的递增算符（例如参见 [44,45]），记作 A，其示意图见图 3。形式上，该门可定义如下。令 X 为泡利X 单量子比特门：

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{23}$$

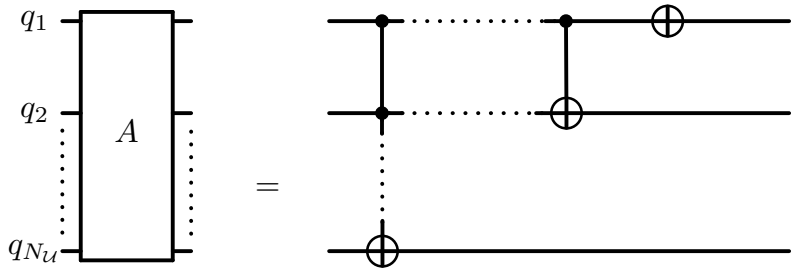


图3：算符A的电路图示，该算符会递增幺正化寄存器 $\mathcal{U}$。这里，$\bigoplus$表示泡利X门，而 $|q_1\rangle$ ，. . . , $|q_{N_\mathcal{U}}\rangle$ 是构成 $\mathcal{U}$ 的量子比特。

令 X_n 为门 $C|1\ldots1\rangle[X]$，作用于幺正化寄存器的前 n 个量子比特，其中$_{n-1}$个量子比特（第 1 个至第 $n-1$ 个）作为控制量子比特，而量子比特 n 作为目标量子比特。令 A_1 为作用于量子比特 1 的泡利X门，并递归定义[9]，对于 $n>1$:

$$A_n = A_{n-1}X_n\,. \tag{24}$$

对于含有$N_\mathcal{U}$个量子比特的幺正化寄存器，现在可以将图3 中的递增算符形式化定义为$A = A^{N_\mathcal{U}}$。将幺正化寄存器的每个基态解释为数值 $|k=\sum_{i=1}^{N_\mathcal{U}} u_i 2^{i-1}\rangle$ 的二进制表示，其中$u_n \in \{0,1\}$ 是n^{th} 量子比特的态，可以验证

$$A|k\rangle_\mathcal{U} = |k+1 \pmod{2^{N_\mathcal{U}}}\rangle_\mathcal{U}\,, \quad \forall k\,. \tag{25}$$

在本文中，应假定A始终作用于幺正化寄存器。

接下来定义一个单量子比特门

$$B_1(\alpha) = \begin{pmatrix} \sqrt{1-|\alpha|^2} & \alpha \\ -\alpha & \sqrt{1-|\alpha|^2} \end{pmatrix}, \tag{26}$$

应理解为始终作用于幺正化寄存器的量子比特 1。

现在我们将部分递减算符 $B(\alpha)$定义如下:

$$B(\alpha) = C_{\underbrace{|0\ldots0\rangle}_{N_\mathcal{U}-1}}[B_1(\alpha)], \tag{27}$$

应将其理解为作用于幺正化寄存器：第 2 至 $N_\mathcal{U}$个量子比特作为控制量子比特，第 1 个量子比特作为目标量子比特，如图 4所示。方程（17）中所示 A和 $B(\alpha)$ 量子门的预期行为可由方程（25–27）立即得出。

关于幺正化寄存器 $\mathcal{U}$ 以及 A和 $B(\alpha)$ 量子门的说明到此结束。现在我们将继续使用它们来实现方程（16），用于夸克-胶子（14）和三胶子（15）相互作用。

2.3 相互作用量子门的构造

本节将详细介绍Q 门和G 门的构造，它们分别用于模拟夸克-胶子相互作用和三胶子相互作用。如前所述，使用双量子比特寄存器来表示夸克的$N_c = 3$ 个色态，分别为 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 。请注意，

[9] 有时会遇到 [45] 另一种（但等价的）递归定义，其中涉及一个受控 d-A_{n-1} 门，但我们选择不在此采用这种定义。

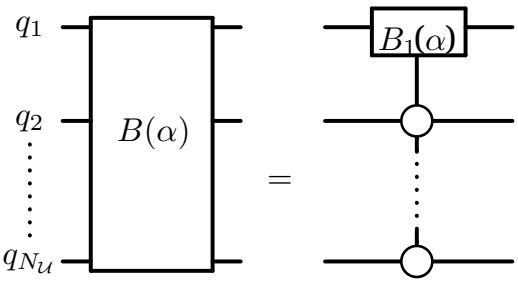


图4：部分递减算符电路的图形表示$B(\alpha)$在方程（27）中形式化定义。

$|11\rangle$ 态在每个夸克寄存器中都未被使用：所有作用于夸克寄存器的算符 $\mathcal{O}$ 都满足 $\langle 11|\mathcal{O}|11\rangle = 1$，这意味着表示 $\mathcal{O}$ 的 4×4 矩阵的最后一行和最后一列均为 $(0 \quad 0 \quad 0 \quad 1)$，从而确保寄存器不会进入 $|11\rangle$ 态。为简洁起见，将这些算符表示为矩阵时，我们省略第四行和第四列。

2.3.1 夸克-胶子相互作用门 Q

我们希望构造一个量子门Q，以实现夸克-胶子相互作用。该相互作用由方程（14）中所示的非幺正算符描述。因此，我们希望通过为其构造合适的 $\hat{L}$ 来将其幺正化——见方程（16）——。遵循第 2.2 节中解释的一般策略，我们首先定义以下幺正矩阵λ_a：

$$\begin{aligned}
\overline{\lambda}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \overline{\lambda}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \overline{\lambda}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\
\overline{\lambda}_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \overline{\lambda}_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \overline{\lambda}_6 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\overline{\lambda}_7 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \overline{\lambda}_8 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{28}$$

可以观察到，这些矩阵与方程（3）中的盖尔曼矩阵相似，但经过了调整以使其成为幺正矩阵，从而能够作为作用于三态夸克寄存器的量子门来实现。我们将这些λ_a 量子门组合成一个新门 Λ，以如下方式作用于胶子寄存器g 和夸克寄存器q：

$$\Lambda = \left[\prod_{a=1}^{8} C_{|a\rangle_g}\left[\overline{\lambda}_a\right]\right], \tag{29}$$

其中，g 充当控制寄存器，q 充当目标寄存器，如图 5所示。因此，根据胶子寄存器的色荷 a，Λ 会将门 λ_a 作用于夸克寄存器。

接下来，我们构造夸克-胶子相互作用门Q。该门基于 Λ，但使用A和B 门来处理矩阵 λ_a 与 λ_a之间的差异，以及方程（2）中的因子$\frac{1}{2}$。简而言之，Q 门将使用 $\mathcal{U}$，通过A门使其递增，然后有条件地使用B 门再次使其递减，最后对由此得到的态应用 Λ 门。更正式地说，如图6所示，Q 门定义为作用于以下态

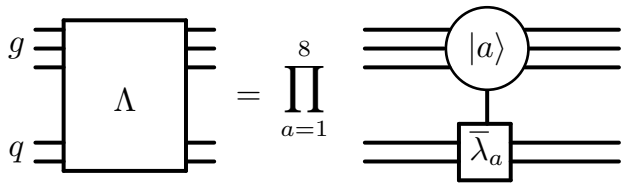


图5：电路的图示，该电路包含 Λ 门，其定义见方程（29）。

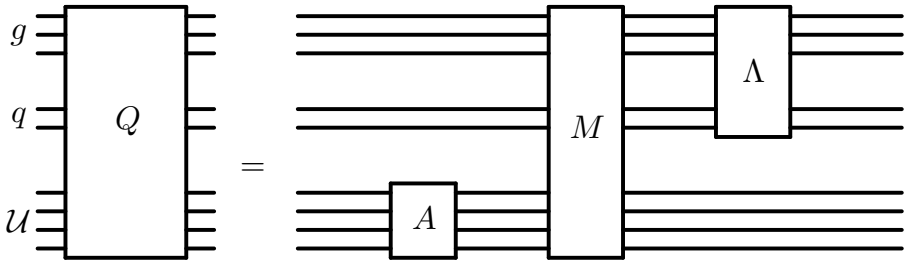


图6：夸克门电路的图示Q ，其定义见方程（30）。

$|\Psi\rangle_{g\otimes q\otimes\mathcal{U}}$任意胶子寄存器$g$、任意夸克寄存器$q$以及酉化寄存器$\mathcal{U}$，其作用方式如下：

$$Q\,|\Psi\rangle_{g\otimes q\otimes\mathcal{U}} = (\Lambda\otimes\mathbb{1}_{\mathcal{U}})\,M(\mathbb{1}_g\otimes\mathbb{1}_q\otimes A)\,|\Psi\rangle_{g\otimes q\otimes\mathcal{U}}\,, \tag{30}$$

其中

$$M = \prod_{a,i\,:\,\mu(a,i)\neq 0} C_{|a\rangle_g|i\rangle_q}\left[B\left(\mu(a,i)\right)\right], \tag{31}$$

and

$$\mu(a,i) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{if } \left(\overline{\lambda}_a\right)_{ij} - (\lambda_a)_{ij} = 0, \quad \forall j, \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}, & \text{if } a = 8, \text{ and } i \in \{1,2\}, \\ \frac{-1}{\sqrt{3}}, & \text{if } a = 8, \text{ and } i = 3, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{32}$$

算符M 的图示见图7。

对 λ_a 和 $\mu(a、i)$ 在方程（28）和（32）中的定义经过选择，使得以下方程成立

$$\mu(a,i)\overline{\lambda}_a\,|i\rangle = \frac{1}{2}\lambda_a\,|i\rangle\,, \tag{33}$$

其中， λ_a 在方程 (3) 中定义，因子 1 2 源自方程 (2)。请注意，由于方程 (31) 中的控制态彼此正交，应用 M 不会使 $\mathcal{U}$ 的态递减超过 1。利用方程 (18) 中 $\mathcal{U}$ 的性质以及方程 (29–31) 中 Q、M 和 Λ 的定义，可以看出，若 $|\psi_1\rangle$ = |a〉 $_g$ |k〉 $_q$ |Ω〉 $_\mathcal{U}$ 且 $|\psi_2\rangle$ = |b〉 $_g$ |l〉 $_q$ |Ω〉 $_\mathcal{U}$，则

$$\langle\psi_2|Q|\psi_1\rangle = \langle b|a\rangle\,\langle l|\tfrac{1}{2}\lambda_a|k\rangle\,. \tag{34}$$

方程（7）中展示的Q 所具有的理想性质由此立即可知。因此，在量子计算机上，只需将相应的Q 门序列串联起来，就能模拟胶子沿夸克线发射和吸收的一系列过程。

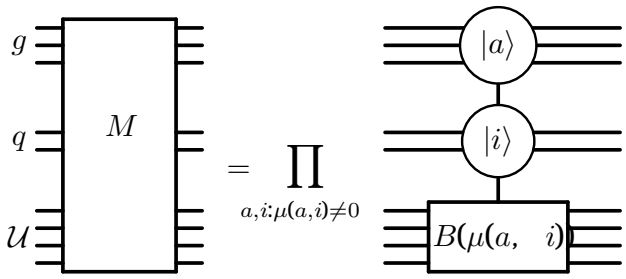


图 7：电路的图示表示，M 算符定义于方程 (31)。

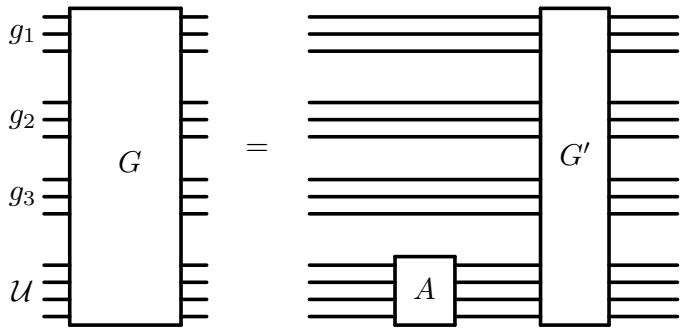


图 8：胶子门 G 定义于方程 (35)。

2.3.2 三胶子相互作用门G

现在我们将介绍用于三胶子相互作用的量子门。该相互作用由方程（15）中展示的非幺正算符描述，因此我们希望通过找到合适的$\hat{}$L 来将其幺正化——参见方程（16）——具体遵循第 2.2节阐述的一般策略。与夸克-胶子算子（14）不同，三胶子算子（15）是对角的，因此其对应的$\hat{}L$ 算符（记作G）仅使用A和受控(α) 门即可构造。

我们将作用于胶子寄存器 $|\Psi\rangle_{g_1\otimes g_2\otimes g_3}\otimes\mathcal{U}$的任意态以及幺正化寄存器 $\mathcal{U}$ 的门 G定义如下：

$$G\,|\Psi\rangle_{g_1\otimes g_2\otimes g_3\otimes\mathcal{U}} = G'A\,|\Psi\rangle_{g_1\otimes g_2\otimes g_3\otimes\mathcal{U}}\,, \tag{35}$$

其中

$$G'\,|\Psi\rangle_{g_1\otimes g_2\otimes g_3\otimes\mathcal{U}} = \left(\prod_{a,b,c\,:\,f^{abc}\neq 0} C_{|a\rangle|b\rangle|c\rangle}\left[B\left(f^{abc}\right)\right]\right)|\Psi\rangle_{g_1\otimes g_2\otimes g_3\otimes\mathcal{U}}\,. \tag{36}$$

量子门 G 和 G' 分别见图8 和 9。

可以看出，在方程 (36) 中，根据受控门的定义 (20)，每个因子 $C_{|a\rangle|b\rangle|c\rangle}\left[B\left(f\,abc\right)\right]$都会在三个胶子的色荷分别为 a、b、c 时，将 B(f abc) 作用于幺正化寄存器；若胶子的态与 $|a\rangle_{g_1}|b\rangle_{g_2}|c\rangle_{g_3}$正交，则幺正化寄存器保持不变。与上一节中的 M门一样，施加 G′ 门不会使 $\mathcal{U}$ 的态递减超过 1，因为方程 (36) 中的控制态彼此正交。由于 $B(0)=\mathbb{1}$ 和 $C_{|a\rangle|b\rangle|c\rangle}[\mathbb{1}]=\mathbb{1}$，方程 (36) 中的乘积无需包含 $f^{abc}=0$的任何情形。利用方程 (18) 中所示的性质以及方程 (35) 和 (36) 中 G 和 G′ 的定义，可以验证方程 (13) 确实成立。

因此，对相应的胶子寄存器施加量子门G 即可实现三胶子相互作用。可以看出，量子门 G 和Q 不会旋转胶子寄存器中的态，因此，在包含多个三胶子相互作用的图中，相应的G 量子门可以按任意顺序施加。

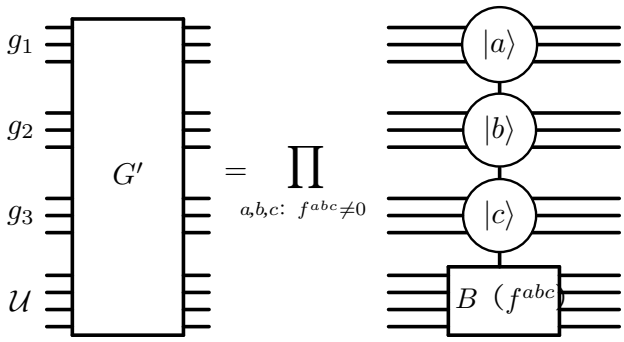


图 9：以下量子电路的图形表示 G' 门，定义见方程（36）。

3 结果

本节将推广第2.1 节介绍的方法，以模拟任意费曼图并计算其色因子。

设n_g 为图中的胶子数，n_q 为图中的夸克线数。待构造的量子电路将包含胶子寄存器、夸克寄存器和幺正化寄存器。共有n_g 个胶子寄存器，每个含有 3 个量子比特。共有n_q对夸克寄存器，每对由 2 个标记为q 和 $\tilde{q}$的寄存器组成，每个寄存器含有 2 个量子比特。幺正化寄存器含有$N_{\mathcal{U}} = \lceil \log_2(N_V + 1) \rceil$ 个量子比特，其中N_V 为费曼图中的顶点数。计算颜色因子的步骤如下：

1. 将每个寄存器 r 初始化为态 $|\Omega\rangle_r$。

2. 如方程（R_g，见方程（4），分别对每个胶子寄存器施加该操作。

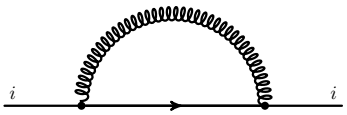
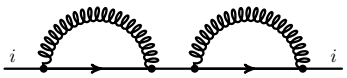
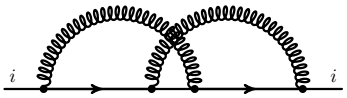
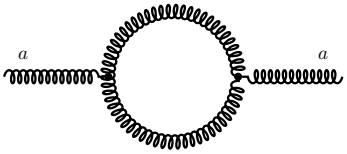
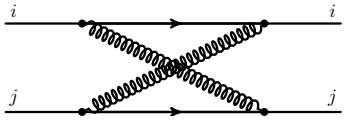
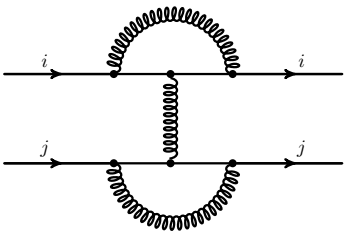
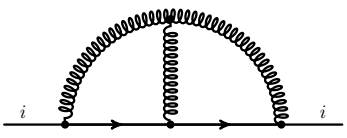
3. 对于每条夸克线，如方程（R_q），对相应的一对夸克寄存器 q 和 $\tilde{q}$施加该操作。4. 对于每个夸克-胶子相互作用顶点，对分别对应于该顶点处夸克和胶子的夸克寄存器 q 和胶子寄存器 g 施加一个Q 门。对应的 $\tilde{q}$寄存器在此不参与。5. 对于每次三胶子相互作用，对相应的三个胶子寄存器施加一个 G 门。6. 对每个胶子寄存器施加一个R_g^{-1} 门。7. 对于每条夸克线，对相应的一对夸克寄存器 q和 $\tilde{q}$施加一个R_q^{-1} 门。

在上述步骤中，第4步和第5步模拟费曼图中粒子色态的演化，其余步骤则用于对色荷求迹。请注意，针对给定夸克线的Q 门，必须按照相应相互作用在费曼图该夸克线上的出现顺序施加。除此之外，Q 门和 G 门的施加顺序不受限制。

与第2.1节中的结果类似，根据费曼规则和方程（7）、（13）以及（19），可知在步骤 7 之后，费曼图的颜色因子 $\mathcal{C}$ 将被编码在量子计算机的最终态中，即

$$\frac{1}{\mathcal{N}}\mathcal{C}\,|\Omega\rangle_{all} + (\text{terms orthogonal to } |\Omega\rangle_{all})\,, \tag{37}$$

表 1：示例费曼图的颜色因子。第一列展示费曼图，外部腿上的指标表示相同颜色。中间列给出颜色因子的解析结果。最后一列展示使用模拟量子电路运行 1 亿次后得到的各颜色因子的数值结果，以及相应的统计不确定性。

图示	解析	数值
	$C_F N = 4$	3.9988 ± 0.0012
	$C_F{}^2 N = \frac{16}{3}$	5.331 ± 0.010
	$\frac{C_F}{2} = \frac{2}{3}$	0.673 ± 0.010
	$N(N^2-1) = 24$	23.95 ± 0.03
	$\frac{(N^2-1)}{4} = 2$	2.00 ± 0.03
	0	$0.0^{+0.5}_{-0\,0}$.
	$\frac{C_F N^2}{2} = 6$	5.92 ± 0.08

其中 $\mathcal{N} = N_n{}^{q_c} \left(N^2{}_c - 1\right)^{n_g}$和

$$|\Omega\rangle_{all} = \left(\prod_{m=1}^{n_g} |\Omega\rangle_{g_m}\right)\left(\prod_{l=1}^{n_q} |\Omega\rangle_{q_l} |\Omega\rangle_{\tilde{q}_l}\right)|\Omega\rangle_{\mathcal{U}} \,. \tag{38}$$

如第 2.1 节所述，方程 (37 的结果可以通过反复运行电路并统计测量结果为[10] 态 $|\Omega\rangle_{all}$的次数来验证；也可以结合哈达玛测试（以保留相位信息）和量子振幅估计（以获得二次加速）。另一种做法是将电路的输出 (37 直接用作未来某种算法的组成部分，例如计算运动学因子并对费曼图求和的算法，或通过蒙特卡洛积分计算截面的算法。由于输出 (

[10]测量是在计算基中进行的。

可直接用作未来算法的一个组成部分，例如计算运动学因子并对费曼图求和的算法，或通过蒙特卡洛积分计算截面的算法。由于输出 (37) 是一个量子态，与相应的运动学因子结合后，将非常适用于未来计算多个图的量子干涉的研究；这或许可以通过实现现代经典计算中广泛使用的递归算法 [46] 的量子计算等效形式来完成。

为验证本文所述的方法和量子电路，我们使用 IBM QISKIT 软件包，用 PYTHON 编写了名为 QCOLOUR 的程序。[11] 使用 QCOLOUR ，我们构建了量子电路，以模拟表1所示的若干费曼图。对于每个费曼图，相应的电路在模拟的无噪声量子计算机上运行了 10^8 次，并统计输出态被测得为 $N\Omega$ 次的数量 $|\Omega\rangle_{all}$ 。由方程（37）可知，$N\Omega$ 服从二项分布：$N_\Omega \sim B\left(10^8, \left(\frac{\mathcal{C}}{\mathcal{N}}\right)^2\right)$。因此，我们推得颜色因子的绝对值为

$$|\mathcal{C}| = \mathcal{N}\sqrt{\frac{N_\Omega}{10^8}}, \tag{39}$$

其统计不确定性可使用威尔逊评分区间估算 [47]。如表1所示，利用模拟量子电路得到的色因子与解析计算得到的色因子完全一致。

可以观察到，推断出的颜色因子的相对不确定性会随着费曼图复杂度的增加而增大，但我们再次强调，此处采用的测量策略仅旨在以直观明了的方式验证这些量子电路能否正确生成态（37）。如上文及第2.1节所述，可以采用更复杂的策略来考察、测量并利用这一量子态；此外，也可以将该态用于高层算法，而非立即进行测量。因此，尽管更复杂的散射过程通常会带来更高的计算成本（与经典蒙特卡罗计算一样），但不应将表1 中的示例视为对其扩展速率的确凿说明。

4 结论

量子系统的模拟是量子计算机的一项旗舰应用，人们期待它相较于经典计算机能够带来多项式或指数级加速。本文迈出了通用微扰量子色动力学过程量子模拟的第一步。具体而言，我们设计了量子电路，用于模拟夸克和胶子相互作用中的颜色部分。为此，我们提出了幺正化寄存器 这一概念，以实现对非幺正的盖尔曼矩阵 λ_a和描述费曼图中相互作用顶点的结构常数 f^{abc} 的幺正量子电路实现。我们证明，这些量子电路可用于模拟任意费曼图的颜色部分。此外，我们利用 QISKIT 框架，在模拟的无噪声量子计算机上实现了这些量子电路，并据此计算了多个费曼图示例的颜色因子。需要强调的是，除了能够计算颜色因子外，本文提出的量子电路未来还可直接作为完整量子模拟散射振幅的组成部分。

本文所呈现的工作为未来的探索开辟了若干方向。在对费曼图的色荷部分进行本次模拟之后，这项工作的一个自然延伸

[11] 在此实现中，我们使用了 QISKIT 0.36.1 版。

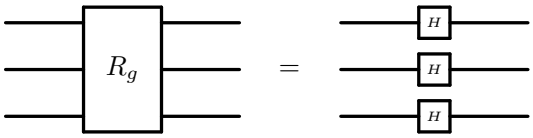


图10：R_g 门的电路图示。

是模拟运动学部分，因为本文设计的幺正化寄存器在此同样会特别有用。模拟运动学部分需要采用适当的方法，处理因运动学变量具有连续性而产生的更大希尔伯特空间。这可能需要比模拟色荷部分多得多的量子比特；但由于大型强子对撞机等对撞机探测的能标比 Λ_{QCD} 高出数个数量级，我们预计，模拟运动学部分所需的量子比特数量仍可与对同一过程进行基于格点的量子计算机模拟所需的数量相竞争。另一个自然的延伸方向是探索多个费曼图贡献之间的量子相干干涉，这正是量子计算机天然擅长处理的任务。此外，探索将本研究中的量子电路用于计算具有完整量子关联的高多重数过程也很有意义；目前，这类过程是用部分子簇射来描述的。最后，尽管本研究面向的是预计在中期投入使用的纠错量子计算机，但与此同时，针对特定近期硬件设备的噪声特性测试这些电路，并在硬件和软件上进行定制化调整，以减轻噪声及其影响，也值得探索。从长远来看，可以将所有这些方面与已知具有二次（或更优）加速效果的量子算法相结合，例如量子蒙特卡洛模拟，再在未来的物理量子计算机上实现。这将显著提升微扰量子色动力学计算的速度，并有望扩大其适用范围。

致谢

作者感谢 Fabrizio Caola、Stefano Gogioso、Michele Grossi 和 Joseph Tooby-Smith 的有益讨论。作者感谢意大利拉韦诺-蒙贝洛的 Funivia 餐厅提供了启发性的氛围，促成了这项工作。

资助信息 H.C. 的研究由 ERC 起始资助项目 804394 HIPQCD 资助。M.P. 感谢德国研究联合会（DFG）通过研究培训小组 RTG2044 提供支持。

A 其他量子门

本附录给出了以下量子门的明确定义：R_g 和R_q。这两个量子门均用于第2.1 节和第3节。我们还提供了在方程（ Λ 29）中定义的量子门的电路图。

该R_g 门由一个哈达玛门 H 构成，该门作用于胶子寄存器中的每个量子比特。由于 H 满足 $H^{-1} = H$，因此可得 $R^{-1}{}_g = R_g$。其图示见图 10。

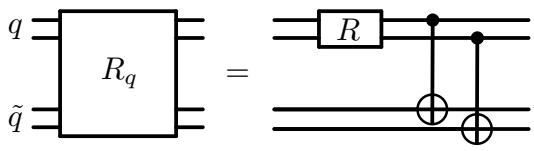


图11：R_q 门电路的图示。

该R_q 门由图 11所示的电路定义，由两个受控 X门和一个双量子比特门 R构成，定义如下：

$$R = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.1}$$

逆$R^{-1}{}_q$ 的 R_q 可通过颠倒图11 中 3 个门的顺序，并将 R 替换为其转置矩阵 R^T，轻松构造出来。

最后， Λ 门用基本门表示的显式形式见图12。矩阵 λ_a 见方程 (28)，其维数应如第 4×4 2.3 节开头所述。2.3。 M 门以类似方式构造，包含 17 个受控门，分别对应于满足方程 (a 和 i 所示条件的 17 种组合，其中 $\mu(a、i)$ 非零。3232)。然而，由于 μ 仅取 4 个不同值，我们预计通过选择合适的编码将 M 编码为更少的受控操作a 和 i 所对应的量子比特。

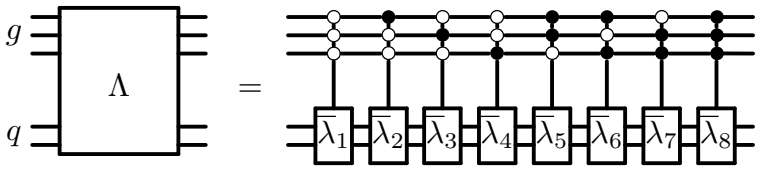


图12：显式表示以下电路的图示： Λ 门定义于方程（29）中。白色和黑色圆圈分别表示控制态为|0〉和 |1〉的受控操作。

参考文献

[1] P. W. Shor，量子计算算法：离散对数与因数分解，载于第*35*届计算机科学基础年度研讨会论文集，美国圣菲（1994），doi：10.1109/SFCS.1994.365700。[2]L. K. Grover，一种用于数据库搜索的快速量子力学算法，载于第二十八届 *ACM* 计算理论年度研讨会论文集，计算机协会，纽约，美国，ISBN 9780897917858（1996），doi：10.1145/237814.237866。[3] Y. Cao 等，量子计算时代的量子化学，Chem. Rev. **119**，10856（2019），doi：10.1021/acs.chemrev.8b00803。

[4]S. McArdle、S. Endo、A. Aspuru-Guzik、S. C. Benjamin 和 X. Yuan，量子计算化学，Rev. Mod. Phys. 92，015003（2020），doi:10.1103/RevModPhys.92.015003.[5] I. M. Georgescu、S. Ashhab 和 F. Nori，量子模拟，Rev. Mod. Phys. 86，153（2014），doi:10.1103/RevModPhys.86.153.[6] F. Tacchino、A. Chiesa、S. Carretta 和 D. Gerace，量子计算机作为通用量子模拟器：现状与展望，Adv. Quantum. Tech. 3，1900052（2019），doi:10.1002/qute.201900052.[7] N. Klco、A. Roggero 和 M. J. Savage，标准模型物理与数字量子革命：关于二者交汇的思考，Rep. Prog. Phys. 85，064301（2022），doi:10.1088/1361-6633/ac58a4.[8] C. W. Bauer 等，面向高能物理的量子模拟，PRX Quantum 4，027001（2023），doi:10.1103/prxquantum.4.027001.[9] G. Brassard、P. Høyer、M. Mosca 和 A. Tapp，量子振幅放大与估计，载于量子计算与信息，美国数学学会，普罗维登斯，美国，ISBN 9780821821404（2002），doi:10.1090/conm/305/05215.[10] D. Grinko、J. Gacon、C. Zoufal 和 S. Woerner，迭代量子振幅估计，npj Quantum Inf. 7，52（2021），doi:10.1038/s41534-021-00379-1.[11]Y. Suzuki、S. Uno、R. Raymond、T. Tanaka、T. Onodera 和 N. Yamamoto，无需相位估计的振幅估计，Quantum Inf. Proc. 19，75（2020），doi:10.1007/s11128-019-2565-2.[12]K. Nakaji，更快速的振幅估计，Quantum Inf. Comput. 20，1109（2020），doi:10.26421/QIC20.13-14-2.[13] Z. Bern 和 D. A. Kosower，规范理论中单圈振幅的颜色分解，Nucl. Phys. B 362，389（1991），doi:10.1016/0550-3213(91)90567-H.[14] J. Häkkinen 和 H. Kharraziha，Colour：用于计算 QCD 颜色因子的计算机程序，Comput. Phys. Commun. 100，311（1997），doi:10.1016/S0010-4655(96)00140-3.[15]A. Kanaki 和 C. G. Papadopoulos，HELAC：用于计算电弱螺旋度振幅的软件包，Comput. Phys. Commun. 132，306（2000），doi:10.1016/S0010-4655(00)00151-X.[16] C. G. Papadopoulos 和 M. Worek，强子对撞机上的多部分子截面，Eur. Phys. J. C 50，843（2007），doi:10.1140/epjc/s10052-007-0246-2.[17] M. Sjödahl，ColorMath——用于 SU(N_c) 颜色求和计算的软件包，Eur. Phys. J. C 73，2310（2013），doi:10.1140/epjc/s10052-013-2310-4.[18]S. Actis、A. Denner、L. Hofer、A. Scharf 和 S. Uccirati，标准模型中单圈振幅的递归生成，J. High Energy Phys. 04，037（2013），doi:10.1007/JHEP04(2013)037.[19] S. Lloyd、M. Mohseni 和 P. Rebentrost，量子主成分分析，Nat. Phys. 10，631（2014），doi:10.1038/nphys3029.

[20] S. Kimmel、C. Y.-Y. Lin、G. H. Low、M. Ozols 和 T. J. Yoder，具有最优样本复杂度的哈密顿量模拟，npj Quantum Inf. 3，13（2017），doi:10.1038/s41534-017- 0013-7.[21] J. van Apeldoorn 和 A. Gilyén，量子半定规划求解及其应用的改进，载于第46届自动机、语言与编程国际研讨会，Schloss Dagstuhl - Leibniz信息学中心，德国瓦德恩，ISBN 9783959771092（2019），doi:10.4230/LIPIcs.ICALP.2019.99.[22] A. Gilyén、Y. Su、G. H. Low 和 N. Wiebe，量子奇异值变换及其他：量子矩阵运算的指数级改进，载于第51届ACM SIGACT年度计算理论研讨会论文集，计算机协会，纽约，美国，ISBN 9781450367059（2019），doi:10.1145/3313276.3316366.[23] G. H. Low 和 I. L. Chuang，通过量子比特化进行哈密顿量模拟，Quantum 3，163（2019），doi:10.22331/q-2019-07-12-163.[24] S. Anis 等，Qiskit：用于量子计算的开源框架，Zenodo（2021），doi:10.5281/zenodo.2573505.[25] G. Agliardi、M. Grossi、M. Pellen 和 E. Prati，基本粒子过程的量子积分，物理快报B 832，137228（2022），doi:10.1016/j.physletb.2022.137228.[26] H. M. Gray 和 K. Terashi，量子计算在未来对撞机中的应用，物理学前沿 10，864823（2022），doi:10.3389/fphy.2022.864823.[27] A. Delgado 等，量子计算在高能物理数据分析中的应用，（arXiv预印本）doi:10.48550/arXiv.2203.08805.[28]A. Pérez-Salinas、J. Cruz-Martinez、A. A. Alhajri 和 S. Carrazza，利用量子计算机确定质子组成，Phys. Rev. D 103，034027（2021），doi:10.1103/PhysRevD.103.034027.[29] T. Li、X. Guo、W. K. Lai、X. Liu、E. Wang、H. Xing、D.-B. Zhang 和 S.-L. Zhu，通过量子计算研究部分子共线结构，Phys. Rev. D 105，L111502（2022），doi:10.1103/PhysRevD.105.L111502.[30] K. Bepari、S. Malik、M. Spannowsky 和 S. Williams，迈向用于螺旋度振幅和部分子簇射的量子计算算法，Phys. Rev. D 103，076020（2021），doi:10.1103/PhysRevD.103.076020.[31] S. Ramírez-Uribe、A. E. Rentería-Olivo、G. Rodrigo、G. F. R. Sborlini 和 L. V. Silva，费曼圈积分的量子算法，J. High Energy Phys. 05，100（2022），doi:10.1007/JHEP05(2022)100.[32] A. Cervera-Lierta、J. Latorre、J. Rojo 和 L. Rottoli，高能物理中的最大纠缠，SciPost Phys. 3，036（2017），doi:10.21468/SciPostPhys.3.5.036.[33] S. Fedida 和 A. Serafini，量子电动力学中的树级纠缠，Phys. Rev. D 107，116007（2023），doi:10.1103/PhysRevD.107.116007.[34] G. Clemente、A. Crippa、K. Jansen、S. Ramírez-Uribe、A. E. Rentería-Olivo、G. Rodrigo、G. F. R. Sborlini 和 L. V. Silva，用于因果圈费曼图和有向无环图的变分量子本征求解器，（arXiv预印本）doi:10.48550/arXiv.2210.13240。

[35]C. W. Bauer、B. Nachman 和 M. Freytsis，利用有效场论在量子计算机上模拟对撞机物理，Phys. Rev. Lett. **127**，212001（2021），doi:10.1103/PhysRevLett.127.212001。

[36]B. Nachman、D. Provasoli、W. A. de Jong 和 C. W. Bauer，用于高能物理模拟的量子算法，Phys. Rev. Lett. **126**，062001 (2021)，doi：10.1103/PhysRevLett.126.062001。

[37]K. Bepari、S. Malik、M. Spannowsky 和 S. Williams，利用量子漫步模拟部分子簇射，Phys. Rev. D 106, 056002 (2022)，doi:10.1103/PhysRevD.106.056002.[38] G. Gustafson、S. Prestel、M. Spannowsky 和 S. Williams，量子计算机上的对撞机事件，J. High Energy Phys. 11, 035 (2022)，doi:10.1007/JHEP11(2022)035.[39] C. Bravo-Prieto、J. Baglio、M. Cè、A. Francis、D. M. Grabowska 和 S. Carrazza，基于风格的量子生成对抗网络与蒙特卡罗事件，Quantum 6, 777 (2022)，doi:10.22331/q-2022-08-17-777.[40]O. Kiss、M. Grossi、E. Kajomovitz 和 S. Vallecorsa，用于蒙特卡罗事件生成的条件玻恩机，Phys. Rev. A 106, 022612 (2022)，doi:10.1103/PhysRevA.106.022612.[41]L. Dixon，高效计算散射振幅，（arXiv 预印本）doi:10.48550/arXiv.hep-ph/9601359.[42] M. L. Mangano，量子色动力学导论，载于1998年欧洲高能物理学校，日内瓦，瑞士（1998）。[43] R. Cleve、A. Ekert、C. Macchiavello 和 M. Mosca，重新审视量子算法，Proc. R. Soc. Lond., A: Math. Phys. Eng. Sci. 454, 339 (1998)，doi:10.1098/rspa.1998.0164.[44]M. Nielsen 和 I. Chuang，量子计算与量子信息，剑桥大学出版社，剑桥，英国，ISBN 9781139495486 (2010)，doi:10.1017/CBO9780511976667.[45]E. Johnston、N. Harrigan 和 M. Gimeno-Segovia，量子计算机编程：基本算法与代码示例，O'Reilly Media，塞巴斯托波尔，美国，ISBN 9781492039686 (2019)。[46] F. A. Berends 和 W. T. Giele，含有 n 个胶子的过程的递归计算，Nucl. Phys. B 306, 759 (1988)，doi:10.1016/0550-3213(88)90442-7.[47] E. B. Wilson，概率推断、继承律与统计推断，J. Am. Stat. Assoc. 22, 209 (1927)，doi:10.1080/01621459.1927.10502953。